

## Aplicación de la Transformada de Fourier en la determinación de patrones de difracción en cuasicristales

### Application of the Fourier Transform in the determination of diffraction patterns in quasicrystals

Rolando J. Alva Zavaleta\*

Facultad de Ciencias Naturales y Matemática, Universidad Nacional del Callao, Av. Juan Pablo II s/n – Ciudad Universitaria, Bellavista, Callao, Perú.

\* Autor correspondiente: [rjalvaz@unac.edu.pe](mailto:rjalvaz@unac.edu.pe) (R. Alva)

DOI: [10.17268/rev.cyt.2022.02.14](https://doi.org/10.17268/rev.cyt.2022.02.14)

#### RESUMEN

En la presente investigación se ha simulado el patrón de difracción de rayos X o electrones del cuasicristal de un dodecaedro estrella escalado. Se ha aplicado la transformada rápida de Fourier a la función densidad de masa que especifica la estructura tridimensional del cuasicristal a partir de dos celdas unidad. Los puntos de red, la función densidad, así como la transformada de rápida de Fourier, fueron codificados en lenguaje de programación Fortran. Se obtuvo el patrón de difracción con eje de simetría de tercer orden y de quinto orden, este último propio de los cuasicristales icosaédricos.

**Palabras clave:** cuasicristal; dodecaedro; transformada de Fourier; simulación Computacional.

#### ABSTRACT

In this research work the X-rays or electrons quasicrystalline diffraction pattern of a scaled star dodecahedron has been simulated. For this purpose, the fast Fourier transform has been applied to a mass density function that describes the three-dimensional structure constructed from the use of unit cells. Both the network points, the density function, as well as the Fourier fast transform, have been encoded in Fortran programming language. The result is the diffraction pattern with a third-order and fifth-order axis of symmetry, the latter characteristic of quasicrystals icosahedral.

**Keywords:** Quasicrystalline; dodecahedron; Fourier transform; Computational Simulation.

#### 1. INTRODUCCIÓN

Los cuasicristales son materiales con un gran potencial en el campo de las aplicaciones, dado que presentan baja fricción al deslizamiento y adhesión. Se ha investigado la forma en que los cuasicristales pueden influir en la transmisión óptica y la reflectividad, fotoluminiscencia, transporte ligero, la acción láser (Vardeny et al., 2013).

Los cuasicristales son una clase de sólidos que, al mantener un punto fijo, presentan simetrías geométricas distintas a las que ofrecen los cristales como son los ejes de rotación 5, 8, 10 o 12. Sin embargo, exhiben *patrones de difracción*, que residen en una superposición de reflexiones de Bragg tan igual como sucede en los cristales. La mayoría de cuasicristales observados son aleaciones binarias o ternarias. A los cuasicristales individuales, con el tamaño apropiado, se les pudo aplicar el método difracción tan igual como si fuese un cristal único, después de varios años a su descubrimiento, recién en el año 1987 (Yamamoto, 2008).

Existen dos tipos de cuasicristales conocidos, los cuasicristales poligonales o diédricos y los cuasicristales icosaédricos. Los primeros exhiben ejes de simetría de orden 8, 10 o 12 conocidos como octogonales, decagonales y dodecagonales, respectivamente. Estos conformados por planos que son periódicos respecto al eje normal común a ellos. Los segundos, son cuasiperiódicos en todas las direcciones. Otra clasificación es por su estabilidad térmica, como estables y metaestables. El primer grupo se obtienen por enfriamiento lento con la técnica de recocido posterior y los del segundo grupo se producen usando la técnica de hilado cuando son fundidos, así como también generan por cristalización de materiales en su masa amorfa (John R., 2014).

Después del descubrimiento de los cuasicristales, estos se supusieron como grupos atómicos o clústeres y que son estudiados experimentalmente utilizando la microscopía electrónica de transmisión de alta resolución



HRTEM (High-resolution transmission electron microscopy) de gran utilidad para su caracterización (Yamamoto, 2008). Además, se tenía que comprender cual es la razón por la que los átomos podían alcanzar una estructura con ordenamiento aperiódico. Esto ha sido la disyuntiva desde su aparición de estas estructuras dado que al parecer se debería tener informa no local, no obstante las interacciones entre los átomos en aleaciones metálicas son corto alcance (Jeong, 2007).

Levine y Steinhard (1984) compararon el patrón de difracción que ellos calcularon para un cuasicristal icosaédrico con el patrón de difracción de electrones encontrado por Shechtman y otros, para una aleación de 86% Al y 14% Mn. Como resultado de ello observaron que la posición de cada pico de difracción de electrones coincidía con la posición de un pico en el patrón de cuasicristal calculado, y además apreciaron una jerarquía de intensidades características de una cuasiperiodicidad de varios órdenes.

Gratias y Quiquandon y (2019) hicieron un recuento de los métodos cristalográficos desarrollados los últimos 25 años, desde su descubrimiento en 1982 (Shechtman, et al, 1984) hasta inicios de las de la década 1990. Para descifrar las estructuras atómicas de los cuasicristales icosaédricos estables, los átomos fueron descritos por superficies atómicas con volúmenes acotados en el espacio 3D interno cuyas intersecciones con el espacio físico son las posiciones atómicas reales.

Jiang y Zhang (2014) desarrollaron un método numérico para calcular patrones de difracción de cuasicristales con alta precisión utilizando el concepto de espacio recíproco de alta dimensión.

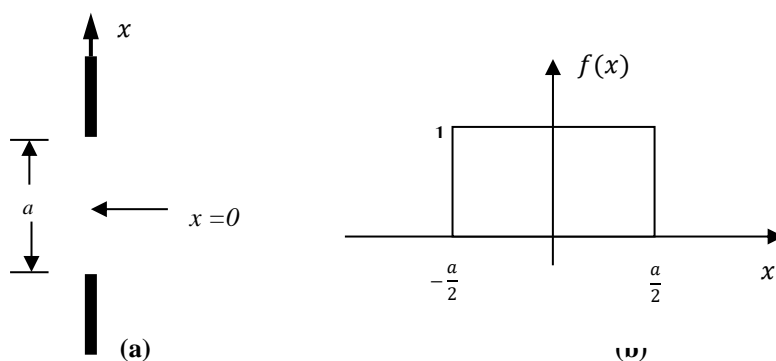
La estructura de un cuasicristal puede ser descrito a través de dos métodos distintos. El primero se conoce como el *enfoque de mosaico* y el segundo como, *proyección de una red cristalina de mayor a menor dimensionalidad* (Steurer, 2012). En el método de mosaico se utiliza celdas unitarias diferentes que, al organizarlas sin superposición, nos da una estructura cuasicristalina (Duneau y Kats, 1985).

El aprovechamiento del fenómeno de la difracción de rayos X, electrones o neutrones, ha dado lugar a técnicas indispensables para el estudio de las propiedades estructurales de los sólidos, los mismos que se comportan como rejillas de difracción (Shechtman, et al, 1984). De acuerdo a la teoría cuántica, cuando la longitud de onda de electrones y neutrones es del mismo orden de magnitud que la distancia entre los átomos del sólido, estos se comportan como ondas.

Consideremos como obstáculo, una rendija estrecha en la difracción de Fraunhofer. Este, obstáculo, se puede modelar haciendo coincidir el eje  $x$  sobre el plano perpendicular a la rendija y el eje  $y$  paralelo y equidistante a los bordes de la rendija. La transmisión de la onda a lo largo del eje  $x$  se puede representar como  $f(x)$ , llamada función transmisión. Esta nos da cuenta en que intervalo del eje  $x$  las ondas incidentes pueden atravesar en cada punto del plano. Kauppinen (2002) usa a una función transmisión  $f(x)$  para una rendija de ancho  $a$ , la cual representa como se transmite la onda a lo largo del eje  $x$ . Esta función puede expresarse como:

$$f(x) = \begin{cases} 1 & -a/2 \leq x \leq a/2 \\ 0 & x < -a/2 \text{ y } x > a/2 \end{cases} \quad (1)$$

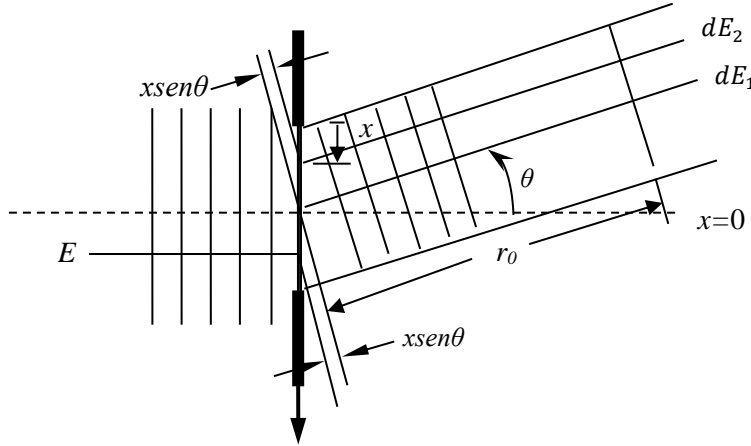
Esta representación también se le conoce como función ventana. El dibujo de la rendija y el eje  $x$ , así como la función de transmisión, se pueden observar en la figura 1.



**Figura 1.** a) Abertura de ancho  $a$  y b) función de transmisión  $f(x)$  (Kauppinen, 2002).

En la figura 2, una onda plana  $E$  choca perpendicularmente sobre la rendija y se denotan dos rayos de intensidades  $dE_1$  y  $dE_2$  de ancho infinitesimal  $dx$ , los cuales salen de la rendija paralelos entre sí, formando un ángulo  $\theta$  respecto a la dirección de incidencia. En esta aproximación, se considera que el ángulo  $\theta$  es muy pequeño, tal que  $dx \approx dx \cos \theta$ . Además, se ha elegido que  $dE_1$  sale del centro de la rendija y  $dE_2$  sale paralelo a una distancia  $x$  del centro.

Un haz de ondas planas incidente de amplitud  $dE$  de ancho  $dx$  es representado en la ecuación (2),



**Figura 2.** Difracción de dos rayos de luz a través de una abertura estrecha (Kauppinen, 2002).

$$dE = E_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} dx = E_0 e^{i2\pi r/\lambda} e^{-i\omega t} dx \quad (2)$$

donde  $E_0$  es la amplitud por unidad de longitud de la onda plana. Esta esta expresión incluyendo la función de transmisión  $f(x)$ , se puede escribir:

$$dE_1 = f(0) E_0 e^{\frac{i2\pi r_0}{\lambda}} e^{-i\omega t} dx \quad (3)$$

$$dE_2 = f(x) E_0 e^{\frac{i2\pi(r_0 + x \text{sen} \theta)}{\lambda}} e^{-i\omega t} dx \quad (4)$$

Todos los rayos de luz, considerando los anteriores, que se difracten a través de la apertura con el mismo ángulo  $\theta$  respecto al eje  $y$ , se superponen presentando interferencia. Consecuentemente, la onda total, por unidad de longitud, de salida en esta dirección es:

$$E_{salida} = \sum_i dE_i = e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) E_0 e^{i2\pi(r_0 + x \text{sen} \theta)/\lambda} dx \quad (5)$$

Por tanto, la intensidad de salida tiene el valor:

$$I_{salida} = E_{salida}^* E_{salida}$$

Al operar  $I_{salida}$  podemos despreciar el término dependiente del tiempo, ya que  $e^{-i\omega t} e^{i\omega t} = 1$ . Asimismo, también podemos despreciar el término  $E_0 e^{i2\pi r_0/\lambda}$  porque es una constante. Consecuentemente, la onda plana dispersada en la dirección  $\theta$ , respecto al eje  $y$ , queda representada como:

$$E_{salida} = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{i2\pi v x \text{sen} \theta} dx \quad (6)$$

Si se consideran solamente variables espaciales, podemos utilizar el cambio de variable siguiente:

$$s = v \text{sen} \theta \quad (7)$$

Finalmente, la onda puede quedar expresada como

$$E_{salida}(s) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{i2\pi sx} dx \quad (8)$$

Aquí  $E_{salida}(s)$  representa a la transformada de Fourier de  $f(x)$ . De este análisis concluimos que la distribución de amplitud espacial de la onda dispersada es la transformada de Fourier de la función de transmisión que representa al obstáculo (Kauppinen J., 2002).

La transformada de Fourier para datos discretos tiene aplicaciones en diferentes campos de las ciencias, y de las ingenierías. En física se utiliza en difracción de la luz, la eliminación de ruido en señales de sonido, procesamiento de imágenes, análisis de sustancias, entre otras aplicaciones. En la presente investigación se usó la transformada de Fourier en tres dimensiones a estructuras cuasiperiódicas.

Press et al. (1992), establece que la transformada de Fourier no solo se puede aplicar a señales  $f(x)$  que dependen del tiempo sino también a señales que dependen de la posición. Por tanto,  $x$  puede representar a cualquiera de estos dos tipos de variables. En Física del Estado Sólido  $x$  serán distancias expresadas en **unidades interatómicas**. En este caso, la transformada  $F(v)$ , de la señal  $f(x)$ , será una función que depende de la frecuencia, donde  $v \approx 1/x$ , por lo que asumirá unidades de ciclos **por unidad interatómica**.

La transformada de Fourier directa para una función continua  $f(x)$ , es:

$$F(v) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{i2\pi vx} dx \quad (9)$$

En contrario, la transformada de Fourier inversa  $F(v)$  se calcula a través de:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(v)e^{-i2\pi vx} dx \quad (10)$$

La función  $f(x)$  a procesar también puede representar a una señal discreta, que puede haber sido obtenida de la salida de un equipo o instrumento de laboratorio o también como resultado de la aplicación de un algoritmo numérico, ya sea que la señal dependa del tiempo o de la posición.

En todos los casos resulta necesario construir un algoritmo de la transformada de Fourier, pero que sea aplicable a señales discretas. A esta se le conoce como la transformada de Fourier discreta DFT (*Discrete Fourier Transform*).

Para poder calcular la transformada discreta de Fourier de una señal  $f(x)$ , esta debe discretizada a intervalos de longitud iguales a  $\Delta$ . La serie de valores muestreados discretos son expresados como:

$$f_k \equiv f(x_k) = f(k\Delta) \quad (11)$$

donde el subíndice  $k$  corre para la todos los  $N$  datos muestreados, según:

$$k = 0, 1, 2, 3, \dots, N - 1.$$

Ahora la transformada de Fourier será discreta y la representaremos como  $F_n \equiv F(v_n)$ . Como tenemos  $N$  de datos muestreados  $f_k$  con ellos solo podemos calcular  $N$  valores de las componentes de la transformada de Fourier  $F_n$ , las cuales serán independientes.

A la inversa del doble del intervalo de muestreo  $1/2\Delta$  se le conoce como frecuencia Nyquist  $v_N$ , la cual representa al número mínimo de valores muestreados por ciclo que es necesario para obtener la transformada de Fourier sin que esta produzca el efecto de aliasing (Que la transformada no presente solapamiento). Es decir, esta frecuencia crítica es:

$$v_N \equiv \frac{1}{2\Delta}. \quad (12)$$

Además, esta frecuencia  $v_N$  define los límites del dominio de la transformada  $F_n$ , tal como:

$$-v_N < v_n < v_N \quad \text{o} \quad -\frac{1}{2\Delta} < v_n < \frac{1}{2\Delta} \quad (13)$$



Aquí,  $[W^{nk}]$  será una matriz cuadrada de tamaño  $n \times k$  y que, según la ecuación (17), debe multiplicada por el vector columna  $f(k)$ . **Consecuente para calcular** la transformada de Fourier discreta unidimensional se necesitan  $N \times N$  multiplicaciones y  $N(N - 1)$ , todas ellas complejas. Un algoritmo que sea eficiente de tal forma que nos disminuya estos números de operaciones se conoce la transformada rápida de Fourier, lo cual disminuye notablemente el tiempo de cálculo. Se debe tener en cuenta también que la señal  $f(k)$  no solo puede asumir valores reales sino también valores complejos

Extendiendo el algoritmo al caso bidimensional, cuando la señal a muestrear es  $f(x_1, x_2)$ . Ahora el muestreo se realiza a intervalos  $\Delta_1$  en el eje 1 y  $\Delta_2$  en el eje 2. Al asumir las variables independientes los valores discretos  $x_1 = k_1 \Delta_1$  y  $x_2 = k_2 \Delta_2$  la función  $f$  dependerá de los subíndices  $k_1$  y  $k_2$  como  $f(k_1, k_2)$ , donde los índices asumirán los valores de los intervalos  $0 \leq k_1 \leq N_1 - 1$  y  $0 \leq k_2 \leq N_2 - 1$ . La transformada de Fourier discreta de esta señal será otra función  $F(n_1, n_2)$ , ahora dependiendo de los subíndices  $n_1$  y  $n_2$ , la cual se define como:

$$F(n_1, n_2) = \sum_{k_2=0}^{N_2-1} \sum_{k_1=0}^{N_1-1} W_2^{n_2 k_2} W_1^{n_1 k_1} f(k_1, k_2) \quad (19)$$

Donde  $W_1 = e^{i2\pi/N_1}$  y  $W_2 = e^{i2\pi/N_2}$ . Al sacar el exponencial de los "subíndices 2"  $W_2^{n_2 k_2}$  fuera de la suma sobre  $k_1$ , o al invertir el orden de la suma y sacar los "subíndices 1" fuera de la suma sobre  $k_2$ , se puede observar que es posible obtener la FFT bidimensional mediante el cálculo de dos FFT unidimensionales secuencialmente en cada índice de la función original, tal como

$$F(n_1, n_2) = \sum_{k_2=0}^{N_2-1} W_2^{n_2 k_2} \left( \sum_{k_1=0}^{N_1-1} W_1^{n_1 k_1} f(k_1, k_2) \right) \quad (20)$$

$$F(n_1, n_2) = \sum_{k_1=0}^{N_1-1} W_1^{n_1 k_1} \left( \sum_{k_2=0}^{N_2-1} W_2^{n_2 k_2} f(k_1, k_2) \right) \quad (21)$$

Programar una FFT bidimensional usando las ecuaciones (20) y (21) no es una técnica recomendada. Por ello se debe usar una rutina FFT multidimensional.

Igual que en el caso unidimensional, se requiere que  $N_1$  y  $N_2$  sean potencias de 2. Como el objeto de estudio es un cuasicristal, se necesita aplicar el algoritmo de la FFT multidimensional, de donde se obtiene el algoritmo para el caso tridimensional.

La extensión de la expresión de la ecuación (19) a la DFT de  $D$  dimensiones, se representa a continuación:

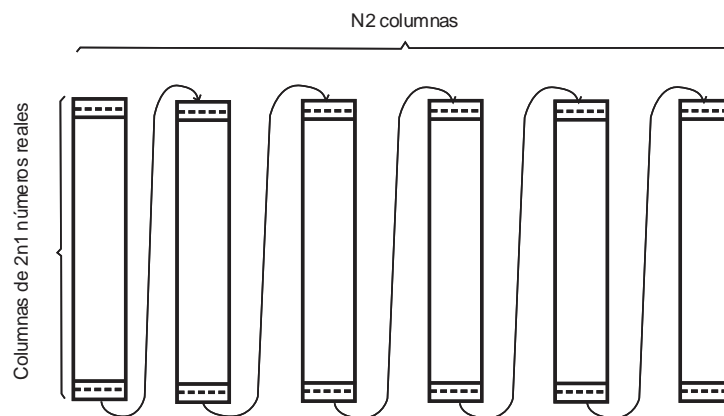
$$F(n_1, n_2, \dots, n_D) = \sum_{k_D=0}^{N_D-1} \dots \sum_{k_2=0}^{N_2-1} \sum_{k_1=0}^{N_1-1} W_D^{n_D k_D} \dots W_2^{n_2 k_2} W_1^{n_1 k_1} f(k_1, k_2, \dots, k_D) \quad (22)$$

Ahora, los índices cambian según:  $n_1, k_1$  varían a partir de 0 hasta  $N_1 - 1$ ;  $n_2, k_2$  varían a partir de 0 hasta  $N_2 - 1$ ;  $n_D, k_D$  varía a partir de 0 hasta  $N_D - 1$

La mayoría de las otras características de las FFT multidimensionales también son análogas a las características del caso unidimensional, sino que esta vez las frecuencias se organizan en orden envolvente en la transformación, pero ahora para cada dimensión por separado y los datos de entrada como si estuvieran envueltos.

La rutina que se utiliza para calcular la transformada de Fourier multidimensional cuando los valores de entrada son números complejos, es la subrutina diseñada en fortran `fourn.for`. Al ser esta implementada con la subrutina `rlft3.for` y su programa principal, estas han permitido determinar la transformada de Fourier tridimensional cuando los valores de entrada han sido reales. La primera subrutina requiere que los datos de entrada multidimensionales este ordenados como un arreglo unidimensional (Press et al., 1992).

El gráfico de la forma en cómo deben ser ordenados los valores de entrada y salida, los cuales fueron números complejos, se puede visualizar en la figura 3.

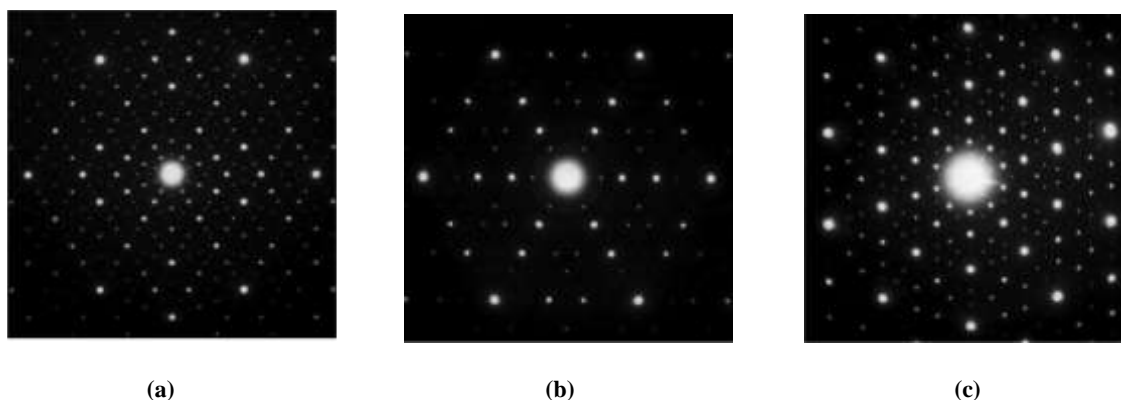


**Figura 3.** Ordenamiento del arreglo bidimensional como un arreglo Unidimensional (Press et al., 1992).

Alva (2013), elaboró varios programas principales utilizando estas subrutinas obteniendo así un programa en Fortran de la Transformada Rápida de Fourier que los usó para la determinación de patrones de difracción de cristales y cuasicristales.

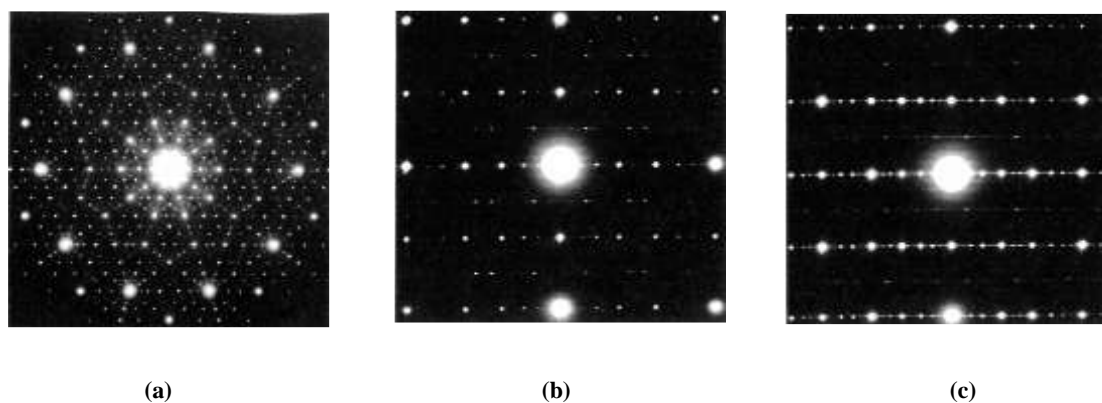
Las características de los patrones de difracción de los cuasicristales es que además de presentar simetría rotacional de orden 5, 8, 10 y 12, se observa los máximos de interferencia como una distribución discreta de puntos brillantes. También se observa en ellos que los puntos brillantes presentan la propiedad de autosimilitud, es decir se observa la misma distribución de estos puntos e intensidades a diferentes escalas. Por último, en la distribución de puntos brillantes de los patrones de difracción no se observa periodicidad o simetría traslacional.

Los *patrones de difracción* contienen una gran cantidad de puntos brillantes, muy tenues que tienen una disposición aperiódica o cuasiperiódica. Esta disposición solo puede describirse mediante la fase de control de calidad icosaédrica en un espacio que tiene seis dimensiones en lugar de tres (Markoli et al., 2010).



**Figura 4.** Patrones de difracción del  $\text{Al}_{69.5}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_{9.5}$  en su fase icosaédrica: (a) Visto a través del eje de simetría de segundo orden, (b) Visto a través del eje de simetría de tercer orden, y (c) Visto a través del eje de simetría de quinto orden (Vesilov et al., 2010).

El método computacional aplicado en el presente trabajo permitió simular de los patrones de difracción de un cuasicristal del tipo *dodecaedro estrella escalado* (Cerna, 2008), el cual presenta un eje de simetría de quinto orden y un eje de simetría de tercer orden. Se utilizó la *transformada de Fourier*, específicamente, se implementó el programa computacional utilizando el algoritmo de la *Transformada Rápida de Fourier*.



**Figura 5.** Patrones de difracción del  $\text{Al} \pm \text{Ni} \pm \text{Co}$  con alto contenido de Co en su fase decagonal: (a) Visto a través del eje de simetría de orden diez, y (b, c) Vistos a través de los ejes de simetría de segundo orden A2P y A2D, respectivamente (Vesilov et al., 2010).

## 2. MATERIALES Y MÉTODOS

El objetivo de la investigación fue determinar el patrón de difracción de un cuasicristal tridimensional utilizando como herramienta computacional el algoritmo de la transformada rápida de Fourier (FFT) así como otros algoritmos para la construcción de puntos de red y de su función densidad.

Se comenzó la investigación observando los alcances y las limitaciones para la aplicación de los algoritmos de la DFT el de la FFT, para luego proceder a sus aplicaciones a los datos de entrada. Para cada algoritmo se diseñó; primero de la transformada discreta de Fourier y luego de la transformada rápida de Fourier, para después proceder a su respectiva aplicación, a través de programas computacionales en Fortran, tanto a cristales, así como a cuasicristales simulados computacionalmente.

Después se construyó computacionalmente redes para algunas estructuras cristalinas y otras cuasicristalinas, unidimensionales, bidimensionales y tridimensionales, todas ellas diseñadas en Fortran. Así se generó todos los puntos de red para cada estructura los cuales fueron almacenados en un archivo para ser usados posteriormente por otros programas computacionales.

Específicamente, para estructuras cristalinas, se ha elaborado programas computacionales para simular a una red en una dimensión con parámetro de red constante, para una red cristalina de celda cuadrada y para una red cristalina cúbica. Para los cuasicristales se ha diseñado programas computacionales de la función densidad de red de Fibonacci, así como la red de Penrose bidimensional.

Se ha construido una malla considerando la dimensionalidad según sea el caso. Después, utilizando un algoritmo se ha insertado los puntos de cada red a los puntos de esta gran malla observándose puntos de esta no ocupados. Teniendo la malla con puntos ocupados y no ocupados se ha construido la función densidad discreta asignando el valor de la función densidad igual a uno en el punto de la gran malla que contenía un punto de red en estudio y asignando el valor cero a los puntos que no fueron ocupados por ningún punto de red de las estructuras en estudio. Las funciones discretas de transferencia así elaboradas, han sido útiles para la validación del programa computacional de la transformada rápida de Fourier.

Por otro lado, utilizando las subrutinas `rlft3.for` y `fourn.for` (Press et al., 1992) y considerando una programación estructurada, se ha diseñado para cada caso un programa principal para estos subprogramas, obteniéndose así el programa computacional completo de la transformada rápida de Fourier para su aplicación en cada función de densidad discreta.

Inicialmente se ha aplicado la transformada de Fourier a las funciones densidad discreta de las tres estructuras cristalinas y de dos cuasicristalinas mencionadas, con el objeto de validar la técnica de determinación del patrón de difracción utilizando la Transformada Rápida de Fourier.

Después de la validación de los programas de la función densidad, de la transformada de Fourier y la técnica de lectura de datos, se procesó a las coordenadas (x,y,z) de los datos correspondientes a 3969 puntos de la red del clúster dodecaedro estrella escalado. Para este caso se ha elaborado una malla cúbica tridimensional de  $134 \times 217,728$  puntos. En esta malla se ha insertado los puntos de red del cuasicristal, observándose puntos de la gran malla vacíos y otros puntos ocupados los puntos de red del cuasicristal.



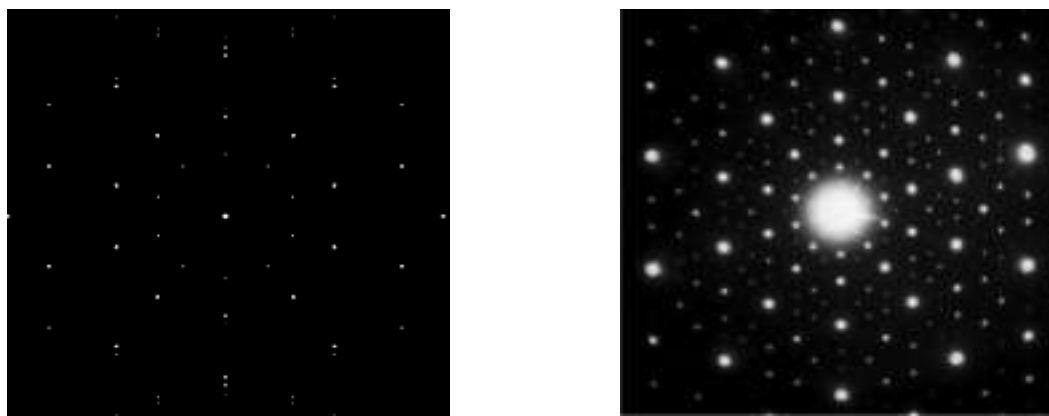
La función densidad discreta, al igual que en los casos anteriores, se ha construido utilizando la gran malla cúbica. La técnica consistió en que utilizando las coordenadas de un punto de red del dodecaedro estrella escalado se contrastó con cada uno de las coordenadas de la malla. Si había coincidencia de estas coordenadas se le asignaba a la función densidad el valor uno. A los puntos de la malla que no coincidieron con ninguno de los puntos del dodecaedro estrella escalado se le asignó el valor cero. De esta forma la función densidad discreta se representó a través de cuatro variables, tres para la posición de cada punto de red cuasicristalina y una cuarta para representar el valor de la densidad.

Por último, a la función de densidad discreta del cuasicristal se le aplicó la transformada rápida de Fourier en tres dimensiones, obteniéndose los patrones de difracción, en los cuales tres coordenadas representan los puntos de la transformada y uno para la intensidad de la dispersión.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La aplicación de la transformada rápida de Fourier (FFT) a la red cuasicristalina correspondiente a un dodecaedro estrella escalado construido con 3969 puntos de red, ha producido los patrones de difracción con simetrías que se presentan a continuación:

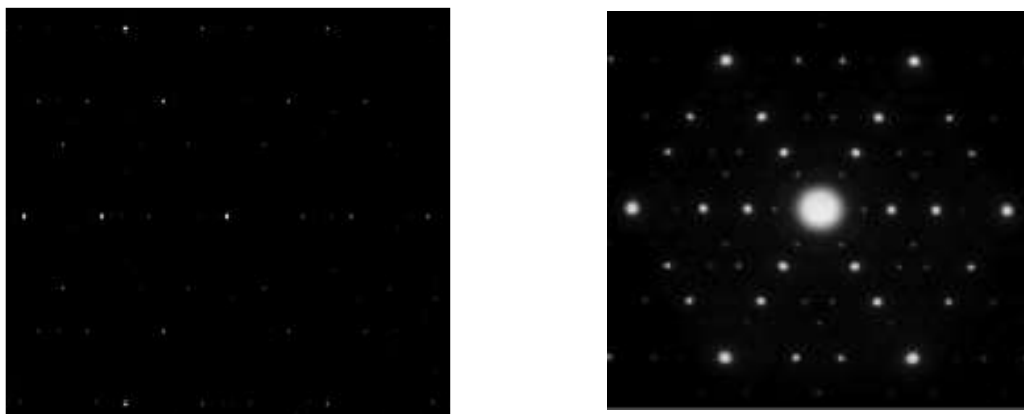
El primer patrón de difracción obtenido se presenta en la Figura 6. Haciendo el contraste entre el patrón de difracción experimental obtenido por difracción de electrones de la fase icosaédrica del  $\text{Al}_{69.5}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_9$ , de la figura 4c y el patrón de difracción obtenido en la presente investigación figura 6a se observa una gran similitud ya que tienen la misma forma de distribución de puntos, y lo fundamental es que ambos presentan ejes de simetría de quinto orden.



**Figura 6:** Patrones con eje de simetría de quinto orden (icosaédrica): (a) Izquierda: patrón de difracción simulado. (b) Derecha: patrón de difracción experimental.

Asimismo, podemos observar aquí que ambos patrones de difracción presentan una disminución en la intensidad de dispersión desde su centro en la dirección radial. La diferencia de intensidad en cada punto de los patrones es que en el simulado todavía está compuesto por un motivo en el cual no se ha considerado sus dimensiones, caso distinto al experimental que presenta un motivo relacionado con los componentes de la aleación.

El segundo patrón de difracción obtenido se presenta en la Figura 7. Aquí, se observa el contraste entre el patrón de difracción experimental obtenido por difracción de electrones de la fase icosaédrica del  $\text{Al}_{69.5}\text{Pd}_{21}\text{Mn}_9$ . De la figura 4b y el patrón de difracción obtenido en la presente investigación figura 7 se observa una gran similitud y lo fundamental es que ambos presentan ejes de simetría de segundo orden.



**Figura 7:** Patrones con eje de simetría de tercer orden: (a) Izquierda: patrón de difracción simulado. (b) Derecha: patrón de difracción experimental.

Es necesario señalar que ambos patrones de difracción presentan una disminución en la intensidad de dispersión desde su centro en la dirección radial. La diferencia de intensidad en cada punto de los patrones es que en el simulado todavía está compuesto por un motivo dispersión en el cual no se ha considerado sus dimensiones.

#### 4. CONCLUSIONES

Se observa que la transformada rápida de Fourier es una herramienta apropiada para simular computacionalmente los patrones de difracción de los cuasicristales.

El muestreo a frecuencia constante sobre los puntos de red de un cuasicristal, en la dirección de sus ejes, es una técnica apropiada para obtener la función densidad. La aplicación de la transformada rápida de Fourier a esta función se puede determinar los patrones de difracción con buen contraste con los obtenidos experimentalmente, a pesar de que no existe periodicidad de corto alcance en los puntos de red (Alva, 2013).

Los patrones de difracción obtenidos evidencian que el clúster cuasicristalino correspondiente a un dodecaedro estrella escalado, es un modelo apropiado para visualizar patrones con simetrías de orden 5 y 3.

Los alcances de la presente investigación permiten comprender que la transformada de Fourier puede ser utilizada para determinar los ejes de simetría presentes en cualquier modelo de una estructura cuasicristalina que se desea explorar.

Para obtener mayor resolución de los patrones de difracción, utilizando esta técnica, se requiere aumentar el tamaño del dodecaedro estrella, consecuentemente también aumentará el tamaño de la malla y de la función densidad. Al aumentar la cantidad de datos a procesar, el tiempo de cálculo para obtener la transformada de Fourier aumentará notablemente por lo que se debe recurrir a otros esquemas de programación como es la programación paralela.

#### REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alva, R. 2013. Simulación computacional del patrón de difracción de un cluster cuasicristalino correspondiente a un dodecaedro estrella escalado. Tesis de Maestría, Pontificia Universidad Católica del Perú, Lima. Perú. 121pp.
- Vardeny, Z.; Nahata, A.; Agrawal, A. 2013. Optics of photonic quasicrystals. *Nature Photonics* 7: 177-187.
- Cerna, E. 2008, Modelo de Cluster dodecaedro estrella escalado para cuasicristales icosaédricos. Tesis de Maestría, Pontificia Universidad Católica del Perú, Lima. Perú. 101 pp.
- Duneau, M.; Katz, A. 1985. Quasiperiodic patterns. *Physical Review Letters* 54: 2688–2691.
- Jeong, C. 2007. Growing Perfect Decagonal Quasicrystals by Local Rules. *Physical Review Letters* 98: 135501.
- Jiang, K.; Zhang, P. 2014. Numerical methods for quasicrystals. *Journal of Computational Physics* 256: 428-440.
- Kauppinen, J.; Partanen, J. 2001. *Fourier Transforms in spectroscopy*. Editorial Wiley-VCH Verlag GmbH. Berlin, Alemania. 267 pp.

- Levine, D.; Steinhard, P. 1984. Quasicrystals: a new class of ordered structures. *Physical Review Letters* 53: 2477.
- Markoli, B.; Bončina, T; Zupanič, F. 2010. TEM investigations of icosahedral quasicrystal in Al-based alloys. *Microscopy: Science, Technology, Applications and Education* 3: 1853-1859.
- Press, W.; Teukolsky, S.; Vetterling, W.; Flannery, B. 1992. *Numerical recipes in Fortran 77*. 2da Edición. Editorial Cambridge University Press. New York, United States of America. 973 pp.
- Gratias, D.; Quiquandon, M. D. 2019. Discovery of quasicrystals: The early days, *Comptes Rendus Physique* 20: 803-819.
- Shechtman, D.M.; Blech, I.; Gratias D.; Cahn J.W. 1984. "Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry". *Physical Review Letters* 53: 1951-1953.
- Steurer, W. 2012. Why are quasicrystals quasiperiodic? *Chemical Society Reviews* 41: 6719–6729.
- Yamamoto, A. 2008. Software package e for structure analysis of quasicrystal. *Science and Technology Advanced Materials* 9: 1-14