



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

UN ESTUDIO DE OSCILACIONES NO-LINEALES EN SISTEMAS NO-PERIODICOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C O

P R E S E N T A :

ISRAEL LIMAS CERON



FACULTAD DE CIENCIAS UNAM

DIRECTOR DE TESIS: DR. GERARDO GARCIA NAUMIS



2005

m343867



UNIVERSIDAD NACIONAL  
 AV. ING. A. H. GARCÍA  
 17120

**ACT. MAURICIO AGUILAR GONZÁLEZ**  
**Jefe de la División de Estudios Profesionales de la**  
**Facultad de Ciencias**  
**Presente**

Comunicamos a usted qué hemos revisado el trabajo escrito:  
 "Un estudio de oscilaciones no-lineales en sistemas no-periódicos"

realizado por Limas Cerón Israel

con número de cuenta 9232985-8 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario Dr. Gerardo García Naumis

Propietario Dr. Chumin Wang Chen

Propietario Dr. Jorge Fujioka Rojas

Suplente Dra. Vicenta Sánchez Morales

Suplente Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes

Consejo Departamental de Física

*Alicia Zarzosa Pérez*  
 M. EN C. ALICIA ZARZOSA PEREZ



Agradecimientos: Proyecto DGAPA-IN108502-3.

A mis padres.

El presente trabajo tiene por objeto el estudio de los efectos de las oscilaciones no lineales en sistemas cuasiperiódicos. Para ello primero se hace una revisión de la teoría de oscilaciones no-lineales en sistemas de pocos cuerpos, y después se extiende a redes unidimensionales con diferentes tipos de orden en la secuencia de masas o resortes. La tesis se divide en 6 capítulos. En el primero se hace una introducción a los cuasicristales así como a los sistemas no lineales. En el capítulo 2 se estudia un sistema de pocas partículas para ilustrar los efectos de la no-linealidad. En el capítulo 3 se desarrolla un método basado en el análisis de Fourier para encontrar los modos propios de vibración en sistemas de muchos cuerpos, el cual se utiliza en el capítulo 5 para encontrar las propiedades de sistemas cuasiperiódicos. Finalmente, en el último capítulo se dan las conclusiones de este trabajo. Se incorpora en el apéndice A el código computacional para las simulaciones realizadas; y en el apéndice B se presenta el artículo publicado con los resultados obtenidos en esta tesis.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
1.1. Cuasicristales . . . . .	5
1.1.1. Generalidades . . . . .	5
1.1.2. Propiedades físicas de cuasicristales . . . . .	10
1.2. Vibraciones no-lineales en redes . . . . .	11
<b>2. Teoría de vibraciones.</b>	<b>14</b>
2.1. Sistemas de una partícula. . . . .	14
2.2. Sistemas de más de una partícula. . . . .	15
2.2.1. Sistemas no-lineales. . . . .	17
<b>3. Método para la obtención del espectro.</b>	<b>22</b>
<b>4. Efectos no lineales en sistemas de pocas partículas.</b>	<b>31</b>
<b>5. Efectos no lineales en sistemas de muchas partículas.</b>	<b>41</b>
<b>6. Conclusiones</b>	<b>46</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>48</b>
<b>A. Programa en MATLAB</b>	<b>50</b>
<b>B. Artículo Publicado</b>	<b>58</b>
B.1. I. Limas, G.G. Naumis, F. Salazar y C. Wang, Physics Letters A, 337 (2005) 141. . . . .	58

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Cuasicristales

#### 1.1.1. Generalidades

Los materiales sólidos se clasificaban hasta 1984 en cristales y amorfos, según el tipo de ordenamiento atómico en el espacio. Los cristales son materiales que presentan un orden en su arreglo molecular, el cual es periódico, por lo cual se encuentra el mismo arreglo después de realizar una translación de coordenadas dentro del cristal [1]. La base de un cristal es el conjunto de átomos, moléculas, iones, etc. que se asocian a puntos en el espacio. La estructura cristalina es el arreglo periódico de esos puntos, el cual se llama red. Esta estructura de puntos periódicos se extiende en todas direcciones dentro del cristal, teniendo en cuenta que para cada dirección hay un espaciamiento entre los puntos particular, lo cual da lugar a propiedades físicas que dependen de la dirección u orientación del cristal. La celda unitaria es el grupo de puntos de red que pueden construir la estructura cristalina completa por la reproducción de la misma. Dado un cristal, se pueden construir varias celdas unitarias con distintos puntos de red. La celda primitiva se define como la celda unitaria de volumen mínimo. Los vectores primitivos son los vectores linealmente independientes que unen los punto de la celda primitiva [2].

El orden de largo alcance es la característica esencial de un estado cristalino. Este ordenamiento de largo alcance en el espacio real se refleja en el patrón de difracción de rayos X de un cristal, formado por puntos bien definidos, debido a que los planos atómicos actúan como una rejilla de difracción. En un material amorfo, se presenta orden de corto alcance, esto es, que cada molécula puede tener la misma distribución local de átomos en todo el material, pero no la misma distribución de moléculas en todo el material. Esto puede verse en el patrón de difracción de rayos X del material, el cual consiste en anillos concéntricos de luz y sombra, de los cuales la distancia entre los máximos de luz en corte transversal del patrón permite calcular la distancia promedio entre los átomos de la molécula de que se trate.

En 1984 D. Shechtman et. al. [3] encontraron que mediante el enfriamiento rápido de una mezcla líquida fundida de aluminio y magnesio, se formaba una aleación cuyo patrón de difracción presentaba puntos discretos como en un cristal, pero con una simetría prohibida desde el punto de vista cristalográfico, ya que tenía las simetrías de un icosaedro (ver figura 1.1). A esta nueva fase se le llamó icosaedral. Posteriormente, se encontraron muchos otros sistemas formados por aleaciones metálicas [3, 4], que tienen simetrías prohibidas cristalográficamente, pero con puntos de difracción discretos. A estos materiales se les llama cuasicristales.

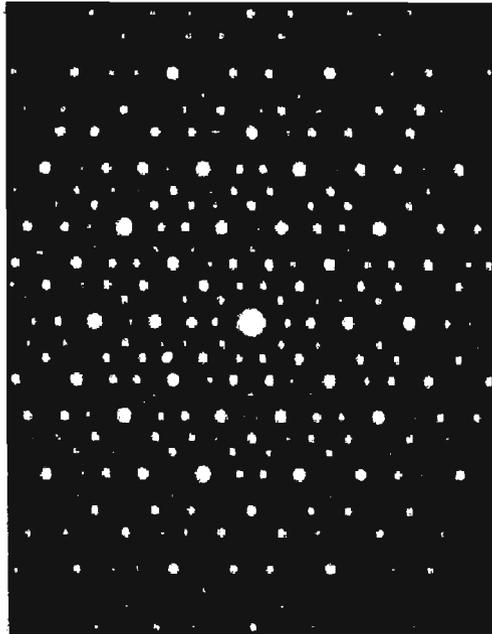


Figura 1.1: Patrón de difracción electrónica obtenido de una aleación de aluminio con manganeso [3].

Aunque el descubrimiento de los cuasicristales fue ciertamente desconcertante; por ese entonces ya existían varias propuestas teóricas que permitían entender la estructura de dichos materiales. En particular, hacía algunos años que el cristalógrafo Alan MacKay había demostrado [5, 6] que el mosaico de Penrose (figura 1.2), presentaba características de difracción similares a las de un cristal pero con simetrías prohibidas. Aunque dicho mosaico fue inventado simplemente como un ejemplo de una manera de llenar el plano con dos mosaicos distintos de forma no periódica, el trabajo posterior de De Bruijn [7] mostró que dichos mosaicos eran ejemplos de estructuras cuasiperiódicas, las cuales habían sido estudiadas en el contexto de las funciones cuasiperiódicas durante la década de 1930.

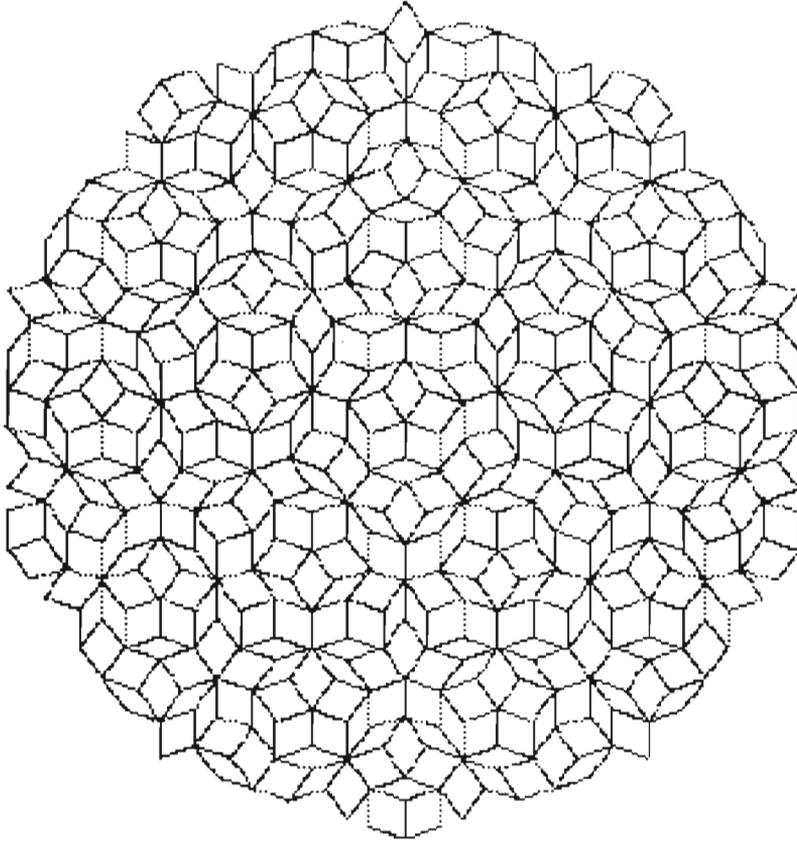


Figura 1.2: Mosaico de Penrose, formado mediante dos celdas básicas. El patrón de difracción de este mosaico está formado por picos discretos con simetría diez. Se piensa que los cuasicristales tienen una estructura similar.

Dichas funciones, son aquellas que sin ser periódicas, pueden expresarse como una serie de Fourier. Por ejemplo, la función

$$f(x) = \cos(x) + \cos(\alpha x)$$

sólo es periódica si  $\alpha$  es un número racional; en caso de ser un número irracional, la función  $f(x)$  no cumple con la condición de periodicidad, es decir, no existe una  $T$  que cumpla con

$$f(x) = f(x + T).$$

Sin embargo,  $f(x)$  tiene la forma explícita de una serie de Fourier, en la cual aparecen dos períodos inconmensurables entre sí,  $2\pi$  y  $2\pi/\alpha$ . Esto sugiere que la dimensión del espacio recíproco de dicha función, es decir, el número de vectores

base en el espacio de Fourier requeridos para generar la función sea mayor que uno, dado que se requieren dos vectores base incommensurables para generar los armónicos de Fourier que permiten construir  $f(x)$ . Esta es una característica primordial de los cuasicristales: la dimensionalidad de su espacio recíproco es mayor a la dimensionalidad del espacio real. Esto se traduce en el hecho de que para asignarle índices al patrón de difracción, se requieren más de tres vectores recíprocos [8]. Así, para asignarle índices al patrón de difracción de una fase icosaedra, deben usarse seis índices, correspondientes a las combinaciones lineales de seis vectores recíprocos.

Dado que para generar el patrón de difracción de un cuasicristal deben usarse más vectores base que los tres usuales, enseguida se pensó en que las redes podrían obtenerse de proyectar una estructura periódica en dimensiones mayores de 3. Una vez más, podemos usar a  $f(x)$  para explicar esto. Consideremos ahora una función  $f(x, y)$  de dos variables independientes  $x$  y  $y$

$$f(x, y) = \cos(x) + \cos(y)$$

esta función es claramente periódica. Si nos fijamos solamente en la línea  $y = \alpha x$  se recupera la función original  $f(x)$ . Este ejemplo tan simple, muestra como puede obtenerse una función cuasiperiódica mediante el proceso de tomar un subespacio de una función periódica. Un punto importante que debe destacarse, es que por el hecho de que el patrón de difracción se construye con más de tres vectores incommensurables, las combinaciones lineales de dichos vectores llenarán densamente el espacio recíproco, es decir, casi en cualquier punto del espacio recíproco habrá un punto de difracción, aún si su intensidad es muy pequeña. Si pensamos en que cada punto de difracción está relacionado con el inverso de una longitud característica del sistema, es claro que los cuasicristales presentan una infinidad de longitudes características, por lo cual resultan tener invarianza de escala y de ahí se sigue que tienen propiedades fractales.

Uno de los modelos unidimensionales de cuasicristales más conocido es la cadena de Fibonacci. Para construirla hay varios métodos. Uno de ellos consiste en construir una red periódica en dos dimensiones generada por dos vectores base  $e_1$  y  $e_2$  (ver figura 1.3). De esta red, se escogen aquellos puntos que se encuentran de una banda de ancho fijo y se proyectan hacia un subespacio de dimensión menor, llamado espacio paralelo denotado por  $E^{\parallel}$ . En este caso el subespacio es una recta con pendiente irracional. Nótese que  $E^{\parallel}$  define un espacio perpendicular, denotado por  $E^{\perp}$ , en el cual la banda tiene un ancho dado por el tamaño de la celda unitaria de la red bidimensional. Los puntos proyectados sobre la recta se encuentran a dos distancias distintas, alternadas de manera cuasiperiódicas (ver figura 1.3).

Una manera alternativa de generar esta cadena, y que pone de manifiesto de manera más clara las propiedades de invarianza, consiste en usar las llamadas reglas de deflación e inflación [9]. Para la regla de inflación se requiere de  $a_1, a_2, \dots, a_g, g$  elementos básicos que definen la generación 0 (cero). Entonces, la generación  $n + 1$  se obtiene por inducción a partir de la generación  $n$  usando la siguiente regla de sustitución:

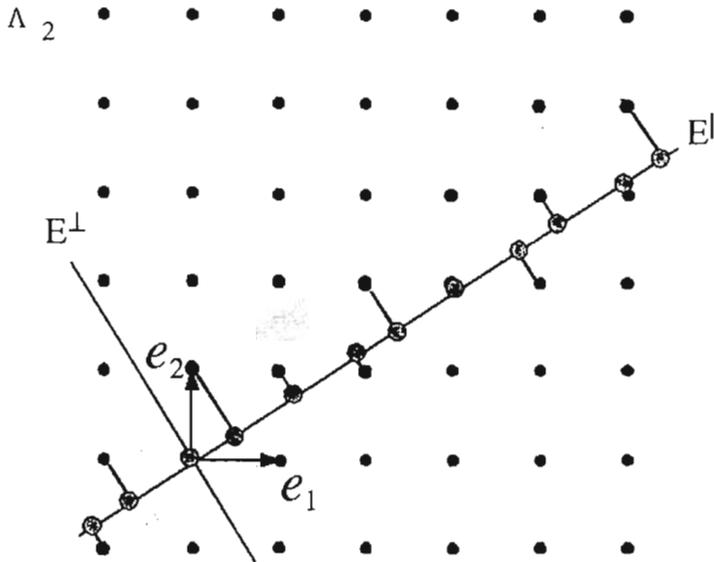


Figura 1.3: Construcción de la cadena de Fibonacci por proyección de puntos de una banda de ancho fijo sobre una recta con pendiente irracional. La banda es la zona sombreada. Los puntos que caen dentro de esta región son proyectados sobre el subespacio  $E^\parallel$ .

$$\mathbf{a} \rightarrow M\mathbf{a}, \tag{1.1}$$

donde  $\mathbf{a}$  es el vector columna

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_g \end{pmatrix},$$

y  $M = (b_{ij})$  es una matriz de tamaño  $g \times g$ , con  $b_{ij}$  enteros no negativos. Como ejemplo de su aplicación se usará  $g = 2$ ,  $a_1 = L$ ,  $a_2 = S$  y

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Aplicando recursivamente la ecuación 1.1, el elemento  $a_j$  de la secuencia resultante es igual a  $b_{j1}a_1$  concatenado con  $b_{j2}a_2, \dots$ , etc., parte de la evolución

de  $\mathbf{a}$  en la secuencia queda:

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} L \\ S \end{pmatrix} \rightarrow M\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L \\ S \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} LS \\ L \end{pmatrix}; \text{generación 1} = LSL,$$

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} LS \\ L \end{pmatrix} \rightarrow M\mathbf{a} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} LS \\ L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} LSLS \\ LS \end{pmatrix}; \text{generación 2} = LSLLS,$$

y la secuencia final para la generación 5 es

$$LSLLSLSLLSLLSLSLLSLSL.$$

Contando el número de  $L$  y  $S$  que aparecen en esta secuencia para cada generación, se observa que éstos son números de Fibonacci. Dichos números son de la sucesión definida por:

$$\begin{aligned} a_1 &= 1, \\ a_2 &= 1, \\ &\vdots \\ a_n &= a_{n-1} + a_{n-2} \quad \text{para } n \geq 3. \end{aligned}$$

Esta sucesión cuyos primeros términos son 1, 1, 2, 3, 5, 8, ..., fue descubierta por Fibonacci (1175-1250, aprox.) [10]. La razón  $a_n/a_{n-1}$  son los aproximantes racionales de la sección dorada  $\tau = (\sqrt{5} + 1)/2$ , la cual aparece en una infinidad de fenómenos naturales así como en el arte, donde es considerada como una proporción dorada. La razón de ello es que en biología aparece repetidamente, por ejemplo, en las proporciones corporales, en las estructuras de los caracoles y aún en la disposición de las hojas de plantas. Existen dos razones fundamentales para ello; una es que dicha proporción presenta características fractales, es decir, la proporción se mantiene al realizar cambios de escala. La otra es que de alguna manera, la sección dorada es el más irracional de todos los números, ya que su expansión en fracciones continuas es la que converge más lentamente [6].

### 1.1.2. Propiedades físicas de cuasicristales

De lo dicho anteriormente, es claro que los cuasicristales son materiales con un orden intermedio entre los amorfos y los cristales. Por esta razón, su descubrimiento provocó una oleada de trabajo para investigar cuales serían las propiedades físicas y químicas de dichos materiales, dado el potencial tecnológico que puede tener una nueva forma de agregación de la materia. Así, la medición y predicción de las conductividades eléctrica, térmica, propiedades ópticas, capacidades caloríficas, etc. han sido temas importantes de investigación en los últimos veinte años [12]. En la actualidad hay varios puntos de acuerdo, como por ejemplo que la estructura se estabiliza mediante mecanismos electrónicos o que la conductividad eléctrica es similar a la de un semiconductor (este hecho es sorprendente si pensamos que los cuasicristales son aleaciones metálicas) [12]. Sin embargo, la teoría está muy poco desarrollada, y existen fuertes desacuerdos

con el experimento. Según diversos estudios teóricos, la conductividad debería ser mayor de lo observado.

Los cuasicristales son un reto muy importante desde el punto de vista teórico; la mayor parte de los resultados que se conocen del estado sólido, utilizan el llamado teorema de Bloch, el cual dice que dado un potencial periódico, la función de onda de los electrones o fonones está dada por ondas planas multiplicadas por una función que tiene la periodicidad de la red. Este tipo de función de onda se conoce como estados extendidos, dado que la probabilidad de encontrar al electrón no decae con la distancia. En sistemas desordenados, las funciones de onda pueden ser extendidas, pero existen también otros estados conocidos como localizados, debido a que la probabilidad de encontrar al electrón decae exponencialmente.

Durante algún tiempo se pensó que podría demostrarse un teorema similar al de Bloch [12] en cuasicristales. Estos intentos fallaron, y peor aún, dadas las características fractales de los sistemas en cuestión, no puede aplicarse la teoría de perturbaciones [13]. Sólo para la cadena de Fibonacci se ha podido demostrar que las funciones de onda tienen una forma autosimilar o fractal, con una amplitud que decrece según una ley de potencias (este tipo de estados se conoce como crítico). El espectro de energías es un conjunto de Cantor [14, 15]. En dos y tres dimensiones se sabe muy poco acerca de las características de los estados o del tipo de espectro, aunque la topología hace que el problema sea muy diferente del caso unidimensional [16].

Para las vibraciones de la red sucede algo parecido. Se sabe que para la red de Fibonacci las excitaciones tienen una forma autosimilar [14]. Sin embargo, no se ha podido calcular la conductividad térmica de manera realista dado que ésta requiere incluir términos no-armónicos en el hamiltoniano de vibraciones. En esta tesis, nos planteamos justamente abordar este problema, es decir, estudiar los efectos no-lineales en el modelo más sencillo de cuasicristales. Una parte fundamental en el desarrollo de este trabajo, ha sido la hipótesis de que la estructura del espacio fase de cuasicristales podría tener un impacto importante en las propiedades no-lineales de los fonones.

## 1.2. Vibraciones no-lineales en redes

Como se mencionó en la sección anterior, el objetivo de la tesis es estudiar las vibraciones no-lineales en sistemas cuasiperiódicos, dada su importancia para las propiedades térmicas y ópticas en dicho materiales. Aquí debe recalcarse que aún las propiedades no-lineales de sistemas periódicos distan mucho de ser completamente entendidas, y aún hoy existe una intensiva investigación sobre el tema [11]. Por ejemplo, como se mencionó en la sección anterior, el desorden tiende a localizar los estados electrónicos o vibracionales, pero por otra parte, si se introducen efectos no-lineales en un sistema periódico, se generan estados localizados (como los llamados estados de respiración). De este modo, lo natural sería pensar que al introducir efectos no-lineales en una cadena desordenada deberían tenerse estados todavía más localizados. Sin embargo, diversos cálculos

así como muchas evidencias experimentales en varios sistemas muestran que esto no es así [17, 11].

El interés de estudiar los efectos no-lineales en redes, comenzó con el estudio de la conductividad y expansividad térmica de cristales, por ahí de los años 1930 [2]. Estos estudios avanzaron poco durante varios años debido a las dificultades inherentes de resolver ecuaciones diferenciales no-lineales. Con el advenimiento de las primeras computadoras, se retomó el estudio de los efectos no-lineales, en especial después de un célebre artículo de Fermi, Pasta y Ulam [18]. En este trabajo, se estudia cómo un sistema de osciladores puede llegar al equilibrio térmico. Según hizo notar Fermi, en un sistema con un hamiltoniano armónico, la energía no puede transferirse entre modos normales, ya que estos son ortogonales entre sí y no existe un mecanismo por el cual después de un tiempo largo, la energía por oscilador tome el valor  $k_B T/2$ , donde  $T$  es la temperatura y  $k_B$  la constante de Boltzmann. Así, un sistema armónico no cumple con el postulado de ergodicidad asumido en mecánica estadística. Fermi creía que este problema se resolvería al considerar interacciones no-lineales entre osciladores, de modo que hubiera equipartición de la energía para un modo dado. Entonces, Fermi, Ulam y Pasta en 1954 usaron una de las primeras computadoras de bulbos (MANIAC) era estudiar el problema de una cadena de 20 sitios con interacción no-lineal. Sorpresivamente, encontraron que en efecto la energía se empieza a repartir entre los modos, pero después de un tiempo dado, la energía se vuelve a concentrar en el modo inicial; a este fenómeno se le llamó recurrencia. Varios trabajos posteriores [19], han confirmado este fenómeno, siempre que la energía de la excitación inicial en la cadena no es muy grande.

Otro estudio posterior que resultó de gran interés, ya que apareció en la época de mayor auge de la teoría del caos y sistemas dinámicos, resultó del estudio de un sistema de tres partículas unidas por dos resortes, pero incluyendo un término cúbico en la fuerza de los resortes. Lunsford y Ford, demostraron que este problema [19], podía llevarse al hamiltoniano de Hénon y Heiles, el cual es un modelo de la interacción entre una estrella y una galaxia en coordenadas cilíndricas. Este hamiltoniano fue estudiado extensivamente durante los años 1970-1980, dado que mostraba claramente que para energías grandes el atractor del sistema es un fractal (un atractor es el conjunto de puntos en el espacio fase visitado por el sistema mecánico cuando el tiempo tiende a infinito [20]). Para estas energías, el sistema mecánico es no-integrable, aunque para energías bajas, el atractor está formado por un conjunto de curvas suaves, lo cual lo hace integrable pero por lo tanto no-ergódico. Esta clase de estudios dio lugar a una investigación intensiva sobre la relación entre ergodicidad y sistemas no-lineales, en especial sobre el tipo de los atractores.

La situación descrita para el sistema simple de tres partículas es en general la que prevalece para sistemas muy grandes, es decir, a bajas energías las trayectorias del sistema en el espacio fase son curvas cerradas, lo cual en general permite un tratamiento de la parte no-lineal usando alguna aproximación o teoría de perturbaciones. En capítulos posteriores de esta tesis se discutirán algunos de estos métodos, dado que sirvieron para comparar las técnicas desarrolladas con resultados existentes en la literatura. Para energías mayores, o

partes no-lineales grandes, los tratamientos perturbativos o las aproximaciones resultan en general inadecuados, ya que aparecen fenómenos de caos [19] que requieren el uso de técnicas más sofisticadas.

En la actualidad, la mayor parte de los trabajos se han concentrado en los efectos no-lineales de sistemas periódicos, existiendo muy poca literatura sobre sistemas desordenados. Las oscilaciones en sistemas cuasiperiódicos no-lineales no ha sido estudiada, aunque existen un estudio de los efectos no-lineales en una red de Penrose formada por circuitos eléctricos resonantes [21]. En esta tesis, se abordará de manera detallada cómo afecta el incluir no-linealidad a las propiedades vibracionales de un sistema de Fibonacci.

# Capítulo 2

## Teoría de vibraciones.

El movimiento oscilatorio tiene como característica principal la repetición en el tiempo y un desplazamiento acotado, que se describe por una ecuación diferencial lineal de segundo orden. Un sistema es estable cuando su energía potencial es mínima, al separarlo de esta posición se genera una fuerza  $-\frac{dU}{dq}$  que tiende a devolver el equilibrio al sistema. En el caso en que la fuerza restauradora lineal, el período de movimiento, o el tiempo requerido para que una configuración en particular (no sólo la posición, sino también la velocidad) se repita es independiente del desplazamiento máximo respecto de la posición de equilibrio. Este hecho no se cumple en sistemas no-lineales, tal y como se discute en este capítulo, donde presentamos diversos elementos sobre teoría de vibraciones que serán utilizados en capítulos posteriores.

### 2.1. Sistemas de una partícula.

Uno de los modelos más simples de un sistema realizando un movimiento armónico simple es una masa sobre una superficie sin fricción, unida a un muro a través de un resorte. Este modelo corresponde en realidad a una partícula cerca de un mínimo en un potencial cualquiera. En efecto, cerca de un mínimo, la energía potencial  $U(q)$  puede desarrollarse en una serie de potencias para pequeños desplazamientos de su posición de equilibrio. Así tenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} U(q - q_0) &= U(q_0) + \left. \frac{dU}{dq} \right|_{q=q_0} (q - q_0) + \left. \frac{d^2U}{dq^2} \right|_{q=q_0} (q - q_0)^2 + \dots \\ &\approx \left. \frac{d^2U}{dq^2} \right|_{q=q_0} (q - q_0)^2, \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde el primer término se hace cero si escogemos adecuadamente el nivel de referencia de la energía. Además se usó que en un mínimo de potencial, el término lineal también se hace cero, pues la primera derivada debe hacerse cero. En

adelante mediremos la energía a partir de la posición de equilibrio, ésto es:

$$u = q - q_0, \quad (2.2)$$

por lo que escribiremos a la energía como

$$U(u) \approx \frac{\kappa}{2} u^2, \quad (2.3)$$

donde  $\kappa$  es el valor de la segunda derivada en la posición de equilibrio. De aquí se sigue que la ecuación de movimiento resultante es [22]:

$$m\ddot{u} + \kappa u = 0, \quad (2.4)$$

cuya solución corresponde a un movimiento oscilatorio,

$$u = Ae^{-i\omega t}, \quad (2.5)$$

siendo  $\omega$  la frecuencia definida por

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}, \quad (2.6)$$

$A$  es la amplitud compleja del movimiento. En un punto de retorno de la trayectoria, el momento es cero, por lo cual toda la energía es potencial, de donde se sigue que la energía del oscilador está dada por [24]:

$$U(u) \approx -\frac{\kappa}{2} A^2. \quad (2.7)$$

Los sistemas no lineales de pocas partículas se estudiarán en la siguiente sección.

## 2.2. Sistemas de más de una partícula.

Un procedimiento análogo puede utilizarse si se tienen  $N_s$  partículas que interactúan entre sí, pero que realizan pequeñas oscilaciones alrededor de posiciones de equilibrio. En ese caso, si consideramos que las partículas sólo se pueden mover en una dimensión, el potencial estará dado por:

$$U(u) = \sum_{j=1}^{N_s} \frac{\kappa_j}{2} (u_{j+1} - u_j)^2. \quad (2.8)$$

Nótese que en el caso general, no todas las constantes de los resortes, así como las masas, son iguales. Las ecuaciones de movimiento que correspondiente a este potencial se escriben como

$$m_j \ddot{u}_j - \kappa_j (u_{j+1} - u_j) + \kappa_{j-1} (u_j - u_{j-1}) = 0, \quad i = 1, \dots, N_s. \quad (2.9)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones diferenciales acopladas se propone una solución separable, es decir se propone una solución que es el producto de una parte temporal y otra espacial, a saber,

$$u(j, t) = A_j e^{-i\omega t}, \quad (2.10)$$

donde  $A_j$  es la amplitud compleja del movimiento de la partícula  $j$ .

Sustituyendo esta solución, el problema se reduce ahora a un sistema lineal de ecuaciones simultáneas,

$$-\omega^2 A_j - \frac{\kappa_j}{m_j} A_{j+1} + \left( \frac{\kappa_j + \kappa_{j-1}}{m_j} \right) A_j - \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} A_{j-1} = 0, \quad (2.11)$$

con  $j = 1, \dots, N_s$ , este sistema puede expresarse de manera matricial [25],

$$\mathbb{A}^{-1} \mathbb{D} \mathbb{A} = \mathbb{D}' = -\omega^2 \mathbb{I}. \quad (2.12)$$

En el caso de condiciones de frontera cíclicas, es decir, en el que la partícula designada con el número 1 está unida a la partícula  $N_s$ ,

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \frac{\kappa_1 + \kappa_{N_s}}{m_1} - \omega^2 & -\frac{\kappa_1}{m_1} & 0 & \dots & -\frac{\kappa_{N_s}}{m_1} \\ -\frac{\kappa_1}{m_2} & \frac{\kappa_2 + \kappa_1}{m_2} - \omega^2 & & & 0 \\ 0 & & \ddots & & \\ \dots & & & \ddots & \\ \frac{-\kappa_{N_s}}{m_{N_s}} & 0 & \dots & -\frac{\kappa_{N_s-1}}{m_{N_s}} & \frac{\kappa_{N_s} + \kappa_{N_s-1}}{m_{N_s}} - \omega^2 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

esto es, cada una de las entradas de  $\mathbb{D}$  está definida por:

$$D_{ij} = -\frac{\kappa_{i-1}}{m_i} \delta_{ij+1} + \left( \frac{\kappa_{i-1} + \kappa_i}{m_i} \right) \delta_{ij} - \frac{\kappa_i}{m_i} \delta_{ij-1}, \quad (2.14)$$

donde  $\mathbb{D}$  se le llama matriz dinámica y  $\mathbb{A}$  es la matriz cuyas columnas son los vectores propios, cuyas entradas son los coeficientes de los desplazamientos máximos de las partículas.

Si las masas son iguales entre sí, así como las constantes de los resortes, la solución puede encontrarse de manera inmediata proponiendo una solución del tipo:

$$A_{k_s}(j) = \frac{e^{ik_s j a}}{\sqrt{N_s}}, \quad (2.15)$$

donde  $N_s$  es el número de partículas del sistema,  $a$  es la distancia de equilibrio que hay entre las partículas. En lo sucesivo, usaremos unidades de  $a$ , es decir  $a = 1$ .

La solución para cada frecuencia permitida es una onda armónica, llamada modo normal la cual queda como,

$$u_{k_s}(j, t) = \frac{e^{i(k_s j - \omega t)}}{\sqrt{N_s}}, \quad (2.16)$$

donde existe la siguiente relación, llamada de dispersión, entre la frecuencia de la onda y su vector de onda:

$$\omega(k_s) = \sqrt{\frac{\kappa}{m}(1 - \cos k_s)}, \quad (2.17)$$

con  $k_s = \frac{2\pi(s-1)}{N_s}$  y  $s = 1, \dots, N_s$ .

Nótese que dada la linealidad de las ecuaciones, la solución más general es la suma de los  $N$  modos normales encontrados:

$$u(j, t) = \sum_{s=1}^N C_{k_s} \frac{e^{i(k_s j - \omega t)}}{\sqrt{N_s}}, \quad (2.18)$$

donde  $C_{k_s}$  es una constante compleja arbitraria.

Los coeficientes de la expansión pueden obtenerse proyectando las condiciones iniciales sobre los modos normales correspondientes, obteniéndose que:

$$u(j, t=0) = \sum_{s=1}^N C_{k_s} \frac{e^{i(k_s j)}}{\sqrt{N_s}}. \quad (2.19)$$

Una condición inicial que usaremos con frecuencia en esta tesis es el impulso unitario, también conocido como delta de Dirac. En este caso, como el sistema es finito, en vez de una delta de Dirac se utiliza una delta de Kroneker, las condiciones iniciales están dadas por:

$$u(j, t=0) = \delta_j \frac{N_s}{2}, \quad (2.20)$$

de donde

$$C_{k_s} = \frac{1}{\sqrt{N_s}}. \quad (2.21)$$

Lo importante de esta condición, es que todos los coeficientes  $C_{k_s}$  valen uno, por lo cual se está excitando todos los modos normales con la misma participación. Posteriormente veremos que ésto permite la evaluación de los modos normales.

### 2.2.1. Sistemas no-lineales.

Ahora consideremos el efecto de incluir en el Hamiltoniano los términos de tercer y cuarto orden. En este caso, la energía potencial viene dada por [24],

$$U(u) = \sum_{j=1}^{N_s} \frac{\kappa_j}{2} (u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{\alpha_j}{3} (u_{j+1} - u_j)^3 + \frac{\beta_j}{4} (u_{j+1} - u_j)^4, \quad (2.22)$$

donde  $\alpha_j$  y  $\beta_j$  son los nuevos coeficientes constantes, los cuales se pueden redefinir como:

$$\alpha_j = \gamma_3 \kappa_j \quad (2.23)$$

y

$$\beta_j = \gamma_4 \kappa_j, \quad (2.24)$$

donde  $\gamma_3$  y  $\gamma_4$  serán más adelante, los parámetros no lineales. De esta expresión de la energía se obtiene un sistema de ecuaciones de movimiento en los que aparecen términos no lineales, aquellos que contienen los nuevos coeficientes,

$$\begin{aligned} \ddot{u}_j = & \frac{(\kappa_j)}{m_j} \left[ (u_{j+1} - u_j) + \gamma_3 (u_{j+1} - u_j)^2 + \gamma_4 (u_{j+1} - u_j)^3 \right] \\ & - \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} \left[ (u_j - u_{j-1}) + \gamma_3 (u_j - u_{j-1})^2 + \gamma_4 (u_j - u_{j-1})^3 \right]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

En el caso general, estas ecuaciones no pueden resolverse exactamente, y en la actualidad existen grandes esfuerzos para entender el comportamiento de las soluciones en diversas situaciones [11], como por ejemplo cuando las constantes corresponden a sistemas periódicos, cuasiperiódicos o desordenados. Debe decirse que el estudio de este tipo de sistemas recién ha podido avanzar de manera considerable con la aparición, en las últimas décadas, de la teoría de sistemas dinámicos, de los fractales y la teoría del caos, así como del uso de computadoras poderosas. Sin embargo, tal y como se discutió en la introducción, el conocimiento que se tiene es todavía parcial y es sujeto de intensos debates en la literatura.

Cuando la parte no-lineal es pequeña, para resolver las ecuaciones se propone, en primera instancia, una solución semejante a la del sistema armónico [22]:

$$u(j, t) = A_j \cos(\omega t), \quad (2.26)$$

que al sustituirse en las ecuaciones de movimiento se tiene,

$$\begin{aligned} -\omega^2 A_j \cos(\omega t) = & \frac{1}{m_j} [\kappa_j A_{j+1} - (\kappa_j + \kappa_{j-1}) A_j + \kappa_{j-1} A_{j-1}] \cos(\omega t) \\ & + \gamma_3 \frac{\kappa_j}{m_j} [A_{j+1}^2 - 2A_{j+1} A_j + A_j^2] \cos^2(\omega t) \\ & - \gamma_3 \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} [A_j^2 - 2A_j A_{j-1} + A_{j-1}^2] \cos^2(\omega t) \quad (2.27) \\ & + \gamma_4 \frac{\kappa_j}{m_j} [A_{j+1}^3 - 3A_{j+1}^2 A_j + 3A_{j+1} A_j^2 - A_j^3] \cos^3(\omega t) \\ & - \gamma_4 \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} [A_j^3 - 3A_j^2 A_{j-1} + 3A_j A_{j-1}^2 - A_{j-1}^3] \cos^3(\omega t). \end{aligned}$$

Se puede ver que no todos los términos dependientes del tiempo se pueden cancelar, y que, con la identidad trigonométrica:

$$\cos^3(\theta) = \frac{3}{4} \cos(\theta) + \frac{1}{4} \cos(3\theta) \quad (2.28)$$

$$\cos^2(\theta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(2\theta) \quad (2.29)$$

esto implica que aparecen nuevas frecuencias, las cuales son múltiplos enteros de las frecuencias de los modos normales originales. Por esta razón, los términos que contienen al tiempo no pueden cancelarse. Para resolver este sistema, existen varias opciones, que consisten básicamente en usar aproximaciones.

La primera opción, consiste en proponer que la solución que sea igual a la del caso armónico, y con el uso de las igualdades de las potencias de los cosenos, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 -\omega^2 A_j \cos(\omega t) &= \gamma_3 \frac{\kappa_j}{2m_j} (A_{j+1}^2 - 2A_{j+1}A_j + A_j^2) \\
 &\quad - \gamma_3 \frac{\kappa_{j-1}}{2m_j} (A_j^2 - 2A_jA_{j-1} + A_{j-1}^2) \\
 &\quad + \frac{1}{m_j} [\kappa_j A_{j+1} - (\kappa_j + \kappa_{j-1}) A_j + \kappa_{j-1} A_{j-1}] \cos(\omega t) \\
 &\quad + \gamma_4 \frac{3\kappa_j}{4m_j} (A_{j+1}^3 - 3A_{j+1}^2 A_j + 3A_{j+1} A_j^2 - A_j^3) \cos(\omega t) \\
 &\quad - \gamma_4 \frac{3\kappa_{j-1}}{4m_j} (A_j^3 - 3A_j^2 A_{j-1} + 3A_j A_{j-1}^2 - A_{j-1}^3) \cos(\omega t) \\
 &\quad + \gamma_3 \frac{\kappa_j}{m_j} (A_{j+1}^2 - 2A_{j+1}A_j + A_j^2) \cos(2\omega t) \tag{2.30} \\
 &\quad - \gamma_3 \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} (A_j^2 + 2A_jA_{j-1} - A_{j-1}^2) \cos(2\omega t) \\
 &\quad + \gamma_4 \frac{\kappa_j}{4m_j} (A_{j+1}^3 - 3A_{j+1}^2 A_j + 3A_{j+1} A_j^2 - A_j^3) \cos(3\omega t) \\
 &\quad - \gamma_4 \frac{\kappa_{j-1}}{4m_j} (A_j^3 - 3A_j^2 A_{j-1} + 3A_j A_{j-1}^2 - A_{j-1}^3) \cos(3\omega t).
 \end{aligned}$$

En la ecuación anterior [Ec. (2.30)], se puede realizar la llamada aproximación de rotación de onda (RWA por sus siglas en inglés). En esta aproximación se desprecian los términos cuya contribución al movimiento sea mínima, es decir los términos con  $\cos(3\omega t)$ , los cuales se suponen pequeños y suponemos que la amplitud de vibración es pequeña. Aun así, no se puede resolver directamente el sistema de ecuaciones resultante, ya que los coeficientes  $A_j$  aparecen en formas no-lineales. Para pequeñas oscilaciones, este sistema puede resolverse una técnica perturbativa similar a la usada para calcular corrección a niveles de energía en mecánica cuántica [26].

Otra aproximación ligeramente diferente a la anterior, consiste en proponer desde el principio, una solución que lleve un término  $\cos(3\omega t)$ :

$$u(j, t) = A_j \cos(\omega t) + B_j \cos(3\omega t). \tag{2.31}$$

Sustituyendo en la ecuaciones de movimiento la solución propuesta anteriormente, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 -\omega^2 [A_j \cos(\omega t) + 9B_j \cos(3\omega t)] &= + \frac{\kappa_j}{m_j} [A_{j+1} \cos(\omega t) + B_{j+1} \cos(3\omega t) \\
 &\quad - A_j \cos(\omega t) - B_j \cos(3\omega t)]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\gamma_3 \kappa_j}{m_j} [A_{j+1} \cos(\omega t) + B_{j+1} \cos(3\omega t) \\
 & \quad - A_j \cos(\omega t) - B_j \cos(3\omega t)]^2 \\
 & + \frac{\gamma_4 \kappa_j}{m_j} [A_{j+1} \cos(\omega t) + B_{j+1} \cos(3\omega t) \\
 & \quad - A_j \cos(\omega t) - B_j \cos(3\omega t)]^3 \\
 & - \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} [A_j \cos(\omega t) + B_j \cos(3\omega t)] \dots
 \end{aligned}$$

Agrupando términos con argumentos similares en el coseno, para la frecuencia fundamental se tiene la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned}
 & \left( \frac{\kappa_j + \kappa_{j-1}}{m_j} - \omega^2 \right) A_j - \frac{\kappa_j}{m_j} A_{j+1} - \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} A_{j-1} \\
 & - \frac{3\gamma_4 \kappa_j}{4m_j} (A_{j+1}^3 + A_j^3) + \frac{3\gamma_4 \kappa_{j-1}}{4m_j} (A_j^3 + A_{j-1}^3) = 0, \quad (2.32)
 \end{aligned}$$

Resolviendo la ecuación anterior se predice un corrimiento de la frecuencia del primer armónico  $\omega$  en términos de los coeficientes  $A_j$ , los cuales obedecen a la siguiente relación, que se obtiene de despreciar términos de orden cúbico y superiores, de los términos que no quedan multiplicados a ningún coseno,

$$-\frac{1}{2} \frac{\gamma_3 \kappa_j}{m_j} (A_{j+1}^2 + A_j^2) + \frac{1}{2} \frac{\gamma_3 \kappa_{j-1}}{m_j} (A_j^2 + A_{j-1}^2) = 0. \quad (2.33)$$

Este corrimiento de la frecuencia fundamental, tal como se verá en el capítulo 4, se debe a que el potencial tiene una curvatura mayor.

Todavía existe otra manera de entender este efecto desde el punto de vista de los modos normales. Si tomamos la solución general:

$$u(j, t) = \sum_{s=1}^N A_{k_s j} Q_{k_s}, \quad (2.34)$$

donde  $Q_{k_s} = C_{k_s} e^{i\omega_{k_s} t}$  denota a la coordenada normal del modo  $s$ -ésimo del sistema armónico sin parte no-lineal, con  $k_s = \frac{2\pi(s-1)}{N_s}$  y  $s = 1, \dots, N_s$ , y  $A_{k_s j}$  es la proyección sobre cada modo normal de las condiciones iniciales, tal y como se discute a continuación.

Con las coordenadas normales se cumple que las ecuaciones de movimiento se pueden escribir de la forma [27]:

$$\ddot{Q}_{k_s} + \omega^2 Q_{k_s} = f_{k_s}(Q_{k_1}, \dots, Q_{k_N}),$$

donde las funciones  $f_{k_s}$  son homogéneas, de segundo grado, de las coordenadas normales y sus derivadas con respecto del tiempo. Aplicando el método de aproximaciones sucesivas, y buscando una solución del tipo  $Q_{k_s} = Q_{k_s}^{(1)} + Q_{k_s}^{(2)}$ , con

$Q_{k_s}^{(1)}$  soluciones del sistema armónico, se obtiene que para la segunda aproximación luego de haber despreciado términos de orden superior al segundo orden [24], las relaciones para los  $Q_{k_s}^{(2)}$ :

$$\ddot{Q}_{k_s}^{(2)} + \omega^2 Q_{k_s}^{(2)} = f_{k_s} \left( Q_{k_1}^{(1)}, \dots, Q_{k_N}^{(1)} \right),$$

obteniendo así un sistema de ecuaciones lineales no homogéneas cuyos segundos miembros pueden expresarse como sumas de funciones periódicas simples. Por ejemplo:

$$\begin{aligned} Q_{k_s}^{(1)} Q_{k'_s}^{(1)} &= a_\alpha a_\beta \cos(\omega_{k_s} t + \phi_{k_s}) \cos(\omega_{k'_s} t + \phi_{k'_s}) \\ &= \frac{1}{2} a_\alpha a_\beta \left\{ \cos[(\omega_{k_s} + \omega_{k'_s}) t + \phi_{k_s} + \phi_{k'_s}] \right. \\ &\quad \left. + \cos[(\omega_{k_s} - \omega_{k'_s}) t + \phi_{k_s} - \phi_{k'_s}] \right\}. \end{aligned}$$

Esto es, contienen términos correspondientes a oscilaciones con frecuencias que son sumas y restas de las frecuencias fundamentales del sistema armónico, así, a las oscilaciones normales del sistema les son superpuestas oscilaciones suplementarias con frecuencias que son combinaciones de las originales (llamadas frecuencias combinatorias). En aproximaciones superiores, las frecuencias fundamentales  $\omega_{k_s}$  no son iguales a los valores del sistema original armónico. Si se desarrolla el método con términos en la solución del tipo  $\cos(\omega_{k_s} + \Delta\omega)t = \cos(\omega_{k_s} t) - t\Delta\omega \sin(\omega_{k_s} t)$ , deja de ser un resultado confiable para valores de  $t$  grandes.

## Capítulo 3

# Método para la obtención del espectro.

Luego de haber revisado algunos elementos de la teoría de vibraciones, se presentarán las bases para la elaboración de un programa computacional que simula un sistema de partículas oscilantes, tras lo cual se propondrá un método para la obtención del espectro de frecuencias de dicho sistema.

En el caso que nos atañe, tenemos un sistema de partículas oscilantes cuyas ecuaciones de movimiento son del tipo de la ecuación 2.9 de sistemas de más de una partícula:

$$m_j \ddot{u}_j - \kappa_j (u_{j+1} - u_j) + \kappa_{j-1} (u_j - u_{j-1}) = 0, \quad (3.1)$$

donde,  $\kappa_j$  es la constante del  $j$ -ésimo resorte,  $m_j$  la masa de la partícula  $j$ ,  $u_j$  es el desplazamiento de la partícula  $j$  respecto de la posición de equilibrio. Así, para la simulación se utiliza el método "salto de rana". Éste consiste en evaluar para un tiempo  $t$  dado, y a partir de la posición inicial, la aceleración para ese tiempo por medio de la ecuación de movimiento[28]:

$$a_j(t) = \ddot{u}_j(t) = \frac{\dot{p}_j(t)}{m} = -\frac{1}{m} \left( \frac{dH(t)}{du_j} \right), \quad (3.2)$$

donde  $\dot{p}_j$  es la derivada con respecto del tiempo del momento de la partícula  $j$ , y  $H(t)$  es el hamiltoniano del sistema periódico:

$$H(t) = \sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + \sum_j \frac{\kappa_j}{2} (u_{j+1} - u_j)^2. \quad (3.3)$$

Con el resultado de la aceleración se puede calcular la velocidad y la posición para un tiempo  $t$  más un intervalo de tiempo  $\Delta t$ :

$$v_j \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right) = v_j \left( t - \frac{\Delta t}{2} \right) + a_j(t) \Delta t, \quad (3.4)$$

Dato	Tiempo t	Desplazamiento $u$	Velocidad $v$ (1/s)	Aceleración $a$ (1/s <sup>2</sup> )
0	0	1	0	-1
			-0.2	
1	0.2	0.96		-0.96
			-0.392	
2	0.4	0.882		-0.882
			-0.568	
3	0.6	0.768		-0.768
			-0.722	
4	0.8	0.624		-0.624
			-0.847	
5	1	0.454		-0.454
			-0.937	
6	1.2	0.267		-0.267
			-0.991	
7	1.4	0.069		-0.069
			-1.005	
8	1.6	-0.132		0.132
			-0.978	
9	1.8	-0.328		0.328

Cuadro 3.1: Desplazamiento, velocidad y aceleración para una partícula oscilante, con  $\frac{\kappa}{m} = \frac{1}{2}s^{-2}$ ,  $\Delta t = 0,2s$ , y con condición inicial  $u(t = 0) = 1$ .

y:

$$u_j(t + \Delta t) = u_j(t) + v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t. \tag{3.5}$$

Notamos que para el cálculo de la velocidad se ha usado un intervalo de tiempo distinto, lo cual incrementa la precisión del cálculo, ya que la velocidad cambia en cada instante, por lo que es mejor usar la velocidad en el instante a mitad del intervalo. Por ejemplo, si consideramos un sistema periódico lineal, se tiene la siguiente función para la aceleración

$$a_j(t) = -\frac{\kappa}{m}(2u_j - u_{j+1} - u_{j-1}), \tag{3.6}$$

haciendo  $\Delta t = 0,2seg$  y  $\frac{\kappa}{m} = \frac{1}{2}s^{-2}$ , y si tomamos un sistema de una sola partícula (es decir  $u_{j+1} = u_{j-1} = 0$ , para todo tiempo  $t$ ) podemos construir la tabla de posición, velocidad y aceleración (ver Cuadro 3.1).

Para sistemas de muchas partículas, se calcula la aceleración, velocidad y posición de todas las partículas a un mismo valor del tiempo  $t$ , y luego se repite el cálculo para el siguiente intervalo de tiempo.

En el ejemplo de la tabla se muestra el resultado de las primeras 9 iteraciones a partir de la condición inicial. Luego se necesitará un cálculo semejante para un sistema de más de una partícula y en un intervalo de tiempo mayor a 1,8s.

En la columna "Desplazamiento" queda registrada la trayectoria de la partícula respecto de su posición de equilibrio, ésta es una función del tiempo. Si calculamos la transformada de Fourier del desplazamiento, nos queda el desplazamiento en función de la frecuencia:

$$\tilde{u}_j(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} u_j(t) e^{-i\omega t} dt, \quad (3.7)$$

o para el caso discreto, la transformada de Fourier discreta se escribe de la siguiente forma [29]:

$$\tilde{u}_j(\alpha) = \sum_{r=0}^{N_t-1} u_j(t_r) e^{-i\frac{2\pi\alpha r}{N_t}}, \quad (3.8)$$

o bien,

$$\tilde{u}_j(\omega_\alpha) = \sum_{r=0}^{N_t-1} u_j(t_r) e^{-i\omega t_r}, \quad (3.9)$$

donde  $\omega$  es la frecuencia,  $N_t$  es el número total de iteraciones para la  $j$ -ésima partícula, y  $t_r$  es el tiempo al paso  $r$ .

El proceso de realizar la transformada de Fourier puede realizarse mediante el conocido algoritmo de la transformada rápida, para la cual existen diversos códigos de muy fácil acceso [30]. En general, el único requisito es que el número de iteraciones en el tiempo debe ser una potencia de dos.

El resultado que entregan los programas de computadora, después de realizar una transformada rápida de Fourier, es un vector del mismo tamaño que el vector de trayectoria de la partícula. Cada uno de los términos es un número complejo. En el presente trabajo, sólo tomaremos para el análisis el módulo de cada término del vector de salida:

$$\|\tilde{u}(\omega)\| = \left\| \sum_{r=0}^{N_t-1} u_j(t_r) e^{-i\omega t_r} \right\|. \quad (3.10)$$

Para conocer a qué frecuencia corresponde cada término del vector de salida se realiza el siguiente cálculo: primero la frecuencia de muestreo  $f_s$  es igual al inverso del mínimo intervalo de tiempo entre iteraciones.

$$f_s = \frac{1}{\Delta t}, \quad (3.11)$$

y la frecuencia angular de muestreo es:

$$\omega'_{m.x} = 2\pi f_s = \frac{2\pi}{\Delta t}, \quad (3.12)$$

siendo ésta la frecuencia del valor máximo que alcanza el argumento de la posición en función de la frecuencia,  $\tilde{u}_j(\omega)$ . Los intervalos entre las frecuencias que corresponden a cada una de las entradas se calcula con la siguiente relación:

$$\Delta\omega = \frac{\omega'_{mx}}{N_t} = \frac{2\pi}{N_t\Delta t}, \quad (3.13)$$

donde  $N_t$  sigue siendo el número de iteraciones de la simulación. Teniendo así la relación para cada una de las frecuencias que corresponden a las entradas del vector de salida de la transformada rápida de Fourier:

$$\omega_n = n\Delta\omega = n\frac{2\pi}{N_t\Delta t}, \quad n = 0, 1, \dots, N_t - 1. \quad (3.14)$$

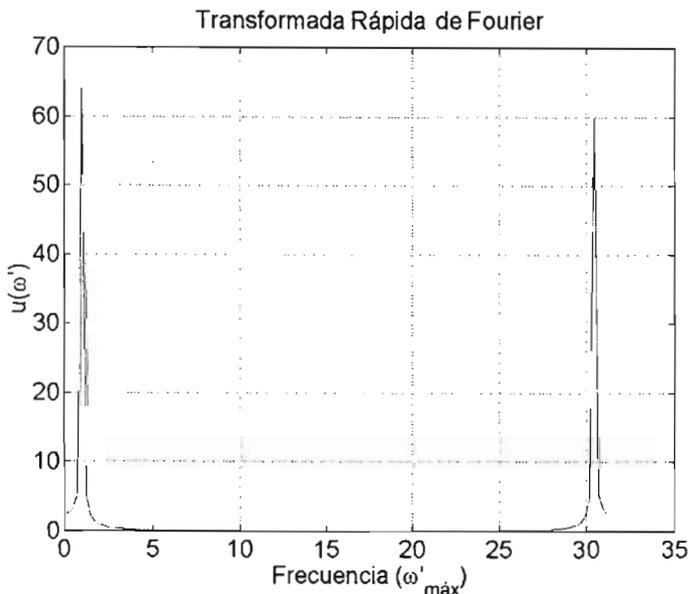


Figura 3.1: Muestra de la salida de la transformada de Fourier Rápida. En el eje  $x$  aparecen los valores de  $\omega'_{mx}$ , para un oscilador armónico simple, donde  $\Delta t = 0,2s$ ,  $N_t = 128$ ,  $\frac{\kappa}{m} = 0,5s^{-2}$ ,  $u(t = 0) = 1$ .

La figura 3.1 muestra el resultado obtenido en el caso de un oscilador armónico simple.

Nótese ahora que en el caso discreto (ecuación 3.9), sólo un número finito de coeficientes de la transformada de Fourier son usados, ésto es que, debido al muestreo de los datos se tiene una restricción en cuanto a las frecuencias que pueden ser representadas, éstas están limitadas a la mitad de la razón de muestreo, por lo que la frecuencia máxima para tiempos discretos es:

$$\omega_{mx} = \frac{\pi}{\Delta t}. \quad (3.15)$$

Esto significa que sólo se toman los primeros  $\frac{N_t}{2}$  términos del resultado. Los términos restantes de la transformada de Fourier rápida corresponden a los valores de las frecuencias negativas desfasadas  $2\pi$ , que son necesarias para crear las sinusoidales a partir de exponenciales complejas [31] (i. e. complejos conjugados [32]) El valor del intervalo de frecuencia no se ve alterado por este detalle:

$$\Delta\omega = \frac{\omega_{mx} - \omega_{mn}}{N_t} = \frac{1}{N_t} \left( \frac{\pi - (-\pi)}{\Delta t} \right) = \frac{2\pi}{N_t \Delta t}, \quad (3.16)$$

teniendo en cuenta que la frecuencia mínima que se alcanza es  $\omega_{mn} = -\omega_{mx}$ ; no así los valores de frecuencia que corresponde a cada término del vector de salida, que ahora se habrán de calcular con la siguiente fórmula:

$$\omega_n = \frac{2\pi}{N_t \Delta t} n \quad n = -\frac{N_t}{2}, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{N_t}{2}$$

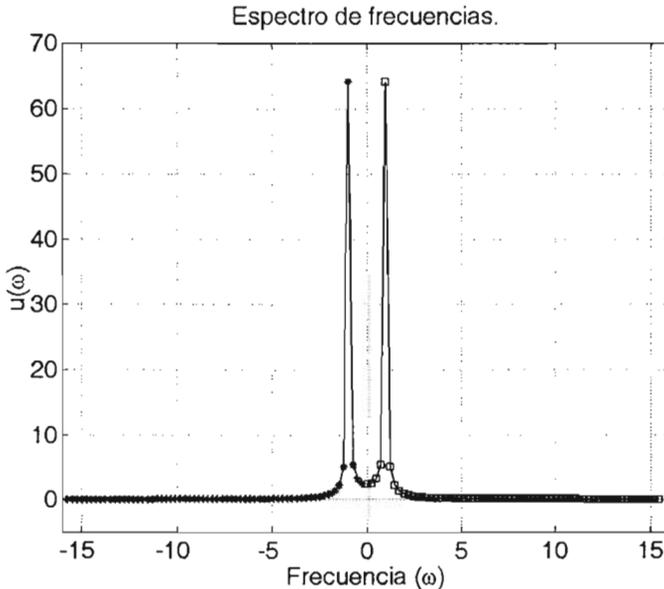


Figura 3.2: Espectro de frecuencias para un oscilador armónico simple,  $\Delta t = 0,2s$ ,  $N_t = 128$ ,  $\frac{\kappa}{m} = 0,5s^{-2}$ ,  $u(t=0) = 1$ .

La gráfica de la figura 3.2 que muestra a  $u_j(\omega)$  contra  $\omega$  es el espectro de frecuencias para una sola partícula en movimiento armónico oscilatorio, en el

que la segunda mitad del vector resultante de la transformada rápida de Fourier se ha graficado en la mitad izquierda del espectro. De cualquier forma el análisis que se llevará a cabo de las oscilaciones no requiere de las frecuencias negativas, de hecho nos interesaremos por el intervalo menor de frecuencias del que puede entregar la transformada rápida de Fourier.

Se pueden tener distintos valores de  $\Delta t$  y  $N_t$ , con lo que se obtienen diferentes resultados en la resolución de las gráficas y del espectro. Para optimizar dichos parámetros, se realizaron simulaciones para distintos valores, usando como banco de pruebas una red periódica de 34 sitios con un Hamiltoniano sin términos no-lineales. Los resultados que se obtuvieron fueron los siguientes:

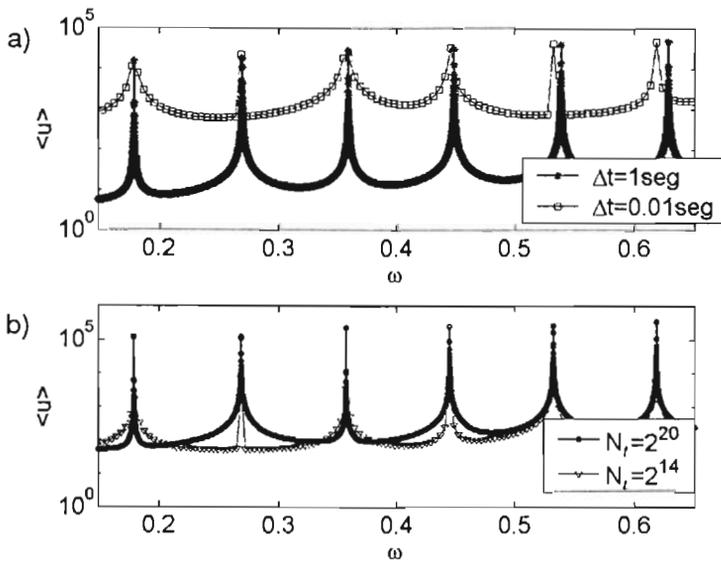


Figura 3.3: Resultados de una simulación de un sistema de 34 partículas: a) con  $N_t = 2^{17}$ ,  $\Delta t = 1 \text{ seg}$  y  $\Delta t = 0,01 \text{ seg}$ ; b) con  $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ ,  $N_t = 2^{20}$  y  $N_t = 2^{14}$ . En ambos casos  $\frac{\kappa}{m} = 0,5 \text{ s}^{-2}$  y  $u_1(t=0) = 1$ , donde  $\langle u \rangle$  está definido por la ecuación 3.17.

En la figura 3.3 (a) se muestra un fragmento del espectro de frecuencias de dos simulaciones que tienen el mismo número de iteraciones, una con un valor de  $\Delta t$  que difieren en dos órdenes de magnitud. Cuando el intervalo de tiempo es menor a uno, la simulación tiene mejor precisión en las soluciones de la ecuación diferencial, pero el poder de resolución de los picos es menor, ya que  $\Delta\omega$  es inversamente proporcional a  $\Delta t$  (ecuación 3.16). La figura 3.3 (b) muestra dos simulaciones ambas con  $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ , pero con distinto número de iteraciones, siendo evidente que a mayor número de iteraciones se obtiene una

mejor resolución del espectro.

El valor  $\Delta t$  que se escogerá para realizar el estudio es 0,1s. Este valor no es muy chico como para perder muchos puntos de la resolución y no es muy grande como para acarrear errores en cada iteración. Otro factor lo representa el número de iteraciones; mientras mayor es este número, se tiene una mejor resolución en el espectro de frecuencias, pero no debe ser muy grande pues el algoritmo de la transformada de Fourier tiene un puntero limitado, es decir, tiene un límite para el tamaño del vector de entrada. Debemos agregar, que usando estos parámetros, se verificó que la conservación de la energía se cumple con un margen del error del 1%.

El realizar la simulación para dos o más partículas, implica que el programa guarde en memoria las trayectorias de cada una de las partículas, pues definimos la transformada de Fourier para todo el sistema como el promedio aritmético de las transformadas de cada una de ellas:

$$\langle\langle \tilde{u}(\omega) \rangle\rangle = \frac{1}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \|\tilde{u}_j(\omega)\| = \frac{1}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \left\| \sum_{r=0}^{N_t-1} u_j(t_r) e^{-i\omega t_r} \right\|, \quad (3.17)$$

donde  $N_s$  es el número total de partículas. Ahora que, como se está utilizando el módulo o norma de las transformadas, las sumas no son conmutables, esto representa un problema de cómputo, pues se deberá tener todas las trayectorias antes de calcular la transformada de Fourier del sistema, lo que implica grandes cantidades de memoria de la llamada RAM; en nuestro caso el programa ocupa 8 Giga-bytes de este tipo de memoria. Aunque se ensayaron diversos métodos para conmutar la suma, ninguno tuvo éxito ya que inevitablemente se introducen armónicos espurios en el espectro.

Así, para resolver el problema se hizo que el programa guarde en memoria la trayectoria de un número fijo de partículas. Después se repite la simulación varias veces, guardando cada vez la trayectoria de otro conjunto de partículas. Para la trayectorias de cada partícula se calcula la transformada rápida de Fourier. Al finalizar el cálculo, se suman todas las transformadas y se toma el promedio. Este método es el empleado para el presente trabajo. Dependiendo de la plataforma de programación y de la velocidad de los procesadores, así como de la capacidad de almacenamiento en memoria; el tiempo que hay que esperar para que la computadora entregue el resultado de una simulación varía. Los cálculos que aparecen en esta tesis se realizaron para las cadenas pequeñas en una PC Pentium III, siendo el lenguaje de programación MATLAB. Para el caso de redes grandes (2584 sitios), y tiempos muy largos se utilizó lenguaje Fortran, y la supercomputadora HP Alpha Server SC 45 de la Dirección General de Servicios de Cómputo Académico de la UNAM.

Hasta este momento no hemos mencionado nada acerca de las alturas de los picos del espectro, así que seguiremos el siguiente desarrollo matemático para calcular las alturas de los picos para compararlos con los resultados numéricos. Consideramos la altura de los picos para el caso de una cadena periódica sin términos no-lineales. Partiendo de la transformada de Fourier (ecuación. 3.9)

tenemos que:

$$\tilde{u}_j(\omega) \equiv \sum_{r=0}^{N_t-1} u_j(t_r) e^{-i\omega t_r},$$

donde valores de la frecuencia que se obtienen son (ec. 3.14) :

$$\omega = 0, \frac{\omega_{mx}}{N_t}, \frac{2\omega_{mx}}{N_t}, \dots, \frac{(N_t - 1)\omega_{mx}}{N_t}.$$

Ahora, como estamos suponiendo un sistema de partículas periódico y lineal, tenemos que para la  $j$ -ésima partícula la representación en modos normales es la siguiente

$$u_j(t) = \sum_{s=1}^{N_s} A_{k_s j} Q_{k_s} = \sum_{s=1}^{N_s} C_{k_s} \frac{1}{\sqrt{N_s}} e^{i(k_s j - \omega_{k_s} t)}, \quad (3.18)$$

de donde recordamos del capítulo 2,  $Q_{k_s}$  es la representación del modo normal  $s$ -ésimo, y  $A_{k_s j}$  es la matriz de los vectores propios del sistema. La última igualdad se sigue de la forma explícita de los modos normales de la cadena, donde  $k_s$  es el vector de onda del modo  $s$ -ésimo, y está dado por  $k_s = \frac{2\pi(s-1)}{N_s}$ .  $C_{k_s}$  es la proyección de los modos normales sobre la base de vectores propios. Aplicando la transformada de Fourier a ambos lados de la ecuación anterior,

$$\tilde{u}_j(\omega) = \sum_{r=0}^{N_t-1} u_j(t_r) e^{-i\omega t_r} = \sum_{r=0}^{N_t-1} \sum_{s=1}^{N_s} C_{k_s} \frac{e^{i(k_s j - \omega_{k_s} t_r)}}{\sqrt{N_s}} e^{-i\omega t_r}, \quad (3.19)$$

en la que vemos que podemos cambiar las sumas sin pérdida de generalidad. Llegamos a,

$$\tilde{u}_j(\omega) = \sum_{s=1}^{N_s} \sum_{r=0}^{N_t-1} C_{k_s} \frac{e^{i(k_s j)}}{\sqrt{N_s}} e^{-i\omega_{k_s} t_r} e^{-i\omega t_r} = \sum_{s=1}^{N_s} C_{k_s} \frac{e^{i k_s j}}{\sqrt{N_s}} \delta(\omega - \omega_{k_s}). \quad (3.20)$$

Finalmente, sumamos sobre todas las partículas  $j$ ,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_s} \|\tilde{u}_j(\omega)\| &= \sum_{j=1}^{N_s} \left\| \sum_{s=1}^{N_s} C_{k_s} \frac{e^{i k_s j}}{\sqrt{N_s}} \right\| \delta(\omega - \omega_{k_s}) \\ &= \sum_{s=1}^{N_s} \left( \sum_{j=1}^{N_s} \left\| C_{k_s} \frac{e^{i k_s j}}{\sqrt{N_s}} \right\| \right) \delta(\omega - \omega_{k_s}) \equiv \sum_{s=1}^{N_s} \tilde{u}(\omega_{k_s}) \delta(\omega - \omega_{k_s}), \end{aligned}$$

donde  $\tilde{u}(\omega_{k_s})$  es la amplitud del  $k_s$ -ésimo pico del espectro.

En el caso para el cual la condición de frontera es cíclica, cada frecuencia está doblemente degenerada. Este efecto debe tomarse en cuenta apropiadamente, ya que cualquier combinación lineal de vectores propios que corresponden a la

misma frecuencia es también una solución. Así, para frecuencias que presentan degeneración doble, la fórmula para la amplitud es:

$$\tilde{u}(\omega_{k_s}) = \sum_{j=1}^{N_s} \left\| C_{k_s} \frac{e^{k_s j}}{\sqrt{N_s}} + C_{-k_s} \frac{e^{-ik_s j}}{\sqrt{N_s}} \right\|, \quad (3.21)$$

la cual también se puede escribir:

$$\tilde{u}(\omega_{k_s}) = \sum_{j=1}^{N_s} \sqrt{\left( C_{k_s} \frac{e^{ik_s j}}{\sqrt{N_s}} + C_{-k_s} \frac{e^{-ik_s j}}{\sqrt{N_s}} \right) \left( C_{k_s}^* \frac{e^{-ik_s j}}{\sqrt{N_s}} + C_{-k_s}^* \frac{e^{ik_s j}}{\sqrt{N_s}} \right)}$$

Realizando el álgebra correspondiente, se llega a

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\omega_{k_s}) &= \sum_{j=1}^{N_s} \sqrt{2 \frac{C_{k_s} C_{k_s}^*}{N_s} (2 \cos^2(k_s j))} \\ &= \sum_{j=1}^{N_s} \left\| 2 \frac{C_{k_s}}{\sqrt{N_s}} \cos(k_s j) \right\|. \end{aligned} \quad (3.22)$$

El coeficiente  $C_{k_s}$  se obtiene proyectando la condición inicial en cada modo normal, usando para ello que los modos normales son ortogonales entre sí. En este caso, la condición inicial es una delta en el sitio  $j = N_s/2$ . De este modo, el valor de  $C_{k_s}$  queda como,

$$\begin{aligned} C_{k_s} &= \sum_{j=1}^{N_s} A_{k_s j}^{-1} u(j, t=0) = \sum_{j=1}^{N_s} \sum_{s=1}^{N_s} \frac{e^{ik_s j}}{\sqrt{N_s}} \delta_{j, \frac{N_s}{2}} \\ &= \sum_{s=1}^{N_s} \left( \frac{1}{\sqrt{N_s}} \right) \sum_{j=1}^{N_s} \delta_{j, \frac{N_s}{2}} e^{i(k_s j)} = \sum_{s=1}^{N_s} \frac{\delta_s N_s/2}{\sqrt{N_s}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{N_s}} \end{aligned} \quad (3.23)$$

así la transformada de Fourier queda:

$$\tilde{u}(\omega_{k_s}) = \sum_{j=1}^{N_s} \left\| \frac{2}{N_s} \cos\left(\frac{2\pi j(s-1)}{N_s}\right) \right\|. \quad (3.24)$$

En el caso para el cual el número de sitios tiende a infinito, la suma de la ecuación 3.22 puede sustituirse por una integral llegándose a que cada pico tiene una intensidad,

$$\tilde{u}(\omega_{k_s}) = \frac{2}{\pi} \cong 0,63662$$

Este resultado teórico coincide perfectamente con nuestros resultados numéricos, de tal modo que este resultado nos permite tener confianza en el método propuesto y los programas de cómputo realizados. En el capítulo siguiente, se presentan y discuten los resultados obtenidos para diversos tipos de redes, en especial los efectos de incluir términos no-lineales.

## Capítulo 4

# Efectos no lineales en sistemas de pocas partículas.

En este capítulo, se hará un breve estudio de los efectos no-lineales en un sistema de dos partículas. La razón de este estudio es que permitirá entender de manera simple cuales son los efectos de la no-linealidad y al mismo tiempo nos permite probar la confiabilidad del método que se propone para estudiar el espectro de sistemas no lineales. Posteriormente usaremos los conceptos desarrollados en este capítulo para entender sistemas más complejos.

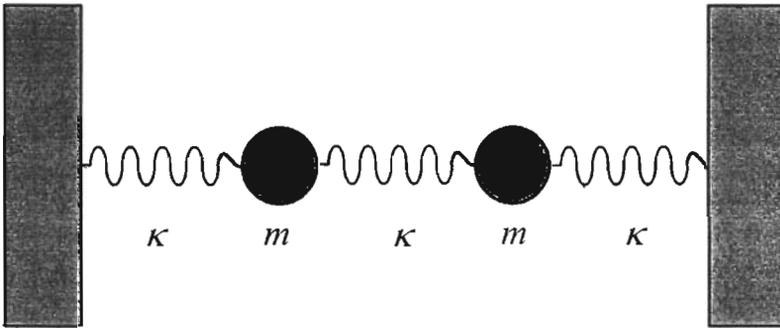


Figura 4.1: Sistema de dos partículas con condiciones a la frontera fijas, donde  $m_1$  y  $m_2$  son las masas de las partículas y  $\kappa$  es la constante de resorte.

Empezaremos por estudiar un sistema simple de dos masas unidas mediante un resorte. A su vez, cada masa se une con resortes a una pared, tal como se muestra en la figura 4.1. Por simplicidad los cálculos se harán para partículas con masas iguales y los coeficientes de restitución de los resortes también serán iguales. Dado que es un sistema de dos partículas, en el caso de un potencial armónico existen dos modos normales de oscilación [22].

Dichos modos se obtienen de la forma siguiente. El hamiltoniano armónico para este sistema es,

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{\kappa}{2} (-u_1)^2 + \frac{\kappa}{2} (u_1 - u_2)^2 + \frac{\kappa}{2} (u_2)^2, \quad (4.1)$$

donde  $p_j$  es el momento,  $u_j$  es el desplazamiento fuera de la posición de equilibrio,  $m_j$  es la masa de la partícula  $j = 1, 2$ ; que en lo subsiguiente serán iguales a  $m$ ; y donde  $\kappa$  es la constante de los resortes.

Así, las ecuaciones de movimiento son,

$$\ddot{u}_1 = -\frac{\kappa}{m} (2u_1 - u_2), \quad (4.2)$$

$$\ddot{u}_2 = -\frac{\kappa}{m} (2u_2 - u_1). \quad (4.3)$$

Se propone la solución de este sistema a la función:

$$u_j = A_j e^{-i\omega t}, \quad j = 1, 2. \quad (4.4)$$

En la ecuación anterior,  $A_j$  es la amplitud del desplazamiento máximo de la partícula  $j$ ,  $\omega$  es la frecuencia de la oscilación. Sustituyendo en las ecuaciones de movimiento se tiene que:

$$-\omega^2 A_1 e^{-i\omega t} + \frac{\kappa}{m} (2A_1 e^{-i\omega t} - A_2 e^{-i\omega t}) = 0, \quad (4.5)$$

$$-\omega^2 A_2 e^{-i\omega t} + \frac{\kappa}{m} (2A_2 e^{-i\omega t} - A_1 e^{-i\omega t}) = 0. \quad (4.6)$$

De aquí se construye la matriz dinámica  $\mathbb{D}$  [25]:

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \frac{2\kappa}{m} - \omega^2 & -\frac{\kappa}{m} \\ -\frac{\kappa}{m} & \frac{2\kappa}{m} - \omega^2 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Los valores de  $A_j$  se obtienen de resolver la ecuación matricial correspondiente, matriz, tal que se cumpla que  $\mathbb{A}^{-1} \mathbb{D} \mathbb{A} = \mathbb{D}' = \lambda \mathbb{I}$ , donde  $\mathbb{A}$  es la matriz de vectores propios que tiene como columnas los vectores  $\mathbf{A}_1$  y  $\mathbf{A}_2$ ,  $\mathbb{D}'$  es una matriz diagonal cuyos valores en la diagonal corresponden a los valores propios,  $\lambda$  es el vector con entradas  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , donde  $\lambda_{k_s} = \omega_{k_s}^2$ ,  $\omega_{k_s}$  son las frecuencias de los modos normales, e  $\mathbb{I}$  es la matriz identidad.

Para este sistema de dos partículas, con  $\frac{\kappa}{m} = 1s^{-2}$  se tiene que los valores para las frecuencias son  $\omega_1 = 1Hz$  y  $\omega_2 = \sqrt{3}Hz$ , y los vectores propios son:

$$\mathbf{A}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \end{pmatrix}.$$

Estos resultados fueron reproducidos por la simulación que se discutió en el capítulo 3.

Ahora, estudiaremos el caso no-lineal y para ello consideramos un hamiltoniano no-lineal, con un término cúbico y otro de cuarto orden en el potencial para cada una de las partículas.

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{\kappa}{2}(-u_1)^2 + \frac{\kappa}{2}(u_1 - u_2)^2 + \frac{\kappa}{2}(u_2)^2 \\
 &+ \gamma_3 \frac{\kappa}{3}(-u_1)^3 + \gamma_3 \frac{\kappa}{3}(u_1 - u_2)^3 + \gamma_3 \frac{\kappa}{3}(u_2)^3 \\
 &+ \gamma_4 \frac{\kappa}{4}(-u_1)^4 + \gamma_4 \frac{\kappa}{4}(u_1 - u_2)^4 + \gamma_4 \frac{\kappa}{4}(u_2)^4. \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

Resolver esta ecuación para  $\gamma_3 \neq 0$  y  $\gamma_4 \neq 0$  es complicado. Para ello el término  $\gamma_3$  se igualará a cero para resolver con facilidad las ecuaciones de movimiento, quedando estas de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_1 &= -\frac{\kappa}{m} \left[ u_1 - (u_2 - u_1) + \gamma_4 (u_1)^3 - \gamma_4 (u_2 - u_1)^3 \right] \\
 &= -\frac{\kappa}{m} \left[ 2u_1 - u_2 + \gamma_4 (2u_1^3 - u_2^3 + 3u_2^2 u_1 - 3u_2 u_1^2) \right], \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \ddot{u}_2 &= -\frac{\kappa}{m} \left[ u_2 + (u_2 - u_1) + \gamma_4 (u_2)^3 + \gamma_4 (u_2 - u_1)^3 \right] \\
 &= -\frac{\kappa}{m} \left[ 2u_2 - u_1 + \gamma_4 (2u_2^3 - u_1^3 - 3u_2^2 u_1 + 3u_2 u_1^2) \right]. \quad (4.10)
 \end{aligned}$$

Para resolver las ecuaciones de movimiento se propone la función:

$$u_j(t) = A_j \cos(\omega t), \quad (4.11)$$

donde  $A_j$  es la amplitud máxima de desplazamiento de la partícula,  $\omega$  es la frecuencia de oscilación; al sustituirla y desarrollarla, en la solución quedan términos de tercer grado en  $\cos(\omega t)$ . Dada la identidad de la ecuación 2.28, al sustituirla en las ecuaciones de movimiento 4.9 y 4.10, hace que aparezcan términos cúbicos en el desarrollo, y que producen una contribución del triple de la frecuencia de oscilación del modo normal de la oscilación original (ver la sección 2.2.1, ecuación 2.30).

Para obtener una solución que nos permita despejar la frecuencia en función de los parámetros iniciales, debemos agregar un término que tenga el triple de la frecuencia en la función que se propone como solución en la ecuación 2.31 [22].

$$u_j(t) = A_j \cos(\omega t) + B_j \cos(3\omega t). \quad (4.12)$$

Una vez más, se calculan la primera y segunda derivadas de esta función, y se sustituyen en las ecuaciones de movimiento (ecuaciones 4.9 y 4.10). Al desarrollar, si despreciamos los términos de orden mayor al primero, correspondientes a la frecuencia  $3\omega$ , por ser estas contribuciones pequeñas, la solución para la partícula 1 toma la forma:

$$\begin{aligned}
 &\left[ \left( 2\frac{\kappa}{m} - \omega^2 \right) A_1 - \frac{\kappa}{m} A_2 + \frac{3\gamma_4 \kappa}{2m} A_1^3 - \frac{3\gamma_4 \kappa}{4m} A_2^3 \right] \cos(\omega t) \\
 &+ \left[ \left( \frac{2\kappa}{m} - 9\omega^2 \right) B_1 - \frac{\kappa}{m} B_2 + \frac{\gamma_4 \kappa}{2m} A_1^3 - \frac{\gamma_4 \kappa}{4m} A_2^3 \right] \cos(3\omega t) = 0, \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

y para la partícula 2 se tienen que:

$$\begin{aligned} & \left[ \left( 2\frac{\kappa}{m} - \omega^2 \right) A_2 - \frac{\kappa}{m} A_1 + \frac{3\gamma_4\kappa}{2m} A_2^3 - \frac{3\gamma_4\kappa}{4m} A_1^3 \right] \cos(\omega t) \\ & + \left[ \left( \frac{2\kappa}{m} - 9\omega^2 \right) B_2 - \frac{\kappa}{m} B_1 + \frac{\gamma_4\kappa}{2m} A_2^3 - \frac{\gamma_4\kappa}{4m} A_1^3 \right] \cos(3\omega t) = 0. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Estas ecuaciones no se satisfacen para todo valor de  $t$ , excepto si se establece la condición de que los términos entre paréntesis cuadrados sumen cero. Por lo que tenemos cuatro ecuaciones homogéneas por resolver.

Sumando los primeros términos de las ecuaciones 4.13 y 4.14 y despejando la frecuencia se obtiene la relación:

$$\omega = \sqrt{\frac{\kappa}{m} \left\{ 1 + \frac{3\gamma_4}{4} \left[ (A_1 + A_2)^2 - 3A_1A_2 \right] \right\}}, \quad (4.15)$$

y de la resta de dichos términos se obtiene:

$$\omega = \sqrt{\frac{3\kappa}{m} \left\{ 1 + \frac{3\gamma_4}{4} \left[ (A_1 - A_2)^2 + 3A_1A_2 \right] \right\}}. \quad (4.16)$$

Vemos entonces que las frecuencias de oscilación dependen del término no lineal y de las condiciones iniciales. En particular, la expresión anterior depende de la proyección de las condiciones iniciales sobre los modos normales, ya que la aparición de las combinaciones  $A_1 + A_2$  y  $A_1 - A_2$  corresponden a dicha proyección. Más adelante, las expresiones anteriores serán usadas para comparar con los resultados obtenidos de las simulaciones. La obtención de la función de la frecuencia dependiente de  $\gamma_3$  no se presenta en este trabajo, debido a la complejidad del cálculo.

Otra forma de ver el efecto del término no lineal en este sistema de dos partículas es mediante un análisis cualitativo de la energía potencial en función del desplazamiento. Graficando para cada una de las partículas cuando la otra partícula tiene desplazamiento cero se obtiene un pozo de potencial en el cual oscila la partícula con una frecuencia relacionada a la anchura de dicho pozo dada una condición inicial. La energía potencial que corresponde se puede extraer del hamiltoniano (ec. 4.8) para el término no lineal  $\gamma_3$ , y está descrita en la siguiente relación:

$$V(u_1) = \frac{1}{2}u_1^2 + \frac{1}{3}\gamma_3u_1^3, \quad (4.17)$$

para el término no-lineal  $\gamma_4$  se tiene la relación:

$$V(u_1) = \frac{1}{2}u_1^2 + \frac{1}{4}\gamma_4u_1^4, \quad (4.18)$$

tomando el valor de  $\kappa/m = 1s^{-2}$ , haciendo  $u_2 = 0$  y para distintos valores de  $\gamma_3$  y  $\gamma_4$  se obtienen las gráficas 4.2 y 4.3 respectivamente.

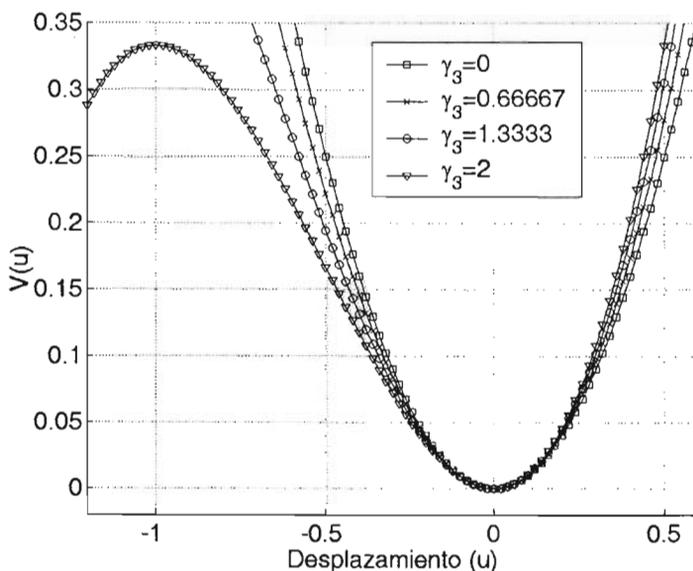


Figura 4.2: Vista del potencial para una de las partículas con variación del factor del término no lineal cúbico  $\gamma_3$ , con  $\frac{\kappa}{m} = 1s^{-2}$ .

Para un potencial con término cúbico, en el que el término  $\gamma_4$  se iguala a cero, muestra que la frecuencia disminuye al aumentar el valor de  $\gamma_3$ , aún a pesar de que en la parte creciente del potencial cúbico, se suma al potencial el término cuadrático reduciendo el espacio para las oscilaciones. La parte decreciente del potencial cúbico incrementa el espacio del pozo de potencial para la oscilación y reduce la altura del potencial crítico. En la figura 4.2, se aprecia que el incremento del potencial en los desplazamientos de  $u$  negativa es mayor que la reducción en  $u$  positiva. Así se entiende que al aumentar el término no-lineal cúbico, aumenta el período de oscilación. Cuando  $\gamma_3$  toma valores negativos, el comportamiento es igual al caso en el cual  $\gamma_3$  es positivo, ya que el potencial para  $\gamma_3$  menor que cero es la imagen espejo, usando como espejo al eje  $y$ , del caso  $\gamma_3$  mayor que 0.

Un análisis similar para un potencial con término cuártico muestra que la frecuencia aumenta conforme aumenta  $\gamma_4$ . Esto se explica por el hecho de que el término cuártico  $\gamma_4$  en el potencial deja menos espacio en el pozo de potencial para el desplazamiento de la partícula para un mismo nivel de energía, con lo cual el período disminuye (ver la figura 4.3). Cuando el parámetro  $\gamma_4$  no-lineal toma valores negativos y la frecuencia disminuye, el potencial con término cuártico con coeficiente negativo diverge a valores negativos con lo que se ensancha el pozo donde puede oscilar la partícula, y más allá de una distancia crítica diverge.

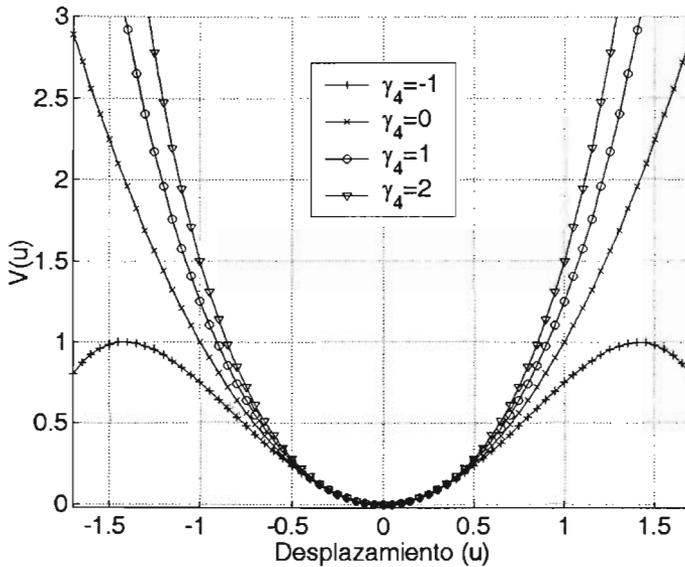


Figura 4.3: Vista del potencial para una de las partículas con variación del factor del término no lineal cuártico  $\gamma_4$ , con  $\frac{\kappa}{m} = 1s^{-2}$ .

Pasaremos ahora a describir los cálculos realizados en las simulaciones. Para la simulación se utiliza el método "salto de rana" el cual revisamos en el capítulo 3, que consiste en evaluar para un tiempo dado y a una posición inicial la aceleración para ese tiempo por medio de las ecuaciones 3.2, 3.4 y 3.5 de dicho capítulo.

En este trabajo se empleó el programa en lenguaje de MATLAB y cuyo código se presenta en el apéndice A. Al inicio de la simulación la aceleración de las partículas es cero así como su velocidad, y la posición de las partículas conforman la condición inicial, a este tipo de condición inicial se le llama excitación por desplazamiento [23]. Cuando la posición inicial de cada partícula corresponde al valor de uno de los vectores propios, la frecuencia de oscilación del sistema resulta ser igual a la frecuencia correspondiente al valor propio de dicho vector. En este sistema de dos partículas, se toma como condición inicial la suma de los vectores propios, de modo que se presentan las dos frecuencias fundamentales con la misma amplitud, donde los modos normales fueron calculados previamente por diagonalización de la matriz dinámica (ecuación 4.7).

Se realizó una simulación con valores dados para los coeficientes no lineales ( $\gamma_3$  y  $\gamma_4$ ), por separado, es decir que cuando  $\gamma_3 \neq 0$ ,  $\gamma_4 = 0$ , y viceversa. Los espectros obtenidos de variar  $\gamma_3$  y  $\gamma_4$  se muestran por separado para apreciar los efectos de cada una (ver figuras 4.4 y 4.5). En el intento por desarrollar

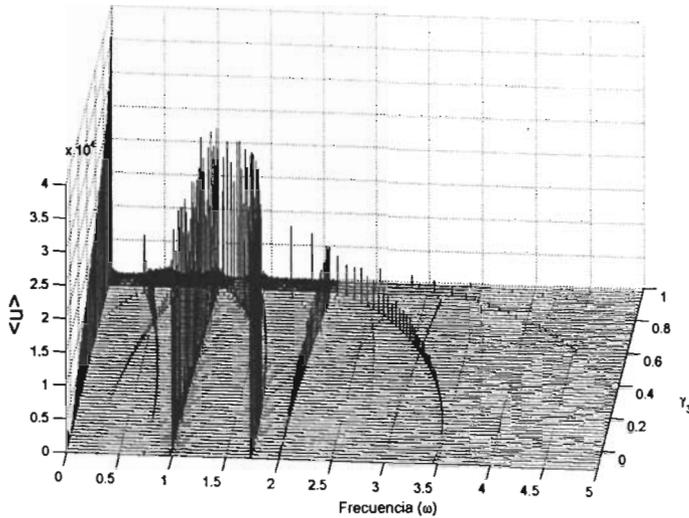


Figura 4.4: Variación de la frecuencia de oscilaciones con respecto al término no lineal  $\gamma_3$ , para una cadena de dos partículas con condiciones a la frontera fijas. El término  $\gamma_3$  no-lineal es de orden cúbico en el potencial de las partículas. Los parámetros de esta simulación fueron  $\frac{\kappa}{m} = 1s^{-2}$ ,  $A_1 = 1$ ,  $A_2 = 0$  y  $N_t = 65536$  iteraciones.

una solución de la frecuencia del sistema en función del término no lineal  $\gamma_3$ , se obtiene una ecuación lineal no homogénea con términos independientes asociados a la frecuencia  $\omega = 0$ , y en la cual se basa la explicación de los picos en dicha frecuencia en las gráficas 4.4 y 4.6, los cuales se interpretan como un desplazamiento constante del sistema.

En los dos casos, y dada la precisión con que se realizó la simulación, la aparición de modos combinados [24] se da en mayor número con el término no lineal de orden cúbico  $\gamma_3$  (ver figura 4.6). Esto se explica por el hecho de que el potencial con contribución anarmónica de orden cuártico es más estable para valores de  $\gamma_4$  positivos, pues el pozo de energía aún se puede aproximar bien por un potencial cuadrado (ver figura 4.3). En cambio, en el caso cúbico, el potencial se encuentra sesgado de su punto de equilibrio y presenta un valor de energía crítica, con valores positivos de  $\gamma_3$ , lo que se entiende produce oscilaciones más anarmónicas que en el cuártico.

Es tal la estabilidad que proporciona la contribución a la componente del triple de la frecuencia a la frecuencia fundamental (ecuación 2.28), que aparecen muy pocos modos combinados para los valores de  $\gamma_4$  mostrados en la figura 4.5.

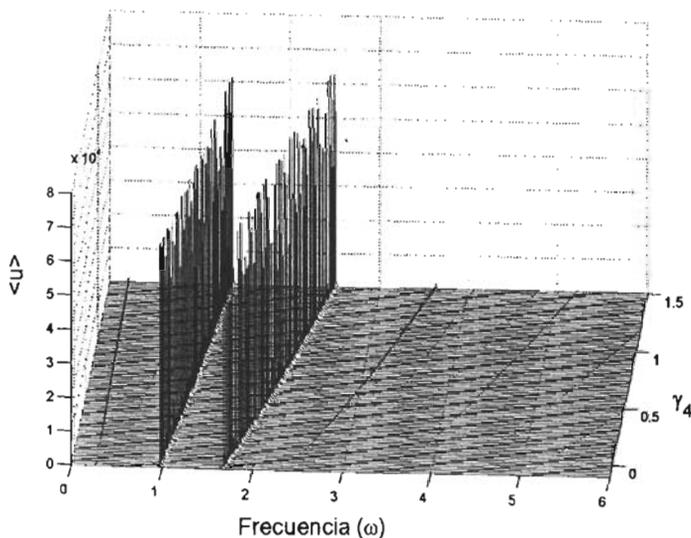


Figura 4.5: Muestra la variación de la frecuencia de oscilaciones con respecto al término no-lineal  $\gamma_4$ , para una cadena de dos partículas con condiciones a la frontera fija. El término  $\gamma_4$  no-lineal es de orden cuártico en el potencial de las partículas. En este caso los datos para la simulación fueron:  $\frac{\kappa}{m} = 0,5s^{-2}$ ,  $A_1 = 1$ ,  $A_2 = 0$  y  $N_t = 65536$  iteraciones

Además se observó que la simulación coincide con el desarrollo teórico. La alta eficiencia en la generación de armónicos (modos combinados) del caso no lineal  $\gamma_3$ , hizo necesario introducir un criterio de corte del espectro para eliminar los modos combinados y dejar las frecuencias principales, y así poder apreciar la dependencia con el factor no lineal actuante. Así, en las figuras 4.6 y 4.7 se muestra la posición de aquellos picos del espectro que tienen una altura mayor que la mitad del pico de mayor amplitud; en función de los coeficientes  $\gamma_3$  y  $\gamma_4$ . Se observa que si  $\gamma_3 \neq 0$ ,  $\gamma_4 = 0$ , el número de picos es mucho más grande que en el caso  $\gamma_3 = 0$ ,  $\gamma_4 \neq 0$ . La figura 4.7 muestra, además, la predicción para las frecuencias de los modos normales descritas en las ecuaciones 4.15 y 4.16, que se obtuvieron de manera analítica.

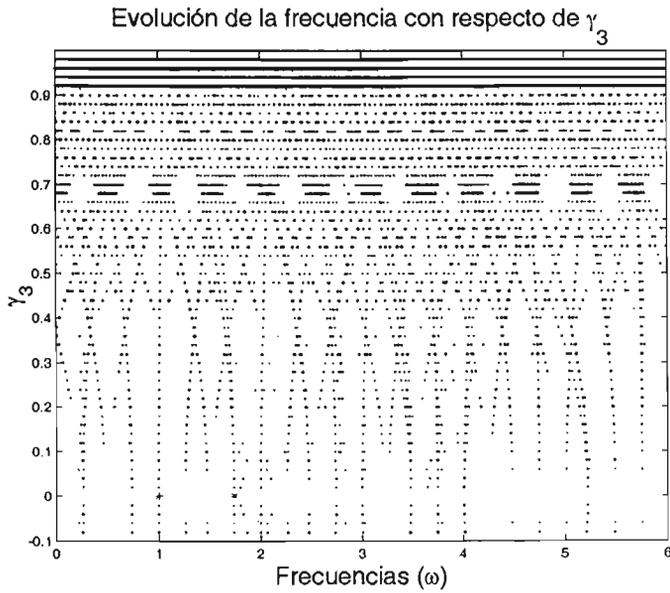


Figura 4.6: Ubicación de los máximos del espectro de frecuencias de la simulación como una función del factor no-lineal de orden cúbico ( $\gamma_3$ ).

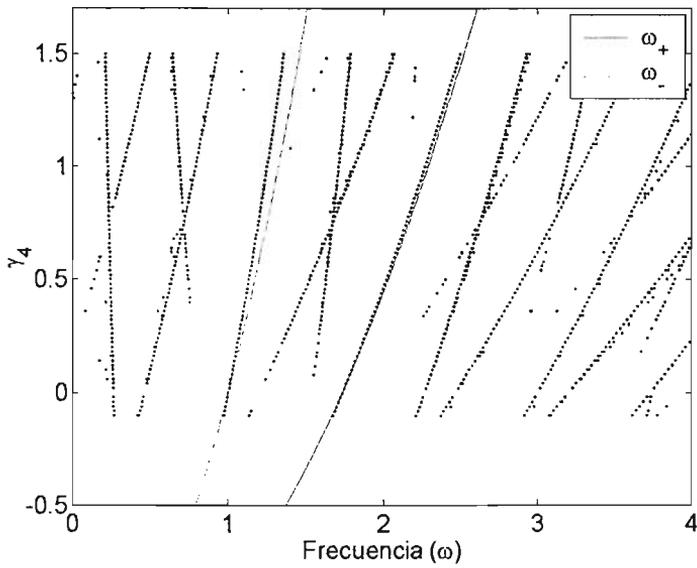


Figura 4.7: Ubicación de los máximos del espectro de frecuencias de la simulación como una función del factor no lineal de orden cuártico ( $\gamma_4$ ). Las líneas suaves corresponden a la predicción teórica (ecuaciones 4.15 y 4.16).

## Capítulo 5

# Efectos no lineales en sistemas de muchas partículas.

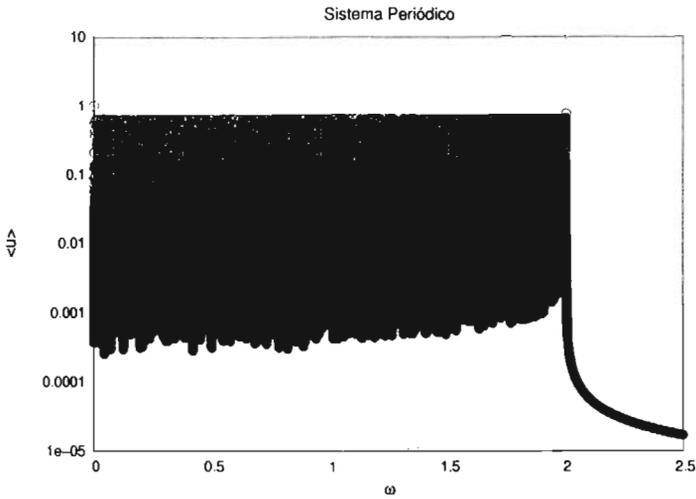
En este capítulo, se discuten los resultados de incluir términos no armónicos en el hamiltoniano para diversos tipos de redes. Para ello, la ecuación de movimiento que se usa en este capítulo incluye el término no lineal cuártico descrito en la sección 2.2.1. La ecuación de movimiento correspondiente está dada por la ecuación 2.22:

$$\begin{aligned}\ddot{u}_j = & \frac{\kappa_j}{m_j} (u_{j+1} - u_j) - \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} (u_j - u_{j-1}) \\ & + \gamma_4 \frac{\kappa_j}{m_j} (u_{j+1} - u_j)^3 - \gamma_4 \frac{\kappa_{j-1}}{m_j} (u_j - u_{j-1})^3,\end{aligned}$$

donde  $\gamma_4$  se tomará como una constante para todos los sitios. En principio, su valor puede variarse siguiendo los mismos lineamientos expuestos, es decir, suponiendo una secuencia dada. Sin embargo, en esta tesis se decidió estudiar el caso más sencillo para tratar de entender de manera general el efecto de dichos términos.

En todos los casos, las simulaciones se realizaron para un sistema de 2584 partículas, número que corresponde a la generación 17 de los números de Fibonacci. Para este número de sitios, se usaron dos configuraciones: una cadena de Fibonacci y la cadena periódica que se estudió previamente. Al igual que en capítulos previos, las condiciones iniciales consistieron en una delta, en el sitio  $N_s/2$ , que es la superposición de todos los modos normales. Una vez que la cadena ha sido excitada con la condición inicial, se deja que evolucione un número de pasos  $N_t = 16777216$ . Debe recalarse, que a diferencia de los programas usados en los capítulos anteriores, los cuales fueron escritos en MATLAB, en los cálculos para sistemas grandes se escribió un código similar al presentado anteriormente pero en lenguaje FORTRAN, dado que los programas en MATLAB son en general más lentos y requieren mucho espacio de memoria, como se mencionó en capítulos anteriores.

(a)



(b)

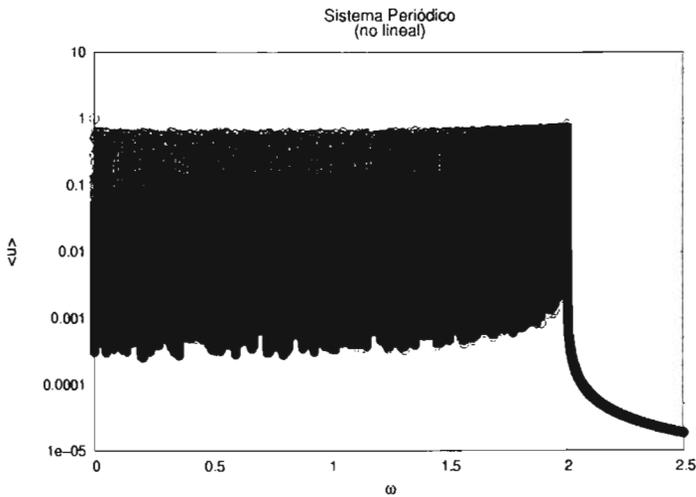


Figura 5.1: Muestra (a) la transformada de Fourier de un sistema periódico de 2584 partículas con  $\kappa/m = 1$ ,  $A_{n/2} = 1$ ,  $\Delta t = 0,1s$ , (b) la transformada de Fourier para el mismo sistema periódico con término no lineal  $\gamma_4 = 0,2\kappa$ . Nótese que en las figuras los datos se han multiplicado por un factor  $N_t$ .

Al introducir un valor pequeño al término no lineal ( $\beta_j = 0,2\kappa$ ) en la ecuación 2.22 para una cadena periódica de 2584 átomos, el espectro permanece casi igual (figura 5.1). Una amplificación de la región acústica muestra que el principal efecto es sólo un corrimiento en los picos hacia frecuencias más altas.

Para el caso de una cadena armónica de Fibonacci con  $m_B = m$ , y  $\kappa_S = \kappa_L/2$ , figura 5.2, se obtuvieron exactamente los mismos valores propios que se obtienen de la diagonalización de la matriz dinámica del sistema. El perfil de este espectro es conocido como un conjunto multifractal y corresponde a un espectro continuo singular, con modos normales localizados críticamente [14]. Este tipo de espectros tiene brechas en casi todo el espectro de frecuencias, debido a que el espacio recíproco de un cuasicristal es un conjunto denso, y en una dimensión, por cada punto de difracción en el espacio recíproco se abre una brecha en el espectro [2]. La figura 5.2 (b) muestra el espectro de la misma cadena Fibonacci incluyendo un término no lineal pequeño ( $\gamma_4 = 0,2$ ). En este caso, el efecto es dramático en el sentido de que no sólo los picos armónicos originales han cambiado, sino que también aparecen picos dentro de las brechas del espectro. La intensidad de estos nuevos picos es en general de al menos dos órdenes de magnitud más grande que la que los que se encuentran en el caso periódico. Además, para una cadena anarmónica de Fibonacci, el límite del espectro se extiende más allá del límite en el caso de la cadena puramente armónica de Fibonacci. A partir de esta figura, es claro que nuestros resultados indican que la cadena de Fibonacci es mucho más eficiente para generar armónicos de órdenes grandes, lo cual puede tener bastante importancia en diversas aplicaciones tecnológicas. De hecho, existen reportes de generación eficiente de armónicos ópticos mediante la iluminación con un láser de una super red de Fibonacci [1]. Además, dado que la conductividad térmica de un material depende de los efectos no armónicos en las vibraciones atómicas; los resultados obtenidos en esta tesis indican que se podrían esperar efectos interesantes

Pensamos que una explicación sencilla para este fenómeno está dada por la estructura del espacio recíproco de un cuasicristal (ver sección 1.1.2). Los sistemas cuasiperiódicos pueden ser descritos como una sucesión de aproximantes racionales, esta sucesión tiende al sistema cuasiperiódico en el límite de una celda unitaria infinita. Cada aproximante tiene bandas, vectores de onda ( $k_s$ ) bien definidos, y una relación de dispersión  $\omega_\eta(k_s)$ , donde  $\eta$  es el índice de banda. Ahora, si vemos la interacción anarmónica de cuarto orden como una colisión de fonones, donde dos fonones con vectores de onda  $k_1$  y  $k_2$  se aniquilan para formar dos nuevos fonones con vectores de onda  $k_3$  y  $k_4$ , entonces para cada proceso la energía se conserva [19], así como también el momento,

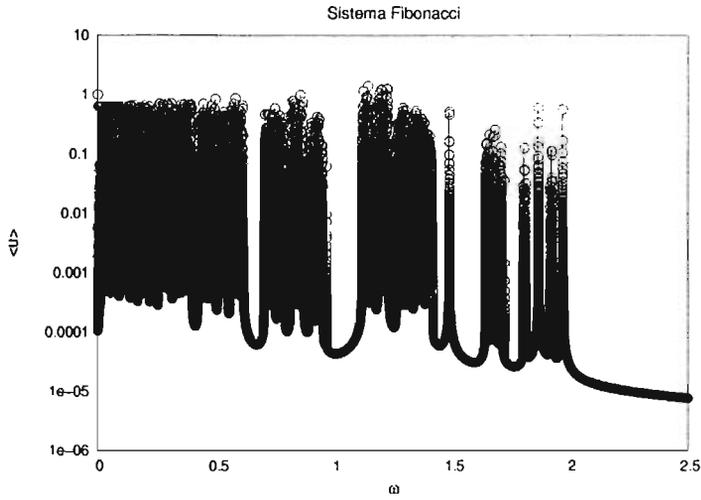
$$k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = G_{m,s},$$

de donde para una cadena de Fibonacci

$$G_{m,s} = \frac{2\pi}{\langle \lambda \rangle} (m + s\tau),$$

es un vector en el espacio recíproco,  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ ,  $m, s \in \mathbb{Z}$ ; y  $\langle \lambda \rangle$  es el promedio del parámetro de red.

a)



b)

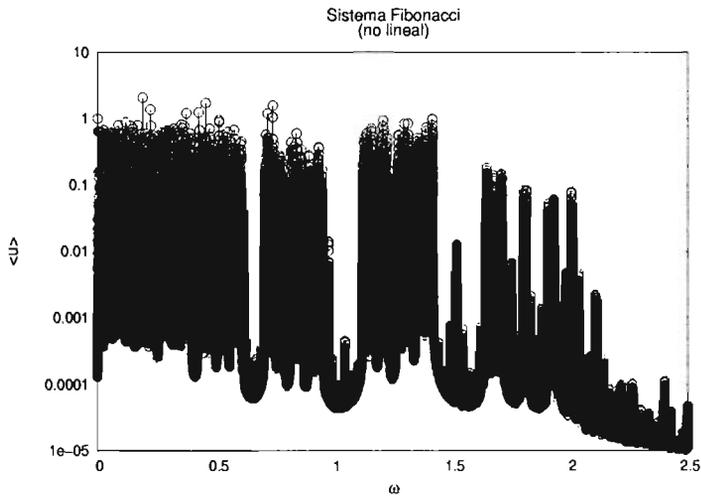


Figura 5.2: Muestra (a) la transformada de una cadena Fibonacci de 2584 partículas con parte no lineal, (b) la transformada del mismo sistema con término no lineal  $\gamma_4 = 0,2\kappa$ . Nótese que en las figuras los datos se han multiplicado por un factor  $N_t$ .

Primero, como referencia se realizaron cálculos para estudiar el efecto de la parte no-lineal en la cadena periódica (Figura 5.1). En este sistema se observan varias particularidades. Primero se observa un pico de frecuencia cero, el cual de hecho aparece también en las cadenas periódicas y desordenadas con y sin parte no-lineal. Este pico se debe simplemente a la conservación del momento lineal. La altura de este pico puede ser deducido de la ecuación (3.22) haciendo  $k_s = 0$ , y tiene una altura de  $1/N_t$ .

El segundo hecho importante es que los picos a baja frecuencia aparecen corridos hacia frecuencias altas, tal como predice la RWA, y que arriba del límite de banda de la cadena armónica, casi no aparecen armónicos.

# Capítulo 6

## Conclusiones

En esta tesis se abordó el problema de las oscilaciones no-lineales en sistemas de muchos cuerpos que están confinados a una dimensión. Para ello se propuso el siguiente método para encontrar el espectro de frecuencias:

1. resolver las ecuaciones de movimiento usando una delta de Dirac como condición inicial de modo que se exciten todos los modos normales.
2. calcular la transformada de Fourier de los desplazamientos de las partículas.

Para probar este método, se analizó un sistema de dos partículas y tres resortes. Los resultados del método propuesto fueron comparados con resultados analíticos obtenidos mediante teoría de perturbaciones y la aproximación de onda rotante (RWA). Así mismo, como banco de prueba también se usaron sistemas cuasiperiódicos y periódicos con hamiltonianos armónicos, los cuales pueden resolverse mediante un estudio de los modos normales. También en estos casos fue encontrado un excelente acuerdo entre los resultados de los métodos.

Posteriormente, se consideró el efecto de incluir términos no-lineales en hamiltonianos periódicos y cuasiperiódicos. Para bajas frecuencias, en ambos casos se observa un corrimiento hacia frecuencias mayores, tal como predice la aproximación RWA. Sin embargo, los resultados muestran que existe una diferencia cualitativa en el caso cuasiperiódico, ya que se observan mucho armónicos nuevos en las brechas del espectro y más allá del límite espectral del sistema puramente armónico. Este resultado muestra que las cadenas cuasiperiódicas son mucho mejores productoras de armónicos que las cadenas periódicas. Es importante destacar que este resultado no puede obtenerse mediante el uso de la RWA [26]. Creemos que este efecto, se debe a las propiedades del espacio recíproco de los cuasicristales, los cuales permiten que en las colisiones de fonones la regla de conservación de momento sea mucho menos restrictiva que en el caso periódico, ya que el espacio recíproco está lleno de puntos de difracción. Los resultados presentados en esta tesis tienen relevancia en la posibilidad de usar sistemas cuasiperiódicos como generadores eficientes de armónicos ópticos, así

como en el entendimiento de algunas características físicas de los cuasicristales, tales como la conductividad o expansividad térmica. Los resultados de esta tesis aparecieron en el artículo "Efficient anharmonic phonon generation using a quasiperiodic lattice" en *Physics Letters A* por I. Limas, G.G. Gerardo, F. Salazar y C. Wang.

# Bibliografía

- [1] S. Zhu, Y. Zhu, N. Ming, *Science* **278** (1997) 843.
- [2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, (John Wiley & Sons, 1996).
- [3] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1951.
- [4] D. Gratias, *Mundo Científico*, Vol. **6**, Núm. 61, (1986), 878-895.
- [5] A. MacKay, *Physica A*, **114**, (1982) 609-613.
- [6] A. MacKay, *Sov. Phys. Cryst.* **26**, (1981), 517-522
- [7] N.G. De Bruijn, *Kon. Nederl. Akad. Wetensch. Proc. Ser. A*, **84** (1981) 39-52.
- [8] T. Janssen, *Phys. Reports*, **168** (1988) 55.
- [9] J.P. Lu, T. Odagaki, J.L. Birman, *Phys. Rev. B* **33** (1986) 4809.
- [10] Spivak, Michael. *Cálculo infinitesimal*. Ed. Reverté, Barcelona, México 1991.
- [11] D.K. Campbell, S. Flach, Y.S. Kivshar, *Physics Today*, Enero, **57** (2004) 43.
- [12] P. Thiel, J.M. Dubois, *Nature* **406** (2000) 570.
- [13] P. J. Steinhardt, S. Ostlund. *The Physics of Quasicrystals* (World Scientific, Singapore, 1987).
- [14] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983) 1870.
- [15] Süto A 1994 *Beyond Quasicrystals* ed F Axel y D-Gratias (Paris: Les Editions de Physique).
- [16] G. Naumis, R. Barrio, C. Wang, *Phys. Rev. B* **50**, (1994) 9834.
- [17] G. Kopidakis, S. Aubry, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 3236.

- [18] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam: Los Alamos Rpt. LA-1940 (1965) *Collected Papers Of Enrico Fermi* (Univ. de Chicago Press, Chicago 1965) Vol. II.
- [19] M. Toda. *Theory of Non-Linear Lattices*, Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [20] Schuster, H.G. *Deterministic Chaos: An Introduction*, 3rd ed., Weinheim, Alemania, 1995.
- [21] C. Wang, R. Fuentes, O. Navarro, R.A. Barrio y R.G. Barrera, J. of Non-Cryst. Solids **153** (1993) 385.
- [22] Fowles, Grant R. *Analytical mechanics*. Editorial Holt, Nueva York, 1970.
- [23] G. S. Zavt, M. Wagner and A. Lütze, Phys. Rev. E **47**, 4108 (1993).
- [24] Landau, L. D., Lifshitz E. M. *Mecánica, Vol. 1 del Curso de Física Teórica*, segunda edición, editorial Reverté, España 2002.
- [25] Goldstein, Herbert. *Mecánica clásica*. Editorial Aguilar, Madrid 1972.
- [26] F. Salazar, C. Wang, A. Gelover-Santiago, A. Zentella-Dehesa, G.G. Nau-mis, y J. Talamantes, J. of Non-Cryst. Solids **329**, 167 (2003).
- [27] Hauser, Walter. *Introduction to the Principles of Mechanics*, editorial Addison Wesley, Estados Unidos, 1965.
- [28] R. P. Feynman, R. B. Leighton y M. Sands *Física Vol 1* editorial Fondo Educativo Interamericano, México 1971.
- [29] Arfken, G. B., Weber H. J. *Mathematical methods for physicists*, Cuarta edición, editorial Academic, San Diego, 1995.
- [30] William H. Press ... [et al.] *Numerical recipes in fortran 77 : the art of scientific computing*, Edición 2nd ed. Imprim. Cambridge : Cambridge University, 1989.
- [31] Stonick Virginia L., Bradley Kevin, *Labs for Signals and Systems*, PWS Publishing Company, E.E. U.U. 1996
- [32] Eric W. Weisstein. "Discrete Fourier Transform." From MathWorld—A Wolfram Web Resource.  
<http://mathworld.wolfram.com/DiscreteFourierTransform.html>

**ESTA TESIS NO SALE  
DE LA BIBLIOTECA**

# Apéndice A

## Programa en MATLAB

A continuación se lista el programa en lenguaje de MATLAB utilizado para realizar las simulaciones de sistemas de pocas partículas con los términos no lineales  $\gamma_3$  cúbico (gam3) y  $\gamma_4$  cuártico.

```
% EIGMOD3C. Al igual que EIGMOD3, calcula
% la simulación de un sistema unidimensional
% de N partículas, pero para un sistema cíclico.
% (por lo que el número de partículas es igual
% al número que se le pone a Nchain).
% Y genera el espectro de frecuencias a lo largo
% de un tiempo T ficticio.
%
% última modificación consistente: septiembre 2004
% última modificación bomberazo: ver la fecha del archivo con dir.date
%Fonon-propagacion de fonones en una cadena N-átomos
%Hay M saturadores
%for kkk=0:0.02:1.5, % ESTE for ES PARA EJECUTAR ESTE PROGRAMA
%% VARIAS VECES (EN AUTOMATICO) Y ASIGNAR
%% DISTINTOS VALORES A kkk, QUE PUEDE SER LA
%% VARIABLE PARA DESIGNAR LA PARTICULA CON
%% EL DESPLAZAMIENTO INICIAL, Ó EL VALOR DE
%% LAS GAMMAS.
%kkk=0.0;
colordef black% esto es para poner fondo negro a las gráficas
%clear all;
%close all;
for kas=5:5,%este for es para inicializar las gráficas
figure(kas);%
clf;%reset(gcf);% Pero no se necesita para hacer cálculos
end%
A=01.0;% VALOR DEL COEFICIENTE DE LA MASA TIPO A
B=01.0;% VALOR DEL COEFICIENTE DE LA MASA TIPO B
L=1.0;% VALOR DEL COEFICIENTE DE RESORTE TIPO A
S=1.0;% VALOR DEL COEFICIENTE DE RESORTE TIPO B
```

```

% Debiendo ser coeficiente para resortes para enlaces A-A y
% coeficiente para resortes para enlaces tipo A-B y B-A
% Pero este cálculo aún no está programado en el cálculo del
% vector de los resortes.
if S == L %este IF es para agregar un distintivo
peri='e'; % al nombre de los archivos generados.
else % En esta versión EIGMOD3CE este distintivo
peri='u'; % no se usa, ni el archivo.
end
% 2 ^9 = 512 \
% 2 ^10= 1024 |
% 2 ^11= 2048 |
% 2 ^12= 4096 >tabla de potencias de 2
% 2 ^13= 8192 |
% 2 ^14= 16384 |
% 2 ^15= 32768 /
tamdelta=1.0; % <-----Tamaño del desplazamiento inicial (C.I.)
%
Nfra=8; % <-----número de trayectorias a guardar por simulación
% Esta pensado para correr la simulación varias veces
% y guardar un número de posiciones en cada corrida
% Pero esto aún no está programado. Lo que sí es que
% sólo graba las primeras Nfra trayectorias.
N=Nfra; % <----- Número de partículas
%
M=pow2(19); % <----- número de iteraciones, alias Ntmax
tmax=pow2(12)*pi; % <-----cantidad en DESUSO (tiempo máximo de simulación).
%dT=tmax/M; % <-----'
dT=1.0e-2; % <----- Delta t (intervalo de tiempo en la simulación)
% INICIALIZACIÓN DE VARIABLES
Fnon=zeros(1,N);
a=zeros(1,N);
x=zeros(1,N);
v=zeros(1,N);
xmi=zeros(1,Nfra);
xis=zeros(M,Nfra);
%for i=1:Nfra, %
%% eval(['a' num2str(i) '=zeros(1,M);']) % inicializa la aceleración de
los Nfra átomos
% eval(['x' num2str(i) '=zeros(1,M);']) % " " posición " " " "
%% eval(['v' num2str(i) '=zeros(1,M);']) % " " velocidad " " " "
%end%
sigma=zeros(1,M);
gam4=0.0; % gam4 = kkk para cuando se use para varios valores de gammas
%% en varias corridas, junto con el for del inicio.
gam3=0.0;
% variables en DESUSO
mode=3.0;
ka=mode*pi/(10-1);
omega=2*(1-cos(ka));

```

```

% variables en desuso .fin.
% GENERACIÓN DEL VECTOR DE MASAS
masa1=[A]; % Donde A=1 y B=1597/987 (ver valores de A y B arriba);
masa2=[B A]; %Donde las partículas del extremo no se usan.
nnn=0;
while nnn<N
Masa=[masa2 masa1]; % Esta rutina de while hace
masa1=masa2; % la concatenación del vector
masa2=Masa; % de entradas de masa.
nnn=length(Masa); % con Masa resultado final.
end
Masa=Masa(1:N);
% PRUEBA A VER QUE SALE para alterar la masa a un vector aleatorio.
% Masa=unifrnd(0,2,1,N);
% GENERACIÓN DEL VECTOR DE RESORTES -
%antes: (L=A S=B) versiones EIGMOD
%beta1=[L];
%beta2=[S L] PERO esto es PARA GENERAR la cadena de "LAS PARTICULAS".
% y no de resortes de unión A-B B-A y A-A
beta1=[L]; % (Así S=B(aa)=0.5 , L=B(ab)=B(ba)=1.0);
beta2=[S L]; %Donde la última entrada de la beta final, no se usa.
nnn=0;
while nnn<N
nnn=nnn+1; % Esta rutina de while hace
beta = [ beta2 beta1 ]; % la concatenación del vector
beta1= beta2; % de entradas de beta.
beta2= beta; % con beta resultado final.
nnn=length(beta);
end
beta=beta(1:N);
kkk=gam4; %esta instrucción no debería existir, pero es necesaria.
%% Pues da nombre al archivo de salida.
%% MÓDULO PARA LA GENERACIÓN DE UNA CADENA ALEATORIA.
%
%Ni2=55; %esto está en función de N para fibon Ni-2
%% dice cuantos Ni2 átomos tipo B habrá en la cadena.
%
%caso=1; % 0 = generar cadena aleatoria.
%%% 1 = utilizar archivo de cadena aleatoria.
%
%if caso==0,
% sale=1;
% while sale<2%
% gee=sort(fix(unifrnd(1,N,Ni2,1))); % genera cadena aleatoria
% difgee=gee(2:Ni2)-gee(1:Ni2-1); % y
% difgee2=find(difgee); % revisa que no se repitan
% if length(difgee2)==Ni2-1, % las posiciones.
% sale=2% luego
% save geee gee % guarda en el archivo geee
% end% el vector gee de la cadena

```

```

% end% aleatoria.
%else%
% load geee% Carga archivo con cadena
%end% aleatoria.
%
%gee'
%%pause
%gcuenta=1;
%ge=0;
%while gcuenta<=Ni2%
% ge=ge+1;% genera el vector de átomos
% if gee(gcuenta)==ge% con la cadena aleatoria
% beta(ge)=S;% del vector gee (ver arriba)
% gcuenta=gcuenta+1;%
% else%
% beta(ge)=L;%
% end%
%end
%clear difgee difgee2 ge gcuenta gee caso sale Ni2
% FIN DEL MÓDULO DE CADENAS ALEATORIAS.
beta'
%pause
%ESTUDIO DE LA ENERGÍA
%el potencial es:
% V = sum(1:j) beta(j)/2 * (u(j+1)-u(j))%%% INCOMPLETO
% CONDICIONES INICIALES (EXCITACIÓN DE LA CADENA)
% Condición a la frontera cíclica =>frontera =1;
% condición a la frontera paredes rígidas =>frontera =0;
frontera=1
%%%%%%%%%%%%%%
%for j=1:1:N;%
% jo=j-71;%
% x(j)=sin(ka*(j-1));%
% v(j)=omega*cos(ka*(jo-1));%
%delass=fix(unifrnd(0,N-1,5,1)+1);%
deltass=[2];%
x(deltass)=tamdelta;%
% x(4)=-1.0;%
%end%
%x(1)= 1.69870923138399;%
%x(2)= 0.25524060686630;%
%x(3)= -0.22189903068141;%
%x(4)= 0.16540167971354;%
%x(5)=1.0;%
%
i=1:1:N;% en la figura 5 se
figure(5);% gráfica la posición
plot(i,x(i),'-*'),axis([0,N+1,-2,2]);% inicial de la cadena
figure(6)% inicia la gráfica 6 para ver la simulación
hold on% en tiempo real.

```

```

%subplot('position',[0.25 0.25 0.5 0.5])
i=1:1:N;
for j=1:M;
% for i=2:(N-1); la ecuacion Fnon original se ha perdido (wasted)
Fnon(2:N-1)=...
gam4 * beta(2:N-1) ./ Masa(2:N-1) .* ( ( x(3:N) - x(2:N-1) ).^3 )-...
gam4 * beta(1:N-2) ./ Masa(2:N-1) .* ( ( x(2:N-1) - x(1:N-2) ).^3 )+...
gam3 * beta(2:N-1) ./ Masa(2:N-1) .* ( ( x(3:N) - x(2:N-1) ).^2 )-...
gam3 * beta(1:N-2) ./ Masa(2:N-1) .* ( ( x(2:N-1) - x(1:N-2) ).^2 );
Fnon(1)=...
gam4 * beta(1) / Masa(1) * ( ( x(2) - x(1) ) ^3 )-...
gam4 * beta(N) / Masa(1) * ( ( x(1) - x(N) ) ^3 )+...
gam3 * beta(1) / Masa(1) * ( ( x(2) - x(1) ) ^2 )-...
gam3 * beta(N) / Masa(1) * ( ( x(1) - x(N) ) ^2 );
Fnon(N)=...
gam4 * beta(N) / Masa(N) * ( ( x(1) - x(N) ) ^3 )-...
gam4 * beta(N-1) / Masa(N) * ( ( x(N) - x(N-1) ) ^3 )+...
gam3 * beta(N) / Masa(N) * ( ( x(1) - x(N) ) ^2 )-...
gam3 * beta(N-1) / Masa(N) * ( ( x(N) - x(N-1) ) ^2 );
% PROTECCIÓN CONTRA DESBORDE DE MEMORIA
if max(Fnon)>10000
fprintf(['Oppsss!!!!.' num2str(j) ' .Presione [Ctrl]+[C]\n'])
pause
end
% PROTECCION CONTRA...
a(2:N-1)=...
((beta(2:N-1)./Masa(2:N-1).* ( x(3:N) - x(2:N-1) ) ) -...
( beta(1:N-2)./Masa(2:N-1).* ( x(2:N-1) - x(1:N-2) ) ) +...
Fnon(2:N-1));
a(1)=...
((beta(1) /Masa(1) * ( x(2) - x(1) ) ) -...
( beta(N) /Masa(1) * ( x(1) - x(N) ) ) +...
Fnon(1))*frontera;
a(N)=...
((beta(N) /Masa(N) * ( x(1) - x(N) ) ) -...
( beta(N-1) /Masa(N) * ( x(N) - x(N-1) ) ) +...
Fnon(N))*frontera;
% de estas ecuaciones de movimiento se toma en cuenta que
%
% a(t) = kappa (u_i-1 - u_i) - kappa (u_i - u_i+1)
% + gamma' (u_i-1 - u_i) - kappa (u_i - u_i+1)
%
% donde kappa es la constante de resorte y que en el programa se llama
beta
% y gamma' = gamma cúbica ó gamma cuártica multiplicada por la constante
de
% resorte.
v=v+(a*dT);
x=x+(v*dT);
sig=0.0;

```

```

try
% xmd=([x1(j-1) x2(j-1) x3(j-1) x4(j-1) x5(j-1)]+x)/2;
xmi=(xis(j-1,:)+x(1:Nfra))/2;
catch
xmi=zeros(1,Nfra);
xmi(deltass)=tamdelta;
fprintf(num2str(j))
lasterr
end
poten=[(xmi(2:Nfra)-xmi(1:Nfra-1)) xmi(1)-xmi(Nfra)];
sig=sig+(0.5*v*(v')+poten*poten'*0.5);% CALCULA: energía total
% ALMACENAMIENTO DE LAS TRAYECTORIAS
xis(j,:)=x(1:Nfra);
% v1(j)=v(1);
% v2(j)=v(2);
% v3(j)=v(3);
% v4(j)=v(4);
%%for ii=1:Nfra,
%% eval(['x' num2str(ii) '(j)=x(' num2str(ii) ')']);]
%%end
% x1(j)=x(1);% /\
% x2(j)=x(2);% |
% x3(j)=x(3);% Este FOR hace lo que estas instrucciones,
% x4(j)=x(4);% (i.e. EVAL automatiza las asignaciones)
% x5(j)=x(5);% además de ser para un número de sitios variable
% x6(j)=x(6);% de acuerdo con Nfra. (pero se cree que puede
% x7(j)=x(7);% retrasar la simulación)
% x8(j)=x(8);%
% x9(j)=x(9);%
sigma(j)=sig;% ACUMULA LA INFOMACIÓN DE u CUADRADA
if j>=M+100,%
% clf% este módulo ERA para mostrar
%% hold on% la simulación en tiempo real
% plot(i,x(i),'.'); axis([0,N+1,-2,2]);%
% title(j)% Pero ya no se necesita
pause(0.001)% además de que retrasar la
% hold off% simulación.
end%
% set(h,'XData',i,'YData',x(i));% <----esta instrucción es apócrifa.
end%
fprintf('Sim. Done.\n')%
cadguardar=['save PruebaA' num2str(kkk) ' sigma'];% Guarda las trayectorias
for i=1:Nfra,% en un archivo
eval(['x' num2str(i) '=xis(:, ' num2str(i) ')';' ])%
cadguardar=[cadguardar ' x' num2str(i)];%
end%
eval(cadguardar)%
%save confutatismutis x1 x2 x3 x4 x5 x6 x7 x8%
fprintf(['saved (' num2str(2*pi/(dT*M)) ') \n'])%
%pause

```

```

% CÁLCULO DE LA TRANSFORMADA DE FOURIER
%mag=(real(fft(x1)).^2+imag(fft(x1)).^2)/M/M*N;% se calcula el módulo de
la trans. de la 1era. partícula
mag=(abs(fft(x1)).^2)/M/M*N;% se calcula el módulo de la trans. de la 1era.
partícula. Original2
%mag=abs(fft(x1))/M;% se calcula el módulo de la trans. de la 1era. partícula
for i=2:Nfra,
% eval(['mag=mag+(real(fft(x' num2str(i) ')).^2+imag(fft(x' num2str(i)
')).^2)/M/M*N;'])
% cálculo del módulo d'FFT d'partículas restantes
eval(['mag=mag+(abs(fft(x' num2str(i) ')).^2)/M/M*N;'])% cálculo del módulo
d'FFT d'partículas restantes.
%% Original2
% eval(['mag=mag+abs(fft(x' num2str(i) '))/M;'])% cálculo del módulo d'FFT
d'partículas restantes
end
%x=x1;
lar=M;%length(x1);
NN=1:1:lar;
fress=2*pi*(NN-1)/(dT*lar);% CÁLCULA vector de frecuencias del espectro.
figure(11); plot(fress,mag,'-*')% GRAFICA el resultado de la fft para las
Nfra
[find(mag>=10000)' fress(find(mag>=10000))]'% partículas.
cadguardar=['save PruebaB' num2str(kkk) ' mag fress'];% GUARDA en archivo
los
eval(cadguardar)% resultados de la FFT
%save confutatismutis x1 x2 x3 x4 x5 x6 x7 x8
fprintf(['saved (' num2str(2*pi/(dT*M)) ')\n'])
figure(6); plot((NN-1)*dT,sigma,'-'); axis([0 lar*dT -0.05 1.1])
% el siguiente bloque su usó para generar los espectros
% como función del tiempo, si la simulación es de un
% número grande de iteraciones, esto puede trabar el sistema.
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x8,8192,(2*pi/dT),...
% kaiser(8100,5),8000);
% gueno=abs(gueno8)/8;
% clear x8
% fprintf(' ')
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x7,8192,(2*pi/dT),...
% kaiser(8100,5),8000);
% clear x7
% fprintf(' ')
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8);
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x6,8192,(2*pi/dT),...
% kaiser(8100,5),8000);
% fprintf(' ')
% clear x6
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8);
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x5,8192,(2*pi/dT),...
% kaiser(8100,5),8000);
% fprintf(' ')

```

```

% clear x5
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8);
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x4,8192,(2*pi/dT),...
% kaiser(8100,5),8000);
% fprintf(' ')
% clear x4
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8);
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x3,8192,(2*pi/dT),...
% kaiser(8100,5),8000);
% fprintf(' ')
% clear x3
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8);
%% [gueno,frecuem,tempurs]=specgram(x3,512,(2*pi/dT),... % \
%% kaiser(510,5),500); % >estas 3 junto con ...
%% fprintf(' ') % /
% clear x2%
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8); %
% [gueno8,frecuem,tempurs]=specgram(x1,8192,(2*pi/dT),... %
% kaiser(8100,5),8000); %
% fprintf('.\n') %
% clear x1%
% gueno=gueno+(abs(gueno8)/8); %
% clear gueno8%
%%
%% figure(7); % \
%%save maulatus tempurs frecuem gueno% !
%% surf(tempurs,frecuem,abs(gueno)) % | ... estas 8 son
%% view(2) % | para generar
%% axis([0 1000 0 3]) % | el espectro
%% shading interp % | en función
%% xlabel('Tiempo ') % | del tiempo
%% ylabel('frecuencia (\omega)') % / para 1 partícula.
%end% ESTE end ESTÁ LIGADO CON EL FOR DEL INICIO DE ESTE SCRIPT.

```

## Apéndice B

### Artículo Publicado

- B.1. I. Limas, G.G. Naumis, F. Salazar y C. Wang,  
Physics Letters A, 337 (2005) 141.

Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

SCIENCE @ DIRECT®

Physics Letters A 337 (2005) 141–146

PHYSICS LETTERS A

[www.elsevier.com/locate/pla](http://www.elsevier.com/locate/pla)

## Efficient anharmonic phonon generation using a quasiperiodic lattice

I. Limas<sup>a</sup>, G.G. Naumis<sup>a</sup>, F. Salazar<sup>b</sup>, C. Wang<sup>b,\*</sup><sup>a</sup> Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM, Apartado Postal 20-364, 01000 México D.F., México<sup>b</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, Apartado Postal 70-360, 04510 México D.F., México

Received 4 November 2004; accepted 18 January 2005

Available online 28 January 2005

Communicated by J. Flouquet

### Abstract

The effects of anharmonic interactions on the phonon modes in quasiperiodic systems are studied by looking at the time-evolution Fourier spectrum. The results reveal an efficient generation of high-amplitude harmonics in Fibonacci chains. We also perform an energy-level-spacing analysis of the spectrum. Anharmonic contributions do clearly manifest by changing the level clustering behavior observed in quasiperiodic chains, and contrary to the periodic case, where the distribution is insensitive to weak anharmonic interactions. This result suggests a structural instability of the self-similar vibrational spectrum in quasiperiodic systems.

© 2005 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 61.44.Br; 63.20.Ry; 63.50.+x

The study of non-linear effects in materials has been subject of intense research in the last decade [1]. From the theoretical point of view there are many important questions that are still open, and at the same time many important applications have been found, for example, the generation of optical harmonics using a quasiperiodic superlattice [2]. An interesting question is how non-linearity affects the localization and

the transport properties of a system [3]. For instant, it is known that non-linear interactions are essential to explain the finite thermal conductivity of a material. A common belief is that in periodic systems, where the phonons have extended wave functions, the addition of a non-linear term to the Hamiltonian leads to localization. This type of localization is called intrinsic [1] and is not produced by disorder, as in the linear Anderson Hamiltonian [4]. These localized modes are also known as discrete breathers [5], and have been observed in different physical systems ranging from electronic and magnetic solids, Josephson junctions,

\* Corresponding author.

E-mail address: [chiuim@servidor.unam.mx](mailto:chiuim@servidor.unam.mx) (C. Wang).

optical waveguides arrays and laser-induced photonic crystals [1]. From these considerations, it is natural to expect that when both non-linearity and disorder are present, localization is enhanced. However, the situation is much more complex since several one-dimensional models with correlated disorder exhibit delocalized states [6], which have recently been confirmed using microwave waveguides [7].

Another fascinating question is what happen in quasiperiodic systems, since they are not randomly disordered neither periodic, instead they have a long-range order. A quasiperiodic potential can be described as a Fourier series with more reciprocal basis vectors than the dimensionality of the system [8]. For example, the two-dimensional Penrose lattice can be obtained by projecting a five-dimensional hypercubic lattice into a plane. As a consequence, its reciprocal space is generated by five reciprocal basis vectors [9]. In real systems, quasiperiodicity can occur at an atomic level as in quasicrystalline metallic alloys [10], or can be found in artificial superlattices, for example, by alternating layers of GaAlAs and GaAs following a Fibonacci sequence [11,12]. Recently, it has been found that quasiperiodic multilayers are useful for efficient generation of optical second and third harmonics [2]. This kind of multilayers can be treated theoretically as one-dimensional systems [13]. However, up to our knowledge, the anharmonic effects in quasiperiodic systems have not been studied systematically. For instance, there is an experimental observation of a softening of the eigenmodes in an equivalent electric circuit [14]. In this Letter, we further pursue this problem by looking at the phonon spectrum of a quasiperiodic system with anharmonic interactions.

Let us consider the most simple quasiperiodic system, known as the Fibonacci chain (FC), in which two kinds of atoms,  $A$  and  $B$ , are arranged following the Fibonacci sequence [8], i.e., if one defines the first generation  $F_1 = A$  and the second one  $F_2 = BA$ , the subsequent generations are given by  $F_n = F_{n-1} \oplus F_{n-2}$ . For instance,  $F_3 = BAABABAA$ . In a FC, the spring strength between atoms depends on their nature, giving two different force constants  $\beta_{AA}$  and  $\beta_{AB} = \beta_{BA}$ . Thus, the phonon dynamics of a FC, including a quartic anharmonic term in the phonon Hamiltonian, can be described by

$$m_j \frac{d^2 u_j}{dt^2} = \beta_j (u_{j+1} - u_j) - \beta_{j-1} (u_j - u_{j-1}) + \eta (u_{j+1} - u_j)^3 - \eta (u_j - u_{j-1})^3, \quad (1)$$

where  $m_j$  can either be  $m_A$  or  $m_B$ , and  $u_j$  is the displacement of atom  $j$  at time  $t$ . The anharmonic interaction parameter  $\eta$  is supposed to be smaller than the harmonic interaction  $\beta_j$  and then is taken as a constant. In this Letter, we set the units of mass  $m_A = m$  and for spring constant  $\beta_{AA} = \beta$ . Usually, to obtain the stationary solutions of non-linear equations (1), the well known rotating-wave approximation is used [15]. In a previous article, we used this method in conjunction with the perturbation theory to study the FC. However, this approximation only predicts a shift of the original frequencies [16]. Also, there was no estimation of the accuracy of the solution. To go beyond this approximation, in the present work we use a totally different approach. We solved the equations of motion (1) by using a discrete time  $\Delta t = 0.1/\omega_0$  to optimize the efficiency of the simulation, where  $\omega_0 = \sqrt{\beta/m}$ . At each time we calculated the force, velocity and acceleration of the atoms in the chain, using the leap-frog integration method [17]. Periodic boundary conditions were used for chains of  $N_s = 2584$  sites. As initial conditions, we chose zero velocity for all atoms, i.e.,  $v_j(0) = 0$ , and a delta function at a site in the chain, for example,  $u_j(0) = a\delta_{j,1}$ , where  $a$  is the interatomic separation. This delta function is a superposition of all normal modes and its Fourier transform is just a flat function in the reciprocal space. As a consequence, one is sure from the beginning of exciting all modes with the same weight for periodic systems, avoiding the mode recurrence problem that was found after the pioneering work of Ulam–Fermi–Pasta [18]. Once the chain was excited with this initial condition, the system was allowed to evolve until it reached a number of time steps  $N_t = 2^l$ , where  $l$  is an integer that usually had the value 24, determined by the largest integer that the computer can handle. Then, we took the fast Fourier transform of the whole set of displacements  $u_j(t)$

$$U(\omega) \equiv \sum_{j=1}^{N_s} \left\| \frac{1}{N_t} \sum_{t=0}^{t_{\max}} u_j(t) e^{i\omega t} \right\|, \quad (2)$$

where  $t_{\max} = N_t \Delta t$ .

To test the procedure, we use a periodic chain ( $\beta_{AB} = \beta_{AA} = \beta$  and  $m_A = m_B = m$ ) with only har-

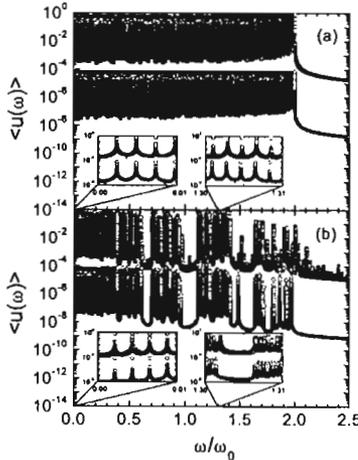


Fig. 1. Fourier spectrum of the displacements with (open squares) and without (open circles) non-linear interaction ( $\eta = 0.2\beta$ ) for (a) a periodic chain, and (b) a Fibonacci chain with  $\beta_{AB} = \beta_{AA}/2$ , both containing 2584 atoms. Insets: amplifications of two regions of each spectrum. In all the figures, the harmonic data have been vertically shifted by a factor of  $10^{-4}$ .

monic interactions, and its spectrum ( $U(\omega)$ ) is shown in Fig. 1(a) as open circles, where the peaks are located exactly at the same frequencies as those obtained from the diagonalization of the dynamic matrix or from the analytical dispersion relation, i.e.,  $\omega(k) = 2\omega_0 \sin(ka/2)$ , being the wave vector  $k = 2\pi n/N_s a$ , with  $n \in \mathbb{Z}$ . Notice that there is a peak at zero frequency that can be deduced by integrating the momentum conservation and using the initial conditions

$$\sum_{j=1}^{N_s} u_j(t) = a. \tag{3}$$

Applying a Fourier transform to the previous equation, we get

$$\sum_{j=1}^{N_s} \tilde{u}_j(\omega) = a\delta(\omega), \tag{4}$$

where

$$\tilde{u}_j(\omega) \equiv \sum_{t=0}^{t_{\max}} u_j(t) e^{i\omega t}, \tag{5}$$

and

$$\delta(\omega) = \sum_{t=0}^{t_{\max}} e^{i\omega t}. \tag{6}$$

The last function becomes a Dirac delta in the limit  $t_{\max} \rightarrow \infty$ . In particular, for  $\omega = 0$ , this function gives  $\delta(0) = N_s$ . Considering the nature of the zero frequency mode, i.e.,  $\tilde{u}_j(0)$  is a positive constant due to the initial conditions, the summation of displacements for the zero frequency mode is

$$U(0) = \frac{1}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} \|\tilde{u}_j(0)\| = a. \tag{7}$$

In general, for the case of harmonic Hamiltonians, the height of each peak in the spectrum can be easily obtained by a decomposition of the solution in normal modes of frequency  $\omega_\alpha$ , which leads to

$$U(\omega) \equiv \sum_{\alpha=1}^{N_s} U(\omega_\alpha) \delta(\omega - \omega_\alpha), \tag{8}$$

where

$$U(\omega_\alpha) \equiv \sum_{j=1}^{N_s} \|A_{j\alpha}\| \tag{9}$$

is the height of the peak with frequency  $\omega_\alpha$  in the spectrum, and the coefficients  $A_{j\alpha}$  are obtained by a projection of the initial conditions onto each normal mode. For the periodic case, our initial conditions conduct to

$$U(\omega_\alpha) = \frac{a}{N_s} \sum_{j=1}^{N_s} |\cos[2\pi\alpha(j-1)/N_s]|. \tag{10}$$

In the limit  $N_s \rightarrow \infty$ , the value of  $U(\omega_\alpha)$  is  $2a/\pi$ , which is in agreement with our numerical results (open circles in Fig. 1(a)), where it is important to remark that in the data from the harmonic systems have been vertically shifted by a factor of  $10^{-4}$  in order to improve the comparison with the non-linear cases.

For non-linear Hamiltonians, we first tested the procedure by using a three-atom chain, where the

analytical results obtained from perturbation theory [18] show a good agreement with the numerical ones. Then, we introduce a small non-linear term ( $\eta = 0.2\beta$ ) to Eq. (1) for a periodic chain of 2584 atoms, and the spectrum remains almost equal (open squares in Fig. 1(a)). A blown-up of the acoustic region shows that the main effect is just a shift of the peaks towards higher frequencies. This shift is more evident at the middle of the spectrum, as shown in the insets of Fig. 1(a). These shifts in frequency can be predicted within the rotating-wave approximation [16]. For the case of an harmonic FC with  $m_B = m$  and  $\beta_{AB} = \beta/2$ , open circles in Fig. 1(b), we got exactly the same eigenfrequencies than those obtained from a diagonalization of the Hamiltonian. The shape of this spectrum is known to be a multifractal set [19], and corresponds to a singular continuous spectra, with critically localized normal modes [20]. This kind of spectrum has gaps almost everywhere since the reciprocal space of a quasicrystal is a dense set. Open squares in Fig. 1(b) show the spectrum of the same FC including a small non-linear term ( $\eta = 0.2\beta$ ). In this case, the effect is dramatic in the sense that not only the original harmonic peaks are shifted, but also new peaks appears inside the gaps of the spectrum. The intensity of these new peaks is in general two orders of magnitude larger than those found in the periodic case. Furthermore, for an anharmonic FC, the spectral limit is extended well beyond the case of a pure harmonic FC. From this analysis, it is clear that the FC is much more efficient for generating high order harmonics. A simple explanation for this phenomena is given by the structure of the reciprocal space of a quasicrystal. Quasiperiodic systems can always be described as a succession of rational approximants, this succession tends to the quasiperiodic system in the limit of an infinite unitary cell [8]. Each approximant has bands, well defined wave vectors ( $k$ ), and a dispersion relation of the type  $\omega_\gamma(k)$ , where  $\gamma$  is the band index. Now, if we look to the quartic anharmonic interaction as a phonon collision, where two phonons with wavevectors  $k_1$  and  $k_2$  annihilates to form two new phonons with wave vectors  $k_3$  and  $k_4$ , then, for each process the energy is conserved,  $\omega_{\gamma_1}(k_1) + \omega_{\gamma_2}(k_2) = \omega_{\gamma_3}(k_3) + \omega_{\gamma_4}(k_4)$ , as well as momentum,  $k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = G_{m,s}$ , where for a FC  $G_{m,s} = 2\pi(\lambda)^{-1}(m + s\tau)$  is a vector in the reciprocal space,  $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ ,  $m, s \in \mathbb{Z}$ , and ( $\lambda$ ) is the average lattice parameter [21]. If the lattice momentum is

$G_{m,s} = 0$ , the process is known as normal. Processes with  $G_{m,s} \neq 0$  are responsible for thermal conductivity and are known as umklapp. In a quasicrystal,  $G_{m,s}$  covers in a dense way the reciprocal space [8], thus almost all processes are umklapp. In fact, there is always a  $G_{m,s}$  as close as needed and then momentum conservation is not a restriction anymore. The only remaining condition is energy conservation. As a result, three of these wave vectors can be chosen without any restriction, making the system much more efficient to generate harmonics.

A useful way to extract information from the spectrum is to do level spacing statistics, since there is a close relationship between the nature of localization and its eigenvalue statistics [22], e.g., for a disordered metal, a Wigner distribution  $P_W(s) \sim s \exp(-\pi s^2/4)$  is observed, while for a disordered insulator it becomes a Poisson's law  $P_P(s) \sim \exp(-s)$ , where  $s = |\omega_{j+1} - \omega_j|/\Delta$  is the frequency difference of consecutive peaks in the spectrum divided by the mean level spacing  $\Delta$ . The essential difference between these two distributions arises from their small  $s$  behavior. Recently, a new kind of level statistics has been found in one-dimensional quasiperiodic systems, that shows a power law behavior, revealing a level clustering mechanism [23]. To do the spectral statistics, in principle one needs to find the phonon eigenvalue spectrum, and then obtain the level spacing statistics through an unfolding process [22]. A very important fact is that the level statistics do not care about the height of each frequency peak in the Fourier spectrum. In order to include this fact, we made cutoffs at different heights in the spectra of Figs. 1(a) and (b), as shown, respectively, in Figs. 2 and 3, where the unnormalized  $P(s)$  are presented to show the number of harmonics created for each level spacing. When the cutoff is high, we only get the most prominent peaks, while for a cutoff at zero all the peaks are considered. Comparing Figs. 2(a) and 3(a), it is observed that the difference between the harmonic (open circles) and anharmonic (open squares) spectra is larger in the FC than in the periodic chain, as obtained in an analysis based on the rotating-wave approximation [16]. Nevertheless, in the present analysis when a non-linear interaction is introduced in the FC,  $P(s)$  grows for small  $s$ , which means a tendency towards level clustering and an efficient creation of new peaks, contrary to the results obtained from the rotating-wave approx-

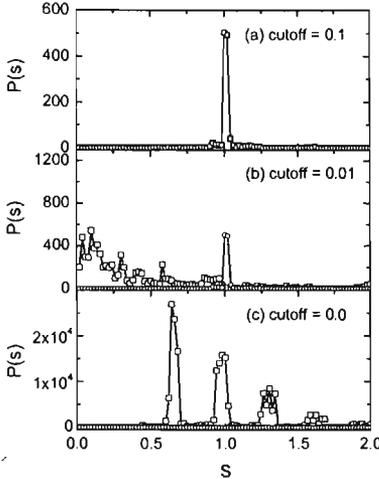


Fig. 2. Level-spacing distribution  $[P(s)]$  with unfolding for the same periodic chain as in Fig. 1, using cutoffs in the displacement spectrum of (a) 0.1, (b) 0.01, and (c) 0.0. The open circles correspond to non-linear interaction  $\eta = 0$  and open squares to  $\eta = 0.2\beta$ .

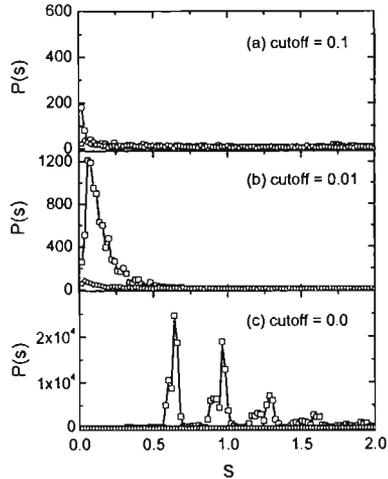


Fig. 3. Level-spacing distribution  $[P(s)]$  with unfolding for the same FC as in Fig. 1, using cutoffs in the displacement spectrum of (a) 0.1, (b) 0.01, and (c) 0.0. The open circles correspond to non-linear interaction  $\eta = 0$  and open squares to  $\eta = 0.2\beta$ .

imation, where the total number of resonance frequencies remains the same since they are only shifted from their original positions. When the cutoff is decreased to 0.01, Figs. 2(b) and 3(b), more anharmonic modes with high amplitude are observed in the FC, which supports the hypothesis of an efficient generation of harmonics. Finally, Figs. 2(c) and 3(c) show a similar  $P(s)$ , where a series of peaks separated by a regular distance are obtained. This happens because the number of peaks is of the same order of magnitude than the grid points of the frequency and then, the peaks are separated by few grids spacings. In our case, the count of peaks is almost  $2.1 \times 10^5$  peaks and the partition of time produces a discretization in  $\omega$  of size  $\Delta\omega = 2\pi/(N_t\Delta t)$ , i.e., there are  $6.6 \times 10^5$  frequency partitions in the interval  $[0, 2.5\omega_0]$ . One would expect that this feature could be removed by increasing  $N_t$ . To test this idea, we have performed a calculation using a  $N_t = 2^{25}$  and surprisingly the results remain essentially unchanged. This fact could be due to the

fractal nature of the attractors in both periodic and quasiperiodic systems when anharmonic interactions are present [18].

In summary, we have studied the anharmonic vibrational modes in quasiperiodic systems beyond the rotating wave approximation. The results show an efficient generation of harmonics with high amplitude in the FC compared with the periodic case. The level spacing statistics reveals that the self-similar vibrational spectrum of the FC is unstable upon anharmonic interactions. This fact could be important in the understanding of the mode softening in quasiperiodic electric circuits [14], and the lack of clear observations of self-similar spectra in real quasicrystals [8].

**Acknowledgements**

We thank J. Talamantes for letting us to use his unfolding computer program. This work has par-

tially been supported by CONACyT-41492F, NSF-CONACyT-2003-C02-41538, DGAPA-IN108502-3 and INI10305. Numerical calculations have been performed at Bakliz of DGSCA-UNAM.

**References**

[1] D.K. Campbell, S. Flach, Y.S. Kivshar, *Phys. Today* 57 (2004) 43.  
 [2] S. Zhu, Y. Zhu, N. Ming, *Science* 278 (1997) 843.  
 [3] D.M. Leitner, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 094201.  
 [4] J.M. Ziman, *Models of Disorder*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1979.  
 [5] G. Kopidakis, S. Aubry, *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000) 3236.  
 [6] F.A.B.F. Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* 68 (2003) 012202.  
 [7] U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. Krokhin, H.J. Stockman, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 633.  
 [8] C. Janot, *Quasicrystals*, second ed., Oxford Univ. Press, London, 1994.  
 [9] G.G. Naumis, J.L. Aragon, *Z. Kristallogr.* 218 (2003) 397.  
 [10] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn, *Phys. Rev. Lett.* 53 (1984) 1951.  
 [11] R. Merlin, K. Bajema, R. Clarke, K.M. Mohanty, J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* 55 (1985) 1768.  
 [12] J. Todd, R. Merlin, R. Clarke, K.M. Mohanty, J.D. Axe, *Phys. Rev. Lett.* 57 (1986) 1157.  
 [13] C. Wang, R. Barrio, *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988) 191.  
 [14] C. Wang, R. Fuentes, O. Navarro, R.A. Barrio, R.G. Barrera, *J. Non-Cryst. Solids* 153 (1993) 586.  
 [15] R.F. Wallis, A. Franchini, V. Bortolani, *Phys. Rev. B* 50 (1994) 9851.  
 [16] F. Salazar, C. Wang, A. Gelover-Santiago, A. Zentella-Dehesa, G.G. Naumis, J. Talamantes, *J. Non-Cryst. Solids* 329 (2003) 167.  
 [17] D.C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1995.  
 [18] M. Toda, *Theory of Non-Linear Lattices*, Springer-Verlag, Berlin, 1988.  
 [19] M. Kohmoto, L.P. Kadanoff, C. Tang, *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 1198.  
 [20] A. Sütö, in: F. Axel, D. Gratias (Eds.), *Beyond Quasicrystals*, Les Editions de Physique, France, 1994, p. 483.  
 [21] G.G. Naumis, C. Wang, M.F. Thorpe, R. Barrio, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 14302.  
 [22] T.A. Braxley, J. Flores, J.B. French, P.A. Mello, A. Pandey, S.S.M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* 53 (1981) 385.  
 [23] T. Geisel, R. Ketznerick, G. Petschel, *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 1651.