



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

EFFECTOS NO LINEALES Y RELAJACIÓN  
EN UN VIDRIO SIMPLE

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

JOSÉ ROBERTO ROMERO ARIAS

DIRECTOR DE TESIS:

DR. GERARDO GARCÍA NAUMIS



MAYO DE 2008



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

DEDICO LA PRESENTE TESIS A:

Mis padres

*Carmen Arias Suárez*

*Alberto Romero Rojas*

Mis hermanos

*Ruben y Rene*

Mi cuñada

*Lidia*

Mis Sobrinos

*Dan Hazael*

*Michelle Dennise*

*Miriam Dayanna*

*“Sin lugar a duda, la esperanza de un hombre se modifica con el espacio y el tiempo, pero su fe se fortalece como un artrópodo en el rincón más insólito”.*

***Dansair***

### **Agradecimientos.**

Quiero agradecer a mis padres por su apoyo incondicional, a mis hermanos por su tolerancia y a mis amigos de la carrera por su gran compañía durante mi formación, ya que sin ayuda ellos apreciar lo hermoso que es la física no hubiera sido posible. También quiero compartir estos agradecimientos con mis amigos de la preparatoria y con el museo de ciencias Universum.

Aprobecharé este espacio para agradecer a cada uno de mis amigos, ya que pocas veces uno tiene la oportunidad de agradecerle a las personas que lo rodean mediante un escrito. A mis grandes amigos: Allié, Alejandro, Atahualpan, Eduardo, Heinrich, Fernando, Francisco, Gerardo, Gustavo, Melissa, Tula, Trejo y Yaxk'in. Gracias por estar siempre ahí.

También quiero expresar las gracias a quienes hicieron la revisión de este trabajo: los Dres. Iván Santamaría Hólek, Denis Boyer, Jorge Fujioka Rojas y la Dra. Patricia Goldstein Menache. Le agradezco al Instituto de Física de la UNAM por brindarme el uso de sus instalaciones y por su apoyo económico de los proyectos DGAPA-UNAM IN-117806 y IN-111906 durante la elaboración de este trabajo. También, le doy las gracias al Dr. Gerardo García Naumis que con su apoyo, tolerancia, enseñanza y confianza me ayudó a iniciarme en una nueva etapa de mi vida.

Por último, le doy gracias a la Facultad de Ciencias y a la UNAM por brindarme y acercarme a lo más valioso del hombre, el conocimiento.

## Resumen

La formación y el entendimiento de sistemas vítreos es un tema muy discutido hoy en día por la comunidad científica, ya que sólo algunas de sus propiedades se han logrado comprender. Una de las propiedades que se entiende poco en estos sistemas es la influencia de los modos vibracionales de baja frecuencia (MVBF) en los procesos de relajación y formación de estos sistemas. Es por ello, que el presente trabajo se tomará como punto de partida el estudio de estos MVBF para entender la relajación de un vidrio usando acoplamiento de osciladores como modelo.

En el desarrollo de este trabajo se presenta una introducción acerca de la formación de sistemas vítreos al igual que los conceptos de la teoría de rigidez y de la paradoja Fermi-Pasta-Ulam (FPU) que nos ayudarán a simular un modelo de vidrio. En los siguientes capítulos estudiaremos sistemas con oscilaciones no-lineales, termalización y relajación de redes. Por último, nos centraremos en el estudio de los MVBF y la localización de la energía para entender la relajación en los sistemas vítreos.

# Índice general

<b>1. Introducción.</b>	<b>1</b>
1.1. Transición Vítrea. . . . .	2
1.2. Teoría de la rigidez. . . . .	5
1.3. Relajación térmica y no-linealidad. . . . .	8
<b>2. Teoría de vibraciones.</b>	<b>11</b>
2.1. Sistema de una partícula. . . . .	11
2.2. Sistema de muchas partículas. . . . .	12
2.2.1. Sistemas no-lineales. . . . .	14
2.2.2. Sistemas con interacción a segundos vecinos. . . . .	15
<b>3. Termalización y relajación de redes.</b>	<b>17</b>
3.1. Termalización. . . . .	17
3.1.1. Un oscilador. . . . .	17
3.1.2. Una red. . . . .	20
3.2. Relajación de redes. . . . .	22
<b>4. Validación del programa.</b>	<b>24</b>
4.1. Sistema de 3 partículas. . . . .	25
<b>5. Resultados del modelo de vidrios.</b>	<b>31</b>
5.1. Modelo de Vidrios. . . . .	31
5.2. Densidad de modos y MVBF. . . . .	32
5.3. Espectro de frecuencias. . . . .	34
5.4. Relajación. . . . .	35
5.5. Localización. . . . .	39
<b>6. Conclusiones.</b>	<b>43</b>
<b>A. Aproximaciones para 3 partículas.</b>	<b>45</b>
<b>B. Código fuente: programa en C++.</b>	<b>47</b>
B.1. Script de lanzamiento del programa. . . . .	47
B.2. Programa. . . . .	50

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	VII
<b>C. Artículo</b>	<b>63</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>72</b>

# Capítulo 1

## Introducción.

Vidrios, vidrios y más vidrios por doquier con propiedades inimaginables y con problemas conceptuales que se remontan a los principios de la física estadística [Elliot 1984], son los elementos de motivación del presente trabajo al igual que la simpleza de modelar un vidrio usando un oscilador. Decía un célebre físico mexicano en clase, “el que entienda los osciladores puede comprender gran parte de la física de hoy”. Pareciera que esta frase no significa nada, pero desde el desarrollo del estado sólido hace ya 100 años, el estudio de la naturaleza a escalas pequeñas y sobre todo su entendimiento se ha llevado mediante el uso de osciladores.

Como ya es costumbre, los fenómenos macroscópicos de los materiales se ven reflejados en las interacciones microscópicas que se llevan a cabo con los componentes atómicos del material. Sin embargo, comprender las interacciones microscópicas de cada material para entender su comportamiento macroscópico no es tan trivial. Un claro ejemplo de esto son los vidrios, ya que por su gran variedad de aplicaciones tecnológicas –fibras ópticas, celdas fotovoltaicas, plásticos, almacenadores de energía, circuitos eléctricos, discos compactos regrabables, etc. [Naumis 2003]– y su poca comprensión en su formación representan uno de los pilares de la investigación de la física del estado sólido.

La característica más importante de los materiales vítreos, comúnmente llamados vidrios, es que son materiales que presentan una estructura rígida amorfa que se obtiene mediante un proceso fuera de equilibrio, llamado transición vítrea. No obstante, la clasificación de estos materiales ha sido debatida por largo tiempo, pues presentan propiedades tanto de materiales líquidos como de sólidos. Debido a esto y al proceso de formación de los vidrios, se dice, que los sistemas vítreos se encuentran en una transición termodinámica [Huerta 2003].

A continuación, veremos el fenómeno de las transiciones vítreas, además de ver los conceptos que nos ayudarán a modelar un vidrio con ayuda de la teoría de rigidez y la paradoja Fermi-Pasta-Ulam.

## 1.1. Transición Vítreas.

Uno de los métodos más socorridos para producir un vidrio es mediante el enfriamiento rápido de un líquido para impedir la cristalización y con ello llegar a un estado donde la energía no queda minimizada, y por tanto producir una fase metaestable, es decir, un material fuera de equilibrio termodinámico. Para alcanzar esta fase, el material tiene que pasar por otro estado denominado líquido sobre-enfriado, y que se obtiene por debajo de la temperatura de fusión del sólido cristalino ( $T_f$ ). No obstante, si la temperatura del líquido sobre-enfriado es lo suficientemente baja, el líquido adopta una apariencia sólida ya que su viscosidad aumenta bruscamente aunque el material no se cristalice. A este proceso se le denomina transición vítrea ya que da como resultado la formación de un sistema vítreo [Huerta 2003]. A manera de ilustrar el fenómeno, la figura 1.1 muestra la dependencia del volumen con forma la temperatura disminuye. Como se puede ver en dicha figura, la transición vítrea no se da a una temperatura dada, sino se representa en un intervalo a diferencia de la temperatura de transición de un cristal [Zallen 1998]. A pesar de que la transición vítrea se da en un intervalo de temperatura, existe un parámetro experimental muy útil que se le denomina temperatura de transición vítrea ( $T_g$ ) y que se obtiene en la intersección de la prolongación de las pendientes antes y después de la transición. Sin embargo, este parámetro no es una propiedad intrínseca del material, ya que depende de la velocidad de enfriamiento.

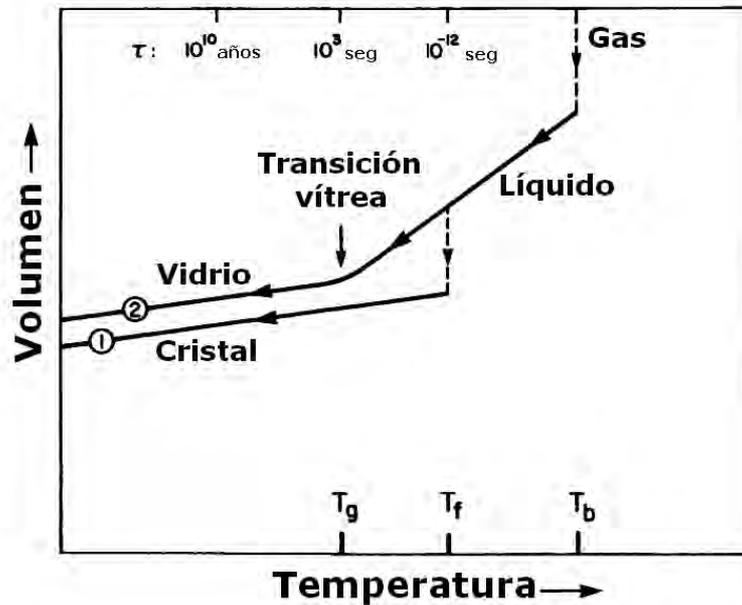


Figura 1.1: Diagrama de transición. Tomado de [Zallen 1998].

Hoy en día hay muchas técnicas que se utilizan para saber la composición y la estructura microscópica de los elementos que conforma un material y con ello su caracterización. Así pues, algunos vidrios son analizados con difracción de rayos X o de neutrones, efecto Raman, ecos ultrasónicos, etc. [Thorpe 1999]. Mediante estas técnicas se ha observado que la estructura de un material vítreo pertenece a un sólido amorfo. Esto quiere decir, que a diferencia de un sólido cristalino los vidrios no se pueden representar por una celda unitaria repetitiva por el espacio, dando como resultado que las propiedades de los vidrios sean más difíciles de estudiar [Elliot 1984, Zallen 1998]. No obstante, la idea de W. H. Zachariasen de modelar los vidrios con una red continua aleatoria ha hecho que se entiendan algunas propiedades de estos sistemas vítreos al igual que las propiedades de algunos materiales amorfos [Huerta 2003].

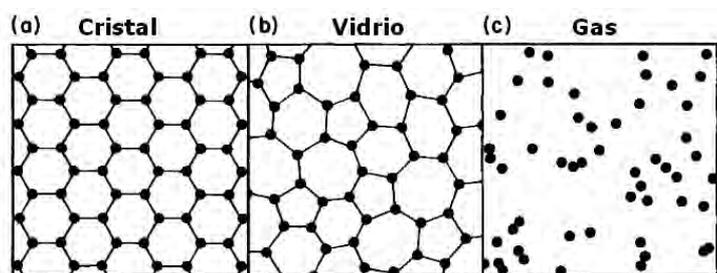


Figura 1.2: *Comparación entre fases. Tomado de [Zallen 1998].*

El desorden estructural que pueden tener los sistemas vítreos (orientacional, sustitucional o topológico) puede ser de gran importancia para el estudio de alguna propiedad particular del material. Más adelante construiremos un modelo de vidrio que siga alguna de las propiedades estructurales mencionadas.

Ahora bien, si observamos la figura 1.1 con detenimiento notaremos que la transición vítrea que hemos descrito anteriormente no se puede ver como una transición de fase termodinámica común, pues la variable extensiva, en este caso el volumen (al igual que otras variables como la entropía y la entalpía), no tienen una discontinuidad al pasar por la temperatura de la transición vítrea. Sin embargo, el hecho de que haya un cambio en la pendiente es suficiente para decir que se trata de una transición de segundo orden en el esquema de Ehrenfest, además de que las cantidades diferenciales como la compresibilidad isotérmica ( $\kappa_T$ ), la expansión térmica ( $\alpha_T$ ) y el calor específico a presión constante ( $C_p$ ) sugieren que la transición sea de segundo orden debido a su discontinuidad en  $T_g$  [Elliot 1984]. Si nos fijamos en la transición de líquido-cristal vemos que la transición es de primer orden, ya que la derivada de la energía de Gibbs respecto a la presión ( $V = (\partial G/\partial p)_T$ ) es discontinua en  $T_f$ . Mientras que para el vidrio de trisulfuro de arsénico tenemos que  $C_p = T(\partial S/\partial T)_p = -T(\partial^2 G/\partial T^2)_p$  es discontinua en  $T_g$ .

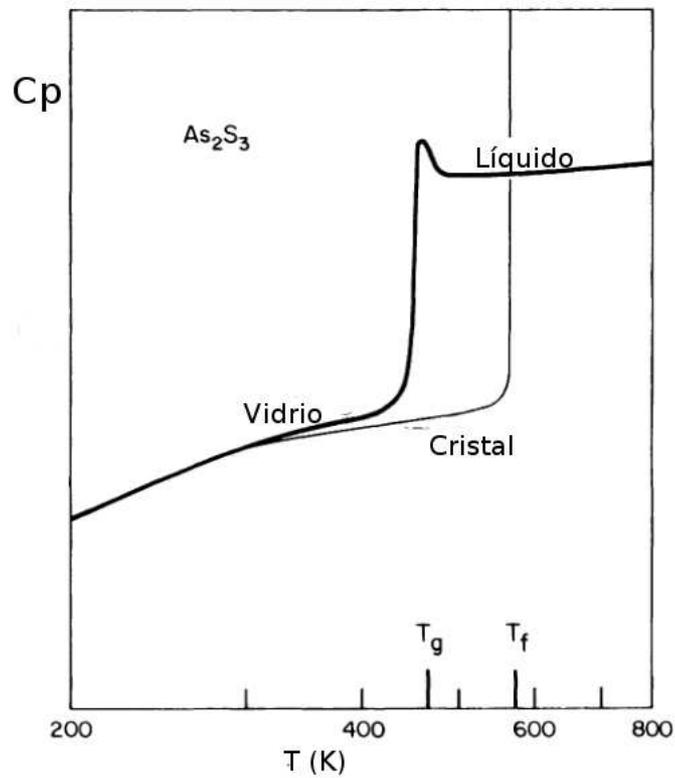


Figura 1.3: Capacidad calorífica a presión constante ( $C_p$ ) para el trisulfuro de arsénico ( $As_2S_3$ ) amorfo. Tomado de [Zallen 1998].

Sin embargo, la temperatura de transición vítrea depende de la velocidad de enfriamiento como hemos mencionado, al igual que de algunos otros factores como la composición química del material y de la habilidad misma del material para transformarse en un vidrio. Esto hace que  $T_g$  se encuentre en un intervalo de decenas de grados cuando se hace variar la velocidad de enfriamiento de un material [Naumis 1998]. Por ello, la interpretación de la transición termodinámica de segundo grado para los sistemas vítreos tenga aún dificultades para entenderse.

## 1.2. Teoría de la rigidez.

Como se menciona en la sección anterior, la temperatura de transición vítrea ( $T_g$ ) es muy importante en la formación de vidrios, pero no es la única que influye en su formación, ya que existen otras anomalías como la contribución de modos de frecuencia cero y de la densidad de modos vibracionales de baja frecuencia (MVBF), que son entendibles con ayuda de la teoría de la rigidez [Phillips 1996, Thorpe 1999]. Por ejemplo en los vidrios de triselenuro de arsénico ( $As_2Se_3$ ), que es uno de los materiales que se ocupan como memorias de computadora, se les puede inducir cambios en su estructura amorfa para transformarla en una estructura cristalina mediante un haz de luz enfocado.

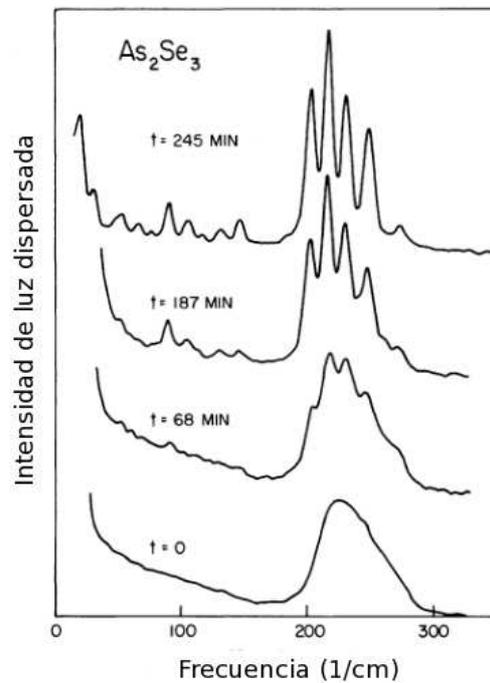


Figura 1.4: Foto-cristalización de  $As_2Se_3$  usando el efecto Raman fino. Tomado de [Zallen 1998].

Este fenómeno se estudió con un barrido fino del efecto Raman y se encontró que la cantidad de luz dispersada para tiempos largos era notable a frecuencias bajas (ver figura 1.4), lo que indicaba problemas en el cambio de fase de la estructura y por tanto una fuerte dependencia de las frecuencias bajas en la for-

mación de sistemas vítreos. Esto debido a que cuando se almacena información en las memorias de computadora el sólido  $As_2Se_3$  es cristalino, pero cuando no hay información o se borra de las memorias el  $As_2Se_3$  se convierte en un sólido amorfo, un vidrio. No obstante, el vidrio  $As_2Se_3$  se utiliza en un rango donde la respuesta del cambio de fase sea reversible para una frecuencia de luz determinanda.

Dado que los MVBF dependen en cierta forma de la composición química del material y esta a su vez hace la  $T_g$  cambie, entonces podemos considerar que hay una función entre los MVBF y  $T_g$  a través de la concentración química [Naumis 2006a, Naumis 2006b]. Por otra parte, la existencia de los MVBF se ve reflejada en los modos flexibles de la red, en especial con la flexibilidad, esto es, entre más flexible sea una red más MVBF habrá en ella. Por tanto, si uno piensa en un sistema al cual le ponemos constricciones, este se empieza a tornar rígido y su cantidad de MVBF decrece. De aquí, que si uno hace un red presente una transición rígida, que consiste en pasar de ser un arreglo flexible a uno rígido, podría entender la formación de un vidrio más fácil [Phillips 1996], debido a que los sistemas rígidos contienen pocos MVBF o modos extendidos que son cruciales en la relajación térmica [Ponno 2005, Reigada 2001a] además de que su cuasiresonancia natural favorece la temperatura de transición [Ford 1961].

Usar la teoría de la rigidez para la descripción de sistemas vítreos es muy útil, pues es la única que permite alterar el número de MVBF cambiando sólo las conexiones que tienen los integrantes de la red. Para entender la forma en que la teoría de la rigidez (TR) explica los fenómenos antes mencionados desarrollaremos los conceptos de esta teoría en las siguientes líneas.

Para empezar, basta decir que la TR se basa en un hecho geométrico simple, ya que consiste en el conteo de barras que unen  $N$  sitios o pivotes de una red. La forma en que estas barras unen los sitios de la red hace que el sistema se vuelva, desde el punto de vista mecánico, rígido o flexible. Esta caracterización de los sistemas se ha vuelto muy importante en los últimos años, ya que usando la TR se ha podido diseñar algunos medicamentos, cristales y algunos vidrios, al igual que entender la física de algunos líquidos y sólidos [Naumis 2005].

Los conceptos de rigidez y flexibilidad son intuitivos, pues todos sabemos que cuando algo es rígido nos cuesta mucho trabajo cambiarlo de forma; en cambio cuando un sistema es flexible podemos cambiar su forma fácilmente sin que el sistema pierda energía. Para tener una visión más clara de cuando un arreglo es rígido o flexible, mostraremos un ejemplo en  $2D$ , como el que se presenta en la figura 1.5. En esta figura tenemos cuatro pivotes que se unen con barras que pueden girar y donde es fácil apreciar que cuando la red cambia de forma, como en el inciso a), el sistema es flexible, pues podemos moverlo sin separar los pivotes, mientras que en inciso c) mover el sistema es difícil sin separar alguna barra de sus pivotes y por tanto decimos que el sistema es rígido. Sin embargo, como la misma figura muestra, un sistema puede tener más o menos rigidez, al igual que tener poca o mucha flexibilidad. Es aquí donde la TR tiene mucha importancia, pues con sólo contar el número mínimo de barras que una red puede

tener para ser rígido podemos caracterizar a un sistema. Cuando tenemos un sistema con el mínimo número de barras que hace que el sistema sea rígido, se dice que el sistema es isoestático. En el caso de la figura 1.5, notamos que cuando se pone una barra más a un arreglo isoestático el sistema se vuelve sobre-rígido (en la TR, a esta característica se le denomina solamente rígido), es decir, ya no tiene un mínimo de barras que hagan que el sistema sea rígido. En su forma más simple, la TR se encarga de caracterizar a las redes en flexibles y rígidas apartir de la isoestaticidad.

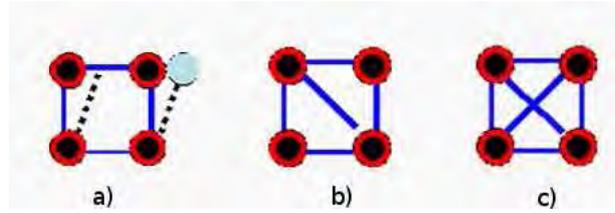


Figura 1.5: *Rigidez y flexibilidad de una red en 2D. La red se presenta como: a) flexible, b) isoestática y c) rígida. Tomado de [Naumis 2005].*

Para evaluar la rigidez y flexibilidad de una red retomaremos el ejemplo en  $2D$ , ya que sin pérdida de generalidad podemos aplicar los resultados obtenidos para redes en otras dimensiones además de ayudarnos a fijar ideas. Primero que nada consideraremos que tenemos  $N$  puntos sin conexión entre ellos. Entonces decimos, que cada punto tiene 2 grados de libertad, pues su movimiento se puede describir con 2 coordenadas en el plano. Por tanto, tenemos que nuestro sistema tiene  $2N$  grados de libertad. Ahora bien, si conectamos dos puntos con una barra rígida, tal cual lo hace la TR, notamos que los grados de libertad del sistema se reducen en uno, i.e., al final tenemos  $2N - 1$  grados de libertad. Por tanto, si conectamos  $2R$  puntos unidos con  $R$  barras tenemos  $2N - R$  grados de libertad en nuestra red. Como es de intuirse,  $R$  representa las restricciones o constricciones de la red además de la pérdida de grados de libertad del sistema, es por ello, que es conveniente definir la fracción ( $f$ ) de grados de libertad (conocido también como el número de modos flexibles) que quedan del sistema respecto a los grados originales mediante:

$$f = \frac{2N - R}{2N}, \quad (1.1)$$

De aquí es fácil notar que la naturaleza de la red se puede medir en términos de  $f$ , pues si  $f > 0$  tenemos una red flexible ya que las restricciones no agotan los grados de libertad, si  $f < 0$  la red es rígida pues hay más restricciones que grados de libertad y si  $f = 0$  la red es isoestática ya que tendremos el mismo número de restricciones que grados de libertad en la red, en otras palabras el sistema tendrá el mínimo de barras que lo hagan ser rígido.

En 1864 James C. Maxwell [Huerta 2003] propuso una conexión entre el número mínimo de barras que una red necesita con el número de modos flexibles

del sistema mediante un nuevo número llamado la coordinación promedio del sistema  $\langle r \rangle$  que se calcula sumando el número total de barras que llegan a un punto dividido entre el número de puntos. Cabe mencionar que el parámetro  $\langle r \rangle$  es de suma importancia ya que no sólo mide la coordinación promedio de la red, sino también la conectividad promedio que tiene la red con cada uno de sus elementos [Thorpe 1999, Naumis 2005]. Para el caso de  $2D$  tenemos que  $\langle r \rangle = 2R/N$  y por tanto el número de modo flexibles queda:

$$f = 1 - \frac{\langle r \rangle}{4}, \quad (1.2)$$

La relación entre la coordinación promedio y los modos flexibles es de gran importancia, por ejemplo en 1979 J. C. Phillips propuso una conexión entre la habilidad de formar un vidrio y la coordinación promedio de un sistema con interacciones covalentes [Phillips 1996]. Esta propuesta dice, que la formación de un vidrio se ve favorecida cuando la cantidad de constricciones mecánicas debidas a los enlaces covalentes es comparable con los grados de libertad que ofrece el sistema, es decir, una transición entre el sistema flexible y el rígido. La propuesta se ha corroborado experimentalmente y es de gran ayuda en el entendimiento de la formación de algunos vidrios [Thorpe 1999].

### 1.3. Relajación térmica y no-linealidad.

Como mencionamos, la relajación térmica de un vidrio no se relaciona únicamente con la velocidad de enfriamiento, ya que las propiedades químicas del material afectan su relajación. Las propiedades químicas del material se pueden ver como constricciones en el sistema y como hemos dicho estas constricciones las podemos modelar usando la teoría de la rigidez. Sin embargo, la TR no nos dice la forma en que las restricciones en el sistema actúan con los componentes de éste. No obstante, podemos proponer diferentes forma en las que las partículas del sistema interactúan. La forma intuitiva es proponer interacciones tipo oscilador que ayuden al sistema a relajarse. Por ello, utilizaremos el problema de Fermi-Pasta-Ulam para modelar nuestro vidrio.

Recien iniciada la existencia de las computadoras muchas soluciones numéricas de problemas físicos fueron dándose a conocer, ya que para muchos problemas físicos que no tenían soluciones analíticas pudieron encontrarse soluciones numéricas. Uno de esos problemas que tiene soluciones numéricas es la paradoja de Fermi-Pasta-Ulam (FPU). Esta paradoja fue planteada en el año de 1953, después de pensar lo que le pasaría a una cadena de osciladores acoplados en presencia de un baño térmico.

Como es sabido, cuando un sistema se pone en contacto con un baño térmico, el sistema empieza a ceder o a ganar calor de dicho baño hasta alcanzar una temperatura de equilibrio. Este equilibrio desde el punto de vista de la mecánica estadística de Boltzmann se lleva acabo cuando cada componente del sistema está en equilibrio con su alrededor. Por otra parte, esta teoría también predice

que cada grado de libertad del sistema contribuye con  $k_B T/2$  en la energía del sistema (donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  es la temperatura) y por tanto en el equilibrio cada grado de libertad de un sistema tiene la misma cantidad de energía.

El punto importante en la paradoja FPU radica en la forma en la que el sistema alcanza una temperatura de equilibrio cuando se retira el baño térmico del sistema y se coloca en otro baño a temperatura menor. Para este entonces, FPU sabían que para una cadena de puros osciladores siempre es posible desacoplar el hamiltoniano armónico en términos de los modos normales y con ello ver la evolución del sistema. Sin embargo, esta forma de visualizar el problema mostraba que nunca se alcanzaría la relajación térmica, pues como es sabido cada modo normal es independiente de otro y nunca hay transferencia de energía entre ellos, en otras palabras un hamiltoniano armónico que describe la cadena de osciladores nunca alcanzaría el equilibrio, a menos de que hubiera terminos disipativos en el hamiltoniano. El siguiente paso fue plantear interacciones no-armónicas entre los osciladores para que con ello los modos normales del sistema pudieran interactuar y con ello transferir energía sin ayuda de términos disipativos y así alcanzar un nuevo estado de equilibrio [Fermi 1965]. Cuando FPU simularon este sistema se dieron cuenta que no sólo se podía alcanzar un estado de equilibrio, sino que para alcanzarlo el sistema sufre un fenómeno denominado recurrencia, donde después de un tiempo dado un modo normal tiene la misma energía que al principio.

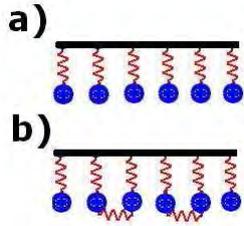


Figura 1.6: Paradoja FPU vista en modos normales con: a) interacción lineal y b) interacción no-lineal.

Otra forma de visualizar esta paradoja es pensando que cuando el sistema tiene un hamiltoniano lineal los modos normales tienen la energía localizada (que se manifiesta como una onda plana), es decir, oscilan siempre con su misma frecuencia normal, pero apenas hay interacciones no-lineales y los modos normales dejan de tener energía localizada y empiezan a transferir energía entre ellos mediante efectos de interferencia a través de las ondas planas, que son solución de los modos normales.

El efecto de la no-linealidad en el hamiltoniano no sólo trae consecuencias para que un sistema alcance un nuevo estado de equilibrio, ya que mientras el sistema tiende hacia este nuevo estado ocurren fenómenos como la recurrencia, con el problema de FPU, o fenómenos de localización de energía que se

manifiestan al dejar grandes cantidades de energía en un lugar específico del sistema, o mejor dicho, cantidades de energía distribuida en ciertos modos normales. Este último fenómeno da lugar a la creación de unos nuevos modos en el sistema y que se llaman de respiración por su nombre en inglés (discrete breathers) [Campbell 2004, Piazza 2001, Reigada 2001a, Reigada 2001b]. Los modos de respiración se forman cuando la energía se localiza en ciertos modos normales y posteriormente se desplaza a otros modos normales sin perder energía. En otras palabras, los modos de respiración son movimientos del sistema donde cierta energía se localiza y se mueve sin ninguna pérdida, algo así como un solitón. Como es de esperarse, este hecho trae consecuencias importantes para que un sistema llegue a un nuevo estado de equilibrio, pues si el sistema contiene muchos de estos modos de respiración el sistema tardará mucho tiempo en alcanzar su nuevo estado de equilibrio.

En los capítulos siguientes, desarrollaremos un sistema vítreo usando la TR y la paradoja FPU para ver la importancia de los MVBF en el proceso de la relajación térmica. Para llevar a cabo la construcción de nuestro modelo de vidrio, en el capítulo 2 presentaremos la forma en la que interactúan varias masas inmersas en diferentes potenciales. Posteriormente, veremos la forma adecuada de termalizar y relajar una red en el capítulo 3. Al finalizar, pondremos a prueba nuestro modelo vítreo para un sistema de 3 partículas. En el capítulo 5 discutiremos la importancia de los MVBF en: la densidad de modos, en el espectro de frecuencias y por supuesto veremos su importancia en la relajación térmica. Por último presentaremos las conclusiones en el capítulo 6.

## Capítulo 2

# Teoría de vibraciones.

### 2.1. Sistema de una partícula.

Cuando sacamos un cuerpo de su equilibrio, éste trata de regresar al punto donde estaba para conservarse en su estado de mínima de energía. Pensando que el cuerpo tiene asociada una energía potencial  $U(q)$  debido a la posición que ocupa y ésta es mínima cuando se encuentra en su posición de equilibrio ( $q_0$ ). Entonces, cuando se mueve el cuerpo de su posición de mínima energía se genera una fuerza dada por  $-\frac{dU(q)}{dq}$  que hace que el cuerpo regrese a su posición de equilibrio. Dicha fuerza hace que el sistema oscile al rededor de su mínimo de energía  $q_0$ .

Si nos fijamos en pequeñas variaciones de  $U(q) - U(q_0)$  en potencias de  $q - q_0$  notamos que:

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

Tomando adecuadamente el nivel referente de energía podemos hacer  $U(q_0) = 0$  y dado que en este punto tenemos energía mínima, el término lineal evaluado en  $q_0$  se hace cero, y por tanto:

$$U(q) \cong \frac{1}{2}k(q - q_0)^2, \quad (2.2)$$

donde  $k$  es una constante positiva que sale al evaluar la segunda derivada del potencial en  $q_0$ .

Midiendo la energía a partir del punto de equilibrio, es decir, tomando  $x = q - q_0$  tenemos [Landau 2002]:

$$U(x) \cong \frac{1}{2}kx^2, \quad (2.3)$$

Usando este hecho, notamos que cualquier partícula de masa  $m$  que se saque de su posición de equilibrio sigue la siguiente ecuación de movimiento [Fowles 1970]:

$$m\ddot{x} + kx = 0, \quad (2.4)$$

cuya solución es del tipo oscilatoria de la forma  $x = Ae^{i\omega t}$ , donde  $i^2 = -1$ , la frecuencia  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  y  $A$  es una amplitud compleja que hace que en los puntos de retorno el oscilador tenga solo energía potencial debido a que la cantidad de movimiento es cero. Dando como resultado [Landau 2002] :

$$U(x) \cong -\frac{1}{2}kA^2, \quad (2.5)$$

Este resultado puede aplicarse a un conjunto de partículas y así entender algunas propiedades como la estabilidad mecánica o eléctrica. En las siguientes secciones estudiaremos un sistema con interacciones para muchas partículas.

## 2.2. Sistema de muchas partículas.

Siguiendo un procedimiento análogo al hecho para una partícula, tenemos que si contamos con  $N$  partículas en una dimensión interactuando entre si mediante oscilaciones alrededor de su punto de equilibrio la energía es:

$$U(x) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2}k_j (x_{j+1} - x_j)^2, \quad (2.6)$$

donde  $k_j$  es la constante asociada a la partícula  $j$ 'ésima.

De aquí que la ecuación de movimiento para la partícula  $j$  es:

$$m_j\ddot{x}_j + k_j(x_{j+1} - x_j) + k_{j-1}(x_j - x_{j-1}) = 0, \quad (2.7)$$

Como la solución para cada partícula debe de ser del tipo oscilador, proponemos una solución de la forma:

$$x_j = A_j e^{-i\omega t}, \quad (2.8)$$

Sustituyendo esta solución en la ecuación 2.7, vemos que el sistema se reduce a un problema de álgebra lineal, pues la ecuación de movimiento para la partícula  $j$  queda:

$$-\omega^2 A_j - \frac{k_j}{m_j} A_{j+1} + \left( \frac{k_j + k_{j-1}}{m_j} \right) A_j - \frac{k_{j-1}}{m_j} A_{j-1} = 0, \quad (2.9)$$

y por tanto, si agrupamos las amplitudes  $A_j$  en una matriz  $A$  y a las constantes en una matriz  $D$  con condiciones libres en la frontera, *i.e.*  $x_0 = x_1$  y  $x_{N+1} = x_N$  tenemos una ecuación matricial de eigenvalores [Goldstein 1972] :

$$(D - \omega^2 I) \cdot A = 0$$

donde  $I$  es la matriz identidad y:

$$D = \begin{pmatrix} \frac{k_1}{m_1} & -\frac{k_1}{m_1} & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{k_1}{m_2} & \frac{k_1+k_2}{m_2} & -\frac{k_1}{m_2} & \dots & 0 \\ 0 & & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \frac{k_{N-1}}{m_{N-1}} \\ 0 & \dots & 0 & \frac{k_{N-1}}{m_N} & \frac{k_{N-1}+k_N}{m_N} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

A la matriz  $D$  se le llama también matriz dinámica. Cabe mencionar que la matriz  $A$  contiene en sus columnas los eigenvectores del sistema.

Proponiendo que todas las masas sean iguales y tengan el valor  $m = 1$  al igual que las constantes  $k_j = k$  para toda  $j$ , podemos proponer una solución para las amplitudes del tipo [Kittel 1996]:

$$A_j = \frac{e^{iqja}}{\sqrt{N}}, \quad (2.11)$$

donde  $q$  es el vector de onda,  $a$  es el tamaño de la celda unitaria y que en este caso tomaremos  $a = 1$ . Este tipo de solución, hace que nuestro sistema tenga comportamiento ondulatorio y por tanto cada eigenvector o modo normal esté dado por:

$$X_q(j, t) = \frac{e^{i(qj - \omega t)}}{\sqrt{N}}, \quad (2.12)$$

Colocando esta solución en las ecuaciones de movimiento y resolviendo la ecuación matricial de eigenvalores nos da como resultado una relación muy importante entre la frecuencia y el vector de onda. Esta relación se le conoce como relación de dispersión y está dada por:

$$\omega^2(q) = 4k \sin^2\left(\frac{q}{2}\right), \quad (2.13)$$

donde  $q = \frac{2\pi\alpha}{N}$  con  $\alpha = 1, \dots, N$ .

### 2.2.1. Sistemas no-lineales.

En esta sección tomaremos en cuenta sólo efectos de orden dos y cuártico en la energía potencial, ya que el término cúbico representa grandes problemáticas al poner una posición de equilibrio [Limas 2005, Campbell 2004], pues la solución de nuestro sistema de ecuaciones puede diverger debido a las fuerzas resultantes de este potencial podrían ser muy grandes comparadas con el movimiento del sistema. Si visualizamos ahora a nuestro sistema a partir de su hamiltoniano [Fowles 1970, Goldstein 1972], vemos que éste es de la forma:

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{P_j^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x_j - x_{j-1})^2 + \frac{1}{4}k'(x_j - x_{j-1})^4, \quad (2.14)$$

donde  $k$  y  $k'$  son los coeficientes lineal y no-lineal respectivamente.

A este hamiltoniano también se le conoce como el hamiltoniano FPU (Fermi-Pasta-Ulam). Cabe mencionar que a partir de aquí consideraremos que las coeficientes de interacción serán iguales para todas las partículas al igual que su masa. La ecuación de movimiento que rige a la partícula  $j$  tiene entonces la forma:

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_j &= k[(x_{j+1} - x_j) - (x_j - x_{j-1})] \\ &+ k'[(x_{j+1} - x_j)^3 - (x_j - x_{j-1})^3], \end{aligned} \quad (2.15)$$

La resolución de este tipo de ecuaciones de forma analítica ya no es tan trivial, pues si proponemos una solución del tipo 2.8 los términos cúbicos hacen difícil el manejo de las exponenciales y al final quedan ecuaciones trascendentales. En muchos artículos [Campbell 2004, Toda 1988] se ha discutido el estudio de estos sistemas y hasta ahora sólo se han presentado resultados numéricos y soluciones analíticas usando ciertas consideraciones. Siguiendo este hecho, nosotros consideraremos que la interacción no-lineal es pequeña y propondremos una solución del tipo armónica de la siguiente forma:

$$x_j = A_j \cos(\omega t) + B_j \cos(3\omega t), \quad (2.16)$$

En seguida usaremos la aproximación de rotación de onda (RWA, por sus siglas en inglés), que consiste en despreciar términos en frecuencias mayores a  $3\omega$  [Limas 2005], en este caso, no contar con los términos mayores a  $\cos(3\omega t)$ . Para ver los efectos de los términos mayores a  $3\omega$  usaremos la identidad trigonométrica:

$$\cos^3(\theta) = \frac{3}{4}\cos(\theta) + \frac{1}{4}\cos(3\theta), \quad (2.17)$$

Por tanto, la ecuación de movimiento para la partícula  $j$  se ve como:

$$\begin{aligned}
-m\omega^2 [A_j \cos(\omega t) + 9B_j \cos(3\omega t)] &= k [A_{j+1} \cos(\omega t) + A_{j-1} \cos(\omega t) - \\
& 2A_j \cos(\omega t)] + k [B_{j+1} \cos(3\omega t) + \\
& B_{j-1} \cos(3\omega t) - 2B_j \cos(3\omega t)] + \\
& \frac{3}{4}k' [A_{j+1}^3 \cos(\omega t) - A_{j-1}^3 \cos(\omega t)] + \\
& k' [B_{j+1} + \dots],
\end{aligned} \tag{2.18}$$

de aquí que si agrupamos los términos con frecuencia fundamental  $\cos(\omega t)$  tenemos que las amplitudes siguen:

$$(2k - m\omega^2) A_j - k (A_{j+1} + A_{j-1}) - \frac{3}{4}k' (A_{j+1}^3 - A_{j-1}^3) = 0 \tag{2.19}$$

lo cual nos da una idea acerca del corrimiento de la frecuencia fundamental en términos de las amplitudes  $A_j$ 's, debido al término  $\frac{3}{4}k' (A_{j+1}^3 - A_{j-1}^3)$ , ya que en el caso  $k' = 0$  obtenemos la relación de dispersión 2.13. Para ver el efecto de corrimiento más adelante en el capítulo 4 analizaremos el caso de 3 partículas sujetas a resortes.

### 2.2.2. Sistemas con interacción a segundos vecinos.

Una forma sencilla de relacionar la teoría de la rigidez un modelo vítreo es aumentando la cantidad de interacciones que presenta una cadena ya que con ello la cantidad de constricciones en el sistema aumenta, los grados de libertad del sistema disminuyen y por tanto hay modificación en los MVBF. La forma de añadir constricciones a una cadena que presenta interacciones a primeros vecinos (PV), es hacer que esta cadena tenga también interacciones a segundos vecinos (SV). A continuación, desarrollaremos el hamiltoniano con interacciones lineales y no-lineales a PV y SV.

Como se puede ver en la sección anterior, el hamiltoniano de la ecuación 2.14 muestra que la interacción entre una partícula y las otras sea de manera tal que su posición sólo depende de ella y sus primeros vecinos, de aquí que si extendemos este hamiltoniano para que la partícula  $j$  tenga interacciones con sus SV, veremos que el hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{P_j^2}{2m} + \frac{1}{2}k (x_j - x_{j-1})^2 + \frac{1}{2}k_2 (x_j - x_{j-2})^2, \tag{2.20}$$

donde el coeficiente  $k_2$  representa la interacción SV y además es mayor que cero.

La ecuación de movimiento para la partícula  $j$  generada apartir del hamiltoniano es:

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_j &= k[(x_{j+1} - x_j) - (x_j - x_{j-1})] \\ &+ k_2[(x_{j+2} - x_j) - (x_j - x_{j-2})], \end{aligned} \quad (2.21)$$

de aquí que si planteamos una solución como la ecuacion 2.8 y hacemos un desarrollo similar al planteado al inicio de este capítulo, llegamos a la relación de dispersión:

$$\omega^2(q) = 2(k + k_2 - k\cos(q) - k_2\cos(2q)), \quad (2.22)$$

donde  $q = \frac{2\pi\alpha}{N}$  con  $\alpha = 1, \dots, N$  y  $m = 1$ .

Como dato curioso, notamos que la ecuación 2.22 recupera la relación de dispersión de una cadena con interacciones a PV si el coeficiente  $k_2 = 0$ .

Como vimos en la introducción, tener un hamiltoniano que presente sólo interacciones lineales con sus componentes no nos ayudaría para llevar el sistema a varios puntos de equilibrio. Por tanto haremos que el hamiltoniano de la ecuación 2.20 tenga interacciones no-lineales a PV y SV, que es lo mismo, que el hamiltoniano sea como el del modelo de FPU extentendido para los segundo vecinos (PV). Esto es: y la parte del potencial de PV del modelo FPU aplicada a la interacción de SV. Por tanto el Hamiltoniano es:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{j=1}^N \frac{P_j}{2m} + \frac{1}{2}k(x_j - x_{j-1})^2 + \\ &\frac{1}{4}k'(x_j - x_{j-1})^4 + \frac{1}{2}k_2(x_j - x_{j-2})^2 +, \\ &\frac{1}{4}k'_2(x_j - x_{j-2})^4, \end{aligned} \quad (2.23)$$

donde  $k'$  y  $k'_2$  representan la parte no-lineal para primeros y segundos vecinos respectivamente. Cabe meniconar que ambas constantes son positivas.

La forma de este hamiltoniano será la base del modelo vítreo que plantearemos en el capítulo 5. Como es de intuirse, la resolución analítica de las ecuaciones de movimiento para un sistema de este tipo es complicada. Sin embargo en el capítulo 4, veremos un caso particular de interacción con segundos vecinos de un arreglo de 3 partículas para la validación de nuestra programa de simulación y presentaremos las aproximaciones realizadas en el apéndice A.

## Capítulo 3

# Termalización y relajación de redes.

En este capítulo se explica la forma en como termalizar una red lineal, además de los criterios que se usan para hacer una buena termalización. El proceso de relajación de una red termalizada será también un tema a tratar, pues su forma de disipar la energía nos ayuda a entender sus propiedades físicas.

### 3.1. Termalización.

#### 3.1.1. Un oscilador.

Antes de describir el comportamiento de una red termalizada, es útil describir lo que ocurre con la termalización de un oscilador inmerso en un baño térmico, ya que con sólo cambiar algunas cosas en las ecuaciones podremos comprender la dinámica de una red. Para empezar, consideraremos la ecuación de un oscilador de masa unitaria con término disipativo ( $\gamma$ ) y sujeto a la fuerza provocada por el baño térmico ( $\eta(t)$ ).

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = \eta(t), \quad (3.1)$$

Como es sabido, la resolución de la ecuación 3.1 requiere de una solución homogénea y de una solución particular para la fuerza térmica. La solución de la ecuación homogénea es fácil de obtenerla si se propone una solución exponencial del tipo  $e^{rt}$  para  $x(t)$ , ya que después de poner dicha solución en la ecuación diferencial se obtienen dos raíces para  $r$ :

$$r_{1,2} = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 - \omega_0^2}, \quad (3.2)$$

Para obtener la solución particular hay que tomar en cuenta, que la fuerza debido al baño térmico no puede ser una fuerza constante, sino una fuerza

fluctuante o estocástica tal cual lo predice la mecánica estadística. Es por ello, que dicha fuerza debe seguir cierta dinámica y tener ciertas restricciones. Esta fuerza fue estudiada por Langevin [Chaikin 1995] usando los criterios de la mecánica estadística de Boltzmann, que propone que cada grado de libertad de un sistema contribuye con  $k_B T/2$  en la energía del sistema (donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann), y la mecánica Browniana. De esta forma, Langevin encontró, que la fuerza térmica ( $\eta$ ) debe seguir una función gaussiana no-correlacionada y además, su promedio temporal debe estar relacionado mediante el teorema de fluctuación-disipación. En ecuaciones, esto se traduce en:

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad (3.3)$$

$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta(t - t'), \quad (3.4)$$

Contemplando los puntos anteriores, podemos proceder a encontrar la solución para la posición  $x(t)$  mediante el uso de transformación de Fourier de la siguiente forma:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{x}(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad (3.5)$$

donde

$$\tilde{x}(\omega) = \frac{\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\gamma\omega)^2} \Lambda(\omega), \quad (3.6)$$

y

$$\Lambda(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \eta(t) e^{-i\omega t} dt, \quad (3.7)$$

Cabe mencionar que la ecuación 3.6 puede reescribirse como:

$$\tilde{x}(\omega) = \chi(\omega) \Lambda(\omega), \quad (3.8)$$

y donde la función  $\chi(\omega)$  puede interpretarse como la susceptibilidad ante cambios en la fuerza térmica. De manera esquemática es susceptibilidad puede graficarse para su parte real y su parte imaginaria como lo muestra la figura 3.1.

Desde el punto de vista analítico, la solución 3.5 no es trivial encontrarla para sistemas de muchas partículas, pero siempre se puede seguir la misma idea que para una sola partícula ya que el sistema de muchas partículas se puede descomponer términos de sus modos normales. Así que lo que comúnmente se hace es encontrar la relación espectral de la posición, es decir, ver el espectro de frecuencias en las que el movimiento oscilatorio opera. Dicho esto, el siguiente punto

es encontrar el espectro de frecuencias de un oscilador. Para esto, consideramos que el espectro de frecuencias se calcula como [Reichl 1998, Reigada 2001a]:

$$S(\omega) = 2 \int_0^{\infty} C(\tau) \cos(\omega\tau) d\tau, \quad (3.9)$$

donde  $C(\tau) = \langle x(t)x(t+\tau) \rangle$  es la correlación de la posición para un cierto tiempo  $\tau$ , que además mide la memoria que tiene el sistema.

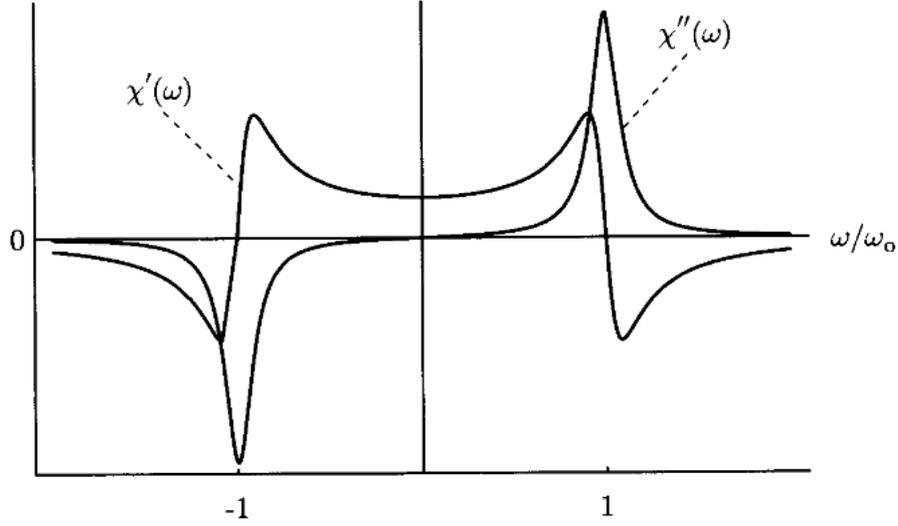


Figura 3.1: *Susceptibilidad para un oscilador armónico.  $\chi'(\omega)$  y  $\chi''(\omega)$  representan la parte real e imaginaria de la función  $\chi(\omega)$  respectivamente. Tomado de [Chaikin 1995].*

Después de introducir los valores de la posición en la correlación y usar las condiciones de la fuerza térmica, se obtiene:

$$C(\tau) = 2\gamma k_B T \delta(\tau) |\chi(\omega)|^2, \quad (3.10)$$

y por tanto, el espectro de frecuencias es:

$$S(\omega) = 2\gamma k_B T |\chi(\omega)|^2, \quad (3.11)$$

Como dato extra, podemos ver que poniendo la función  $\chi(\omega)$  en su parte real e imaginaria, la parte disipativa corresponde a la parte imaginaria de dicha función, y por tanto podemos escribir,

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{2k_B T} \omega S(\omega), \quad (3.12)$$

que nos da la versión clásica del teorema de fluctuación-disipación [Chaikin 1995].

Para entender que sucederá más adelante con la cadena termalizada, es útil reescribir el espectro de frecuencias en términos de las soluciones de la ecuación homogénea. Pues como mencionamos, las ideas planteadas para el espectro de frecuencias de una sola partícula se pueden ampliar a un sistema de muchas partículas debido a que estos sistemas se pueden desacoplar en términos de sus modos normales y con ello obtener soluciones parecidas a las de una sola partícula en el espectro de frecuencias para cada modo normal. Es por ello que poner el espectro de una sola partícula en términos de su modo normal o solución homogénea será de gran ayuda en la siguiente sección. Dicho esto, el espectro puede escribirse como:

$$S(\omega) = \frac{2\gamma k_B T}{[r_1^2 + \omega^2][r_2^2 + \omega^2]}, \quad (3.13)$$

### 3.1.2. Una red.

La dinámica que sigue una red unidimensional de osciladores armónicos acoplados se basa en el hecho de pegar o unir la solución de un oscilador con su vecino próximo. En otras palabras, basta conocer como es la solución de un oscilador con sus dos vecinos próximos para poder entender lo que pasa con toda la red, pues lo que le pasa a ese oscilador le ocurrirá a uno que este muy lejos de él. Es por ello que hacer uso de los resultados de la sección anterior nos ayudará a comprender lo que le sucede a cada uno de los componentes de nuestra cadena.

Si tomamos nuestra cadena con  $N$  elementos, notaremos que la ecuación de movimiento que rige a la partícula  $j$ 'ésima es similar a la ecuación 3.1 si identificamos a  $\omega_0^2$  con  $\frac{\partial H}{\partial x}$ . El hecho de que sea similar, es que para un solo oscilador no se contemplan los desplazamientos de un oscilador respecto a otro y por tanto hablar de la posición  $x(t)$  y de los desplazamientos relativos  $u(t)$  es lo mismo. En el caso de la cadena, la partícula  $j$  se comporta así:

$$\ddot{u}_j = -\frac{\partial H}{\partial u_j} - \gamma \dot{u}_j + \eta_j(t), \quad (3.14)$$

donde la función  $\eta_j(t)$  sigue la dinámica de Langevin para cada partícula, es decir, cumple las ecuaciones 3.3 y 3.4.

Si consideramos un Hamiltoniano con interacción lineal, como el de la sección 2.2 podemos ver que al proponer una solución del tipo  $e^{rt}$  para la ecuación diferencial homogénea de 3.14 obtenemos una solución igual a la de la ecuación 3.2, sólo que esta vez, la frecuencia  $\omega_0$  se comporta como la relación de dispersión obtenida en 2.2, es decir:

$$\omega_0^2(q) = 4k \operatorname{sen}^2\left(\frac{q}{2}\right), \quad (3.15)$$

donde  $q = \frac{2\pi\alpha}{N}$  con  $\alpha = 1, \dots, N$  y por tanto las raíces son:

$$r_{1,2}(q) = -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 - \omega_0^2(q)}, \quad (3.16)$$

El que las soluciones de la ecuación homogénea dependan del vector de onda  $q$  tiene gran importancia en el análisis espectral, pues ahora en lugar de tener una sola frecuencia tendremos  $N$  frecuencias normales y además una frecuencia de corte. El espectro de frecuencias para la cadena tiene la forma:

$$S(\omega) = 2\gamma k_B T \sum_{q=0}^{N-1} \frac{1}{[r_1^2(q) + \omega^2][r_2^2(q) + \omega^2]}, \quad (3.17)$$

Cabe mencionar, que esta fórmula se parece mucho a el espectro de frecuencias de un oscilador, pero ahora hay que sumar sobre cada frecuencia normal. De hecho, como se ve en las formulas lo único que cambia es la relación de dispersión  $\omega_0$ , por tanto, si consideramos interacción a segundos vecinos notaremos que la forma analítica del espectro de frecuencias será el mismo que el de la ecuación 3.17 pero con la  $\omega_0$  de la ecuación 2.22. No obstante, la cantidad de MVBF altera  $S(\omega)$ , pues en la interacción a SV el factor  $k_2 - k_2 \cos(2q_\alpha)$  de la relación de dispersión hace que los modos vibracionales se muevan a frecuencias altas como lo muestra la siguiente figura.

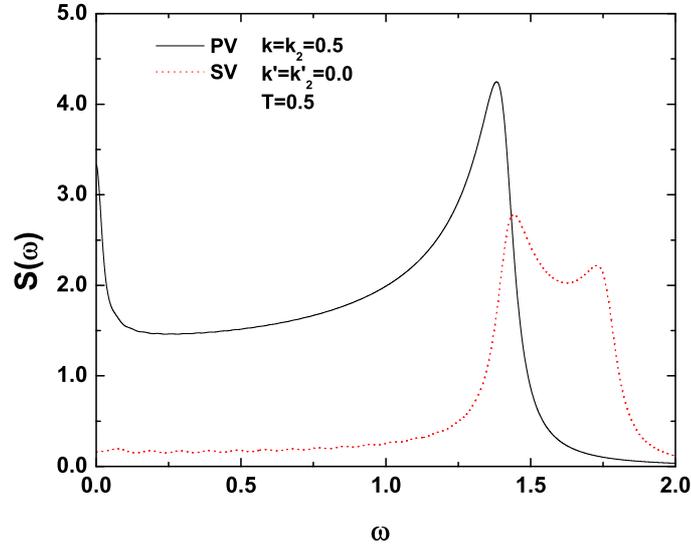


Figura 3.2: *Espectro de frecuencias para una cadena con  $N = 100$  con interacciones a primeros (PV) y segundos vecinos (SV).*

### 3.2. Relajación de redes.

El proceso de relajación está íntimamente relacionado con la termalización de redes y en especial con el teorema de fluctuación-disipación si pensamos que el sistema transita entre estados de equilibrio. Para el sistema pase de un estado de equilibrio a otro debe perder energía, y la forma en que lo haga dependerá de sus términos disipativos. De aquí, que los términos disipativos tengan un gran papel en los procesos de relajación, pues son los que se encargan de llevar al sistema a varios estados de equilibrio.

Una forma sencilla de hacer que un sistema previamente termalizado alcance su equilibrio a una temperatura inferior a la de termalización, es colocando sus extremos a un baño térmico que tenga esa temperatura. En el caso de un sistema unidimensional es fácil notar que sólo basta poner los extremos de un sistema unidimensional en un baño térmico a esa temperatura (más adelante consideraremos que esta temperatura es igual a cero). De esta forma, el resto de la cadena perderá energía por la única vía que tiene. Así que, si pensamos en el teorema de fluctuación-disipación, veremos que los términos disipativos más importantes serán los que se encuentran en los extremos del sistema. Por tanto, podemos considerar que todos los términos disipativos del sistema están en los extremos y con ello facilitar el tratamiento de las ecuaciones de movimiento. Usando las ideas anteriores

podremos expresar la ecuación de movimiento de la partícula  $j$  como:

$$\ddot{u}_j = -\frac{\partial H}{\partial u_j} - \sum_{j=1}^N \Gamma_j \dot{u}_j, \quad (3.18)$$

donde

$$\Gamma_j = \gamma [\delta_{j,1} + \delta_{j,N}], \quad (3.19)$$

Cabe mencionar que además de este efecto, las condiciones a la frontera son de mucha importancia, es por ello, que durante este trabajo siempre se consideraremos que las condiciones a la frontera serán cerradas, es decir, que  $u_0 = u_{N+1} = 0$ .

## Capítulo 4

# Validación del programa.

En el transcurso de este capítulo pondremos a prueba el código de nuestra simulación y daremos los datos importantes que se utilizaron durante la programación. En principio, el código fuente se encuentra en el apéndice B donde se puede consultar. Cabe mencionar que la simulación fue elaborada en lenguaje de programación C++.

El método que se utilizó para la solución de las ecuaciones diferenciales 3.14 y 3.18 fue el Runge-Kutta de 4º orden, además de utilizar un generador de números aleatorios propuesto por [N. Recipes 2002] y considerar que el término disipativo de la ecuaciones cumpliera con  $\gamma < 8\pi^2 k/N^2$  para exigir que las soluciones de las raíces de 3.16 fueran imaginarias para la separación más grande entre las eigenfrecuencias y con ello evitar el sobreamortiguamiento, es decir, que la relajación fuera lo más libre posible. Un punto más en la programación, fue la distribución de la energía inicial en el sistema, pues hicimos que cada modo normal tuviera una energía  $k_B T/2$  tal cual lo menciona la mecánica estadística de Boltzmann, además de considerar que la fuerza térmica tuviera una dispersión dada por  $\sqrt{2\gamma k_B T/\Delta t}$ , con  $\Delta t$  el intervalo de tiempo donde la fuerza no fluctúa y que hicimos igual al tamaño de paso de la simulación.

Otro punto importante en la programación, fue considerar la correlación como [Reigada 2001a]:

$$C(\tau) = \frac{1}{N-1} \sum_{j=2}^N \langle \Delta_j(t+\tau) \Delta_j(t) \rangle, \quad (4.1)$$

donde

$$\Delta_j(t) = u_j(t) - u_{j-1}(t), \quad (4.2)$$

con la finalidad de obtener el espectro de frecuencias de nuestro sistema.

En la siguiente sección pondremos a prueba la simulación comparando los resultados analíticos de un sistema de tres partículas con interacciones a primeros vecinos lineal y no-lineal, al igual que la interacción a segundos vecinos.

### 4.1. Sistema de 3 partículas.

Analizar el comportamiento de un sistema de 3 partículas nos permitirá ver la importancia de los efectos no-lineales en un sistema de pocas partículas y con ello entender el modelo de FPU y la relajación. El modelo de 3 partículas que tomaremos será como lo muestra la figura 4.1, es decir, un sistema de masas acopladas mediante resortes y unidas a dos paredes fijas.

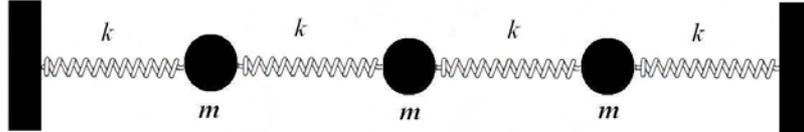


Figura 4.1: Sistema de 3 partículas.

El primer caso que analizaremos será el más simple de todos; este caso consiste en suponer que la interacción entre las masas es puramente lineal y se efectúa sólo a primeros vecinos. El Hamiltoniano que rige este sistema está dado como en 2.2 y las ecuaciones de movimiento que tenemos son las siguientes para masas  $m = 1$ :

$$\begin{aligned}\ddot{x}_1 &= -k(2x_1 - x_2) \\ \ddot{x}_2 &= -k(2x_2 - x_1 - x_3), \\ \ddot{x}_3 &= -k(2x_3 - x_2)\end{aligned}\tag{4.3}$$

Para resolver estas ecuaciones proponemos como posible solución:

$$x_j = A_j e^{i\omega t}\tag{4.4}$$

y obtenemos la matriz dinámica como en 2.2 que tiene la forma:

$$D = \begin{pmatrix} \omega^2 - 2k & k & 0 \\ k & \omega^2 - 2k & k \\ 0 & k & \omega^2 - 2k \end{pmatrix},\tag{4.5}$$

Al construir el sistema matricial para el sistema de ecuaciones, se ve que  $D \cdot A = 0$ , donde  $A$  es el vector de amplitudes. Esta notación nos permite vislumbrar que la solución no-trivial tiene que estar dada por  $\det D = 0$ . Por tanto, obtenemos la relación de dispersión siguiente:

$$\omega^2 = (2 \pm \sqrt{2}) k, \quad (4.6)$$

Cabe mencionar que las relaciones de dispersión que se obtienen son de gran importancia en el análisis espectral, pues con ellas podemos ver donde estarán los picos preponderantes en el espectro de frecuencias cuando tenemos al sistema inmerso en un baño térmico. En el caso de la ecuación 4.6 los picos con mayor altura en el espectro de frecuencias estarán  $\pm \sqrt{(2 \pm \sqrt{2}) k}$  independientemente si se termaliza o no el sistema.

El siguiente sistema a analizar es usando el hamiltoniano 2.20, donde hay interacciones lineales a primeros y segundos vecinos. Si se hace el desarrollo de las ecuaciones de movimiento y se plantean soluciones tipo exponenciales como 4.4 es fácil notar que la matriz dinámica del sistema es:

$$D = \begin{pmatrix} \omega^2 - 2(k + k_2) & k & k_2 \\ k & \omega^2 - 2(k + k_2) & k \\ k_2 & k & \omega^2 - 2(k + k_2) \end{pmatrix}, \quad (4.7)$$

y por tanto al hacer el determinante encontramos que hay dos relaciones de dispersión, que son:

$$\omega^2 = \begin{cases} \frac{1}{2} (4k + 3k_2 \pm \sqrt{8k^2 + k_2^2}) \\ 2k + 3k_2 \end{cases}, \quad (4.8)$$

Los siguientes casos, que son tomar el hamiltoniano no-lineal a primeros vecinos (modelo de FPU) 2.14 y el hamiltoniano no-lineal para SV 2.23 son más complicados y no se puede obtener las relaciones de dispersión analíticamente, Sin embargo, mediante aproximaciones como la elaboradas en la sección 2.2.1 se pueden obtener expresiones para frecuencias normales (ver apéndice A).

A continuación presentaremos un cuadro donde se exponen los valores que se obtienen al hacer dichas aproximaciones al igual que los datos analíticos obtenidos para frecuencias mayores a cero. Cabe mencionar que para obtener el cuadro 4.1 se uso el programa mathcad 8.0.

$k$	$k'$	$k_2$	$k'_2$	$\omega' s$
0.5	0	0	0	$\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{2 \pm \sqrt{2}}$
0.5	0.5	0	0	$\frac{\sqrt{14}}{4} \sqrt{2 \pm \sqrt{2}}$
0.5	0	0.5	0	$1, \frac{\sqrt{10}}{2}$
0.5	0.5	0.5	0.5	$\frac{\sqrt{7}}{2}, \frac{\sqrt{70}}{4}$

Cuadro 4.1: Frecuencias para 3 partículas.

Los resultados de la simulación para el espectro los obtuvimos variando la temperatura de termalización de la red. Para poder ver el efecto de la temperatura en el espectro de frecuencias, tomamos la partícula central de la red y le dimos un impulso unitario como condición inicial, este resultado lo mostramos en las gráficas como el de temperatura cero y está representado mediante la línea obscura en todas las gráficas. Cabe mencionar que el espectro de frecuencias se calculó como 3.9 usando la correlación como en 4.1 cuando el sistema se encontraba en equilibrio térmico.

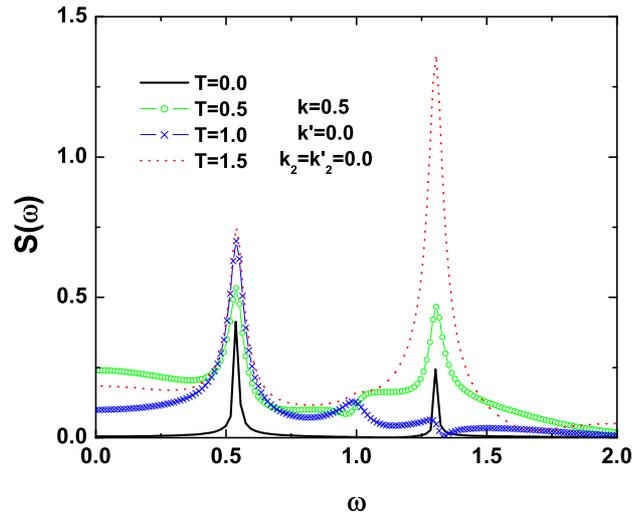


Figura 4.2: Espectros para el Hamiltoniano lineal con interacción a PV.

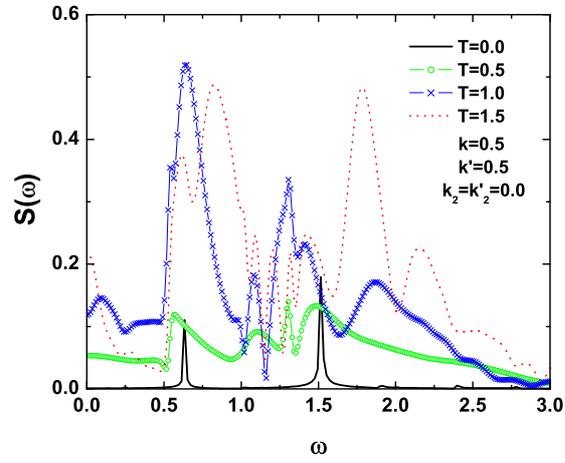


Figura 4.3: Espectros para el Hamiltoniano no-lineal con interacción a PV.

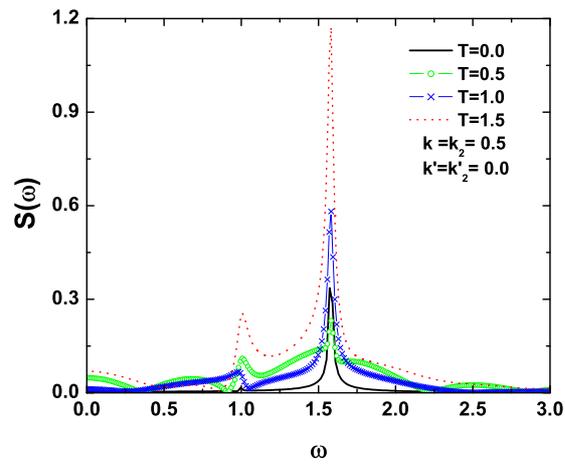


Figura 4.4: Espectros para el Hamiltoniano lineal con interacción a PV y SV.

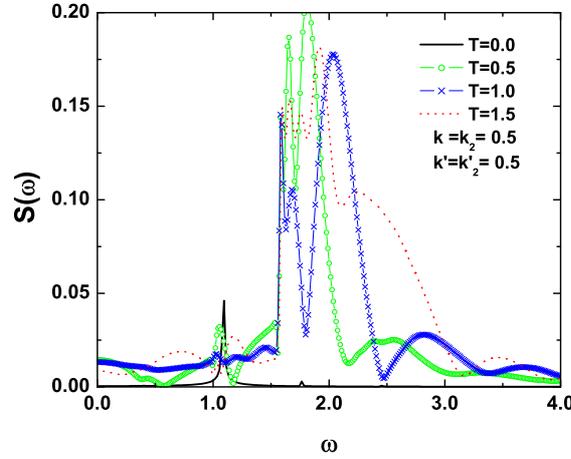


Figura 4.5: Espectros para el Hamiltoniano no-lineal con interacción a PV y SV.

Como se dijo anteriormente, el efecto de que la red esté termalizada no influye en la colocación de las frecuencias dominantes del sistema, pues como se ve en las figuras el pico está cerca de la frecuencia calculada por el cuadro 4.1. De hecho, se puede concluir que el efecto de la termalización de la red sólo hace que el ancho del pico de una frecuencia dada se ensanche conforme se incrementa la temperatura.

Como se puede observar, los casos no-lineales no le pegan muy bien a la frecuencia presentada en el cuadro 4.1, debido a lo mejor a la aproximación que usamos. No obstante, se ve que la cercanía a esta frecuencia es buena. Por ejemplo en la figura 4.5, la segunda frecuencia dominante del sistema está alrededor de 2.0, que es donde observamos fluctuaciones en el espectro de frecuencias. Por otra parte, el ensanchamiento de los picos debido a la temperatura no nos deja vislumbrar bien los resultados en los casos no-lineales, pues en el caso de la figura 4.3 no podemos ver a qué frecuencia pertenecen las fluctuaciones. Sin embargo, si podemos decir que el sistema tiene dos frecuencias características, pues al aumentar la temperatura podemos ver que hay como una interferencia de dos funciones gaussianas centradas en las dos frecuencias que se obtienen cuando el sistema no está en un baño térmico. A pesar de todo, el corrimiento de las frecuencias respecto a los casos lineales, tal cual lo mencionamos en el capítulo 2, nos da una buena pauta para continuar con los procesos de relajación.

De manera comparativa con lo obtenido por Reigada *et. al.* [Reigada 2001a] se graficó la relajación de la energía después de conectar los extremos de cadena a un baño a temperatura  $T = 0$ . En la figura 4.6  $E(0)$  es la energía que tenía el sistema en el instante que se conectó al baño a temperatura cero. Como se ve en la figura 4.6, los efectos de no-linealidad hacen que la relajación sea un poco más rápida, ya que la energía se disipa más rápido que en los casos lineales, lo cual

nos ayuda en cierta forma a corroborar la idea de FPU. Intuitivamente se sabe que si uno tiene dos sistemas iguales y a uno de ellos se le ponen más osciladores, la energía de éste será mayor respecto al primero, y por tanto cuando se hable de relajación veremos que ésta será mucho más lenta para el sistema al cual le agregamos osciladores que para el otro al que no le hicimos nada. En términos estadísticos, entre más modos normales tenga un sistema más lenta será su relajación. Siguiendo las ideas anteriores, podemos ver que nuestros resultados de la figura 4.6 son confiables aunque la diferencia no sea muy clara en la figura debido a las pocas partículas usadas.

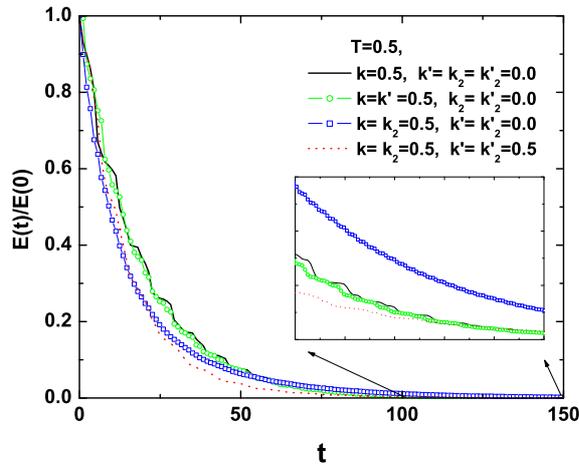


Figura 4.6: Relajación de la energía para el sistema de 3 partículas con interacciones lineales y no-lineales a PV y SV. La temperatura de termalización fue  $T=0.5$ , el tamaño de paso de la simulación fue  $dt=0.01$ .

Debido a la similitud que notamos con lo obtenido aquí y lo presentado por Reigada *et. al.* [Reigada 2001a, Reigada 2001b] obtenemos la pauta necesaria para continuar con los efectos de relajación en sistemas de muchas partículas, además de garantizar que nuestros resultados son correctos debido a la descripción para el espectro de frecuencias de 3 partículas.

## Capítulo 5

# Resultados del modelo de vidrios.

En este capítulo presentaremos nuestro modelo de vidrios, la importancia de los modos vibracionales de baja frecuencia en la densidad de modos y los resultados de la simulación del espectro de frecuencias de muchas partículas al igual que la relajación térmica para diferentes concentraciones de SV. Durante el desarrollo del capítulo se introducirá una variable más para entender el proceso de relajación denominada energía localizada [Piazza 2001] al igual que los modos de respiración mencionados en la parte final de la introducción.

### 5.1. Modelo de Vidrios.

Como mencionamos en la introducción la finalidad de este trabajo es combinar el modelo FPU de la ecuación 2.14 y el cambio de los MVBF para ver los efectos de relajación de una red unidimensional de osciladores acoplados. Así pues, dicho que la cantidad de MVBF se modifica con la interacción a SV, plantearemos entonces que esta modificación sea gradual, es decir, que podamos cambiar la concentración ( $C$ ) de segundos vecinos que interactúan en el sistema. Con la finalidad de cumplir el propósito anterior, modificaremos el hamiltoniano 2.23 de la siguiente forma:

$$H = \sum_{j=1}^N \frac{P_j}{2m} + \frac{1}{2}k(x_j - x_{j-1})^2 + \frac{1}{4}k'(x_j - x_{j-1})^4 + \sum_{j=1}^N \Theta_{j+2,j} \left[ \frac{1}{2}k_2(x_j - x_{j-2})^2 + \frac{1}{4}k'_2(x_j - x_{j-2})^4 \right], \quad (5.1)$$

donde la función  $\Theta_{j+2,j}$  es una variable aleatoria que toma valores 0 y 1 con

una probabilidad de  $C$  y  $1 - C$  respectivamente.

Con fines comparativos en el proceso de relajación, también haremos que la función  $\Theta_{j+2,j}$  sea de tal forma que deje un arreglo periódico en algunos casos, es decir, que la cantidad de SV que se tome sea simétrica en la cadena, y con ello comprobar cuanto influye la periodicidad y la no-periodicidad de la red en la relajación.

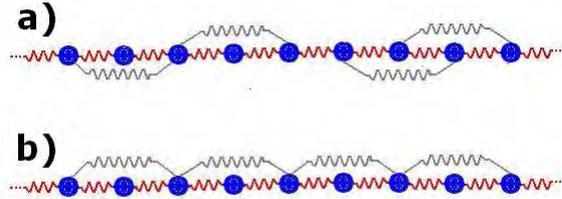


Figura 5.1: *Modelo vítreo con: a) interacción no-periódica de SV y b) interacción periódica de SV.*

Así pues, nuestro modelo de vidrios se basará en un modelo de FPU modificado para que con ayuda de la TR observemos el papel de los MVBF en el proceso de relajación.

## 5.2. Densidad de modos y MVBF.

Como se mencionó en la introducción, los MVBF son de importantes para describir la relajación térmica de una red y el número de MVBF que puede haber en un sistema depende de las constricciones que éste tenga. El punto a tratar, es identificar con que parte del hamiltoniano están relacionados estos MVBF.

Si pensamos que cada resorte que une a una partícula en nuestra red es una constricción es fácil notar entonces que la modificación de los MVBF se deben a la parte lineal del hamiltoniano pues con esta es la encargada unir cada partícula. Sin embargo, el efecto de la no-linealidad de nuestro modelo debería de influir de alguna manera. La forma en que la no-linealidad afecta los MVBF es trasladándolos a modos de frecuencias altas cuando el sistema tiene interacciones pequeñas [Cerón 2005]. Este efecto lo veremos más adelante en los resultados para el espectro de frecuencias de muchas partículas. No obstante, la finalidad de este apartado es la identificación de la cantidad de MVBF para diferentes concentraciones de SV de nuestro modelo.

Para ampezar nuestro análisis pensaremos en los dos casos limite de nuestro modelo cuando este sólo presenta interacciones lineales a PV y SV, es decir, concentraciones  $C = 0.0$  y  $C = 1.0$  respectivamente. Al observar estos casos notamos que ambos son periódicos y que cuando nos vamos a frecuencias pequeñas, en

el límite acústico ( $q \rightarrow 0$ ), obtenemos que las relaciones de dispersión calculadas mediante las ecuaciones 2.13 y 2.22 toman la forma  $\omega(q \rightarrow 0) = q\sqrt{k}$  y  $\omega(q \rightarrow 0) = q\sqrt{k + 4k_2}$  para las concentraciones  $C = 0.0$  y  $C = 1.0$  respectivamente. Lo que nos dice que en este límite las frecuencias son proporcionales al vector de onda  $q$ . Ahora bien, la densidad de modos del sistema unidimensional se puede calcular como [Kittel 1996]:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right|, \quad (5.2)$$

y por tanto podemos notar que en los casos límite,  $\rho(\omega)$  tiene la forma de:

$$\rho_C = \frac{1}{\pi v_C}, \quad (5.3)$$

donde el subíndice representa la concentración y  $v_{C=0} = \sqrt{k}$  y  $v_{C=1,0} = \sqrt{k + 4k_2}$ . Para hacer notar la variación de la densidad de modos conforme avanzamos de una a otra concentración límite diagonalizamos la matriz dinámica para  $N = 20000$  osciladores y promediamos sobre 100 arreglos desordenados para obtener la siguiente figura:

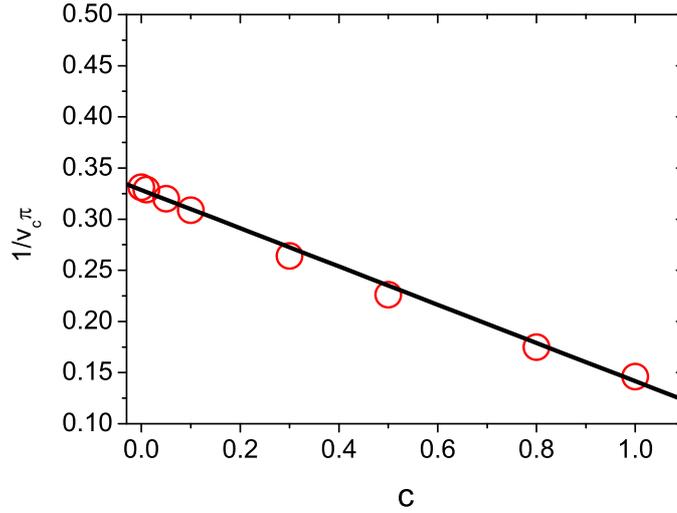


Figura 5.2: Límite acústico para la densidad de modos con  $k = k_2 = 1$ . La línea sólida representa un ajuste lineal y los símbolos representan los datos de la simulación.

Al hacer variar la concentración de segundos vecinos pudimos hacer un ajuste lineal con pendiente negativa para la densidad de modos en el límite acústico. Usando este hecho y la figura 3.2 podemos concluir que la contribución armónica hace que los MVBF disminuyan como función de la concentración.

### 5.3. Espectro de frecuencias.

Para notar el papel de la no-linealidad y el desempeño de los MVBF en nuestro sistema, calculamos el espectro de frecuencias (EF) para los casos lineal y no-lineal para diferentes concentraciones. Cabe mencionar que cuando aumentamos la concentración de SV en el caso lineal las interacciones eran lineales, y cuando tratamos el caso con no-lineal para los PV, los SV tuvieron no-linealidad.

Como se observa en las gráficas 5.3 y 5.4, la cantidad de MVBF disminuyen conforme se aumenta la concentración de SV y el papel de la no-linealidad de la cadena hace que las frecuencias bajas, comparadas con el caso  $C=0.0$ , disminuyan de amplitud y a su vez se corran a frecuencias mayores para conservar el área bajo la curva y con ello mantener la densidad de estados. Por otra parte, si nos centramos en las gráficas internas de cada figura, vemos que el crecimiento de los MVBF es casi constante cuando se cambia la concentración de SV. Esto último lo podemos aprovechar en la relajación, ya que no tendremos que distinguir entre que frecuencias bajas estamos para una concentración dada, pues todos los MVBF tienen la misma amplitud. Cabe mencionar que los resultados siguientes se hicieron para  $N=100$  partículas, que el incremento de paso en la simulación fue de  $dt=0.01$  y que los espectros de frecuencia  $S(\omega)$  se calcularon cuando la red estaba termalizada durante un tiempo de simulación de  $2^{14}$ .

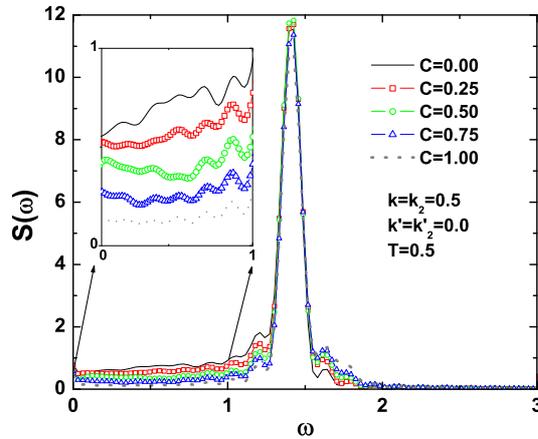


Figura 5.3: EF con interacciones lineales para distintos valores de  $C$ . Cada curva es un promedio de 10 realizaciones.

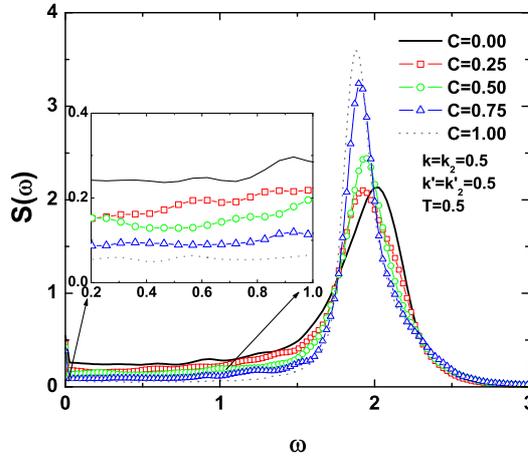


Figura 5.4: *EF con interacciones no-nolineal para distintos valores de  $C$ . Cada curva es un promedio de 10 realizaciones.*

#### 5.4. Relajación.

Para poder visualizar mejor el proceso de relajación conforme aumentamos la concentración dividimos los resultados en dos gráficas. Una que va desde  $C = 0.0$  a  $0.5$  y la otra que va desde  $C = 0.5$  a  $1.0$ . Como era de esperarse, la gráfica 5.5 muestra un incremento en la relajación conforme la concentración crece debido a que los MVBF disminuyen y a que ya no es tan fácil intercambiar energía con los extremos. Si pensamos en que cada MVBF tiene asociada una longitud de onda y que esta es la encargada de llevar la energía de un lugar a otro como una onda, entonces cuando decrecen los MVBF las amplitudes de las longitudes de onda asociadas disminuyen y por tanto llevan menos energía a los extremos, dando como resultado que la energía total del sistema se conserve por más tiempo haciendo que la relajación se vea más lenta.

No obstante, al observar la gráfica 5.6 notamos que lo dicho antes no se cumple para tiempos  $t < 10^4$ , pues se ve que mientras menos MVBF hay, más rápido se relaja la energía. Sin embargo, para tiempos  $t > 10^4$  se ve que nuestra concepción de los MVBF en el proceso de relajación funciona muy bien, pues conforme se aumenta la concentración de SV la relajación se torna cada vez más lenta.

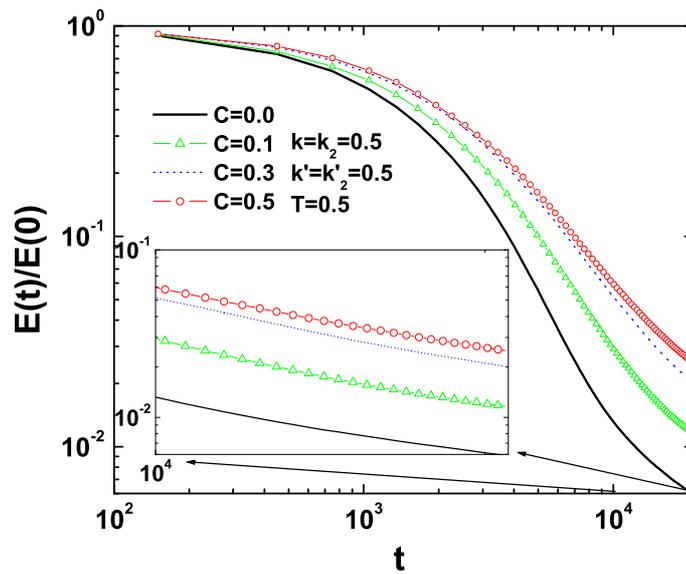


Figura 5.5: Relajación para concentraciones  $C=0.0$  a  $0.5$ . Cada curva es el resultado de un promedio de 40 realizaciones.

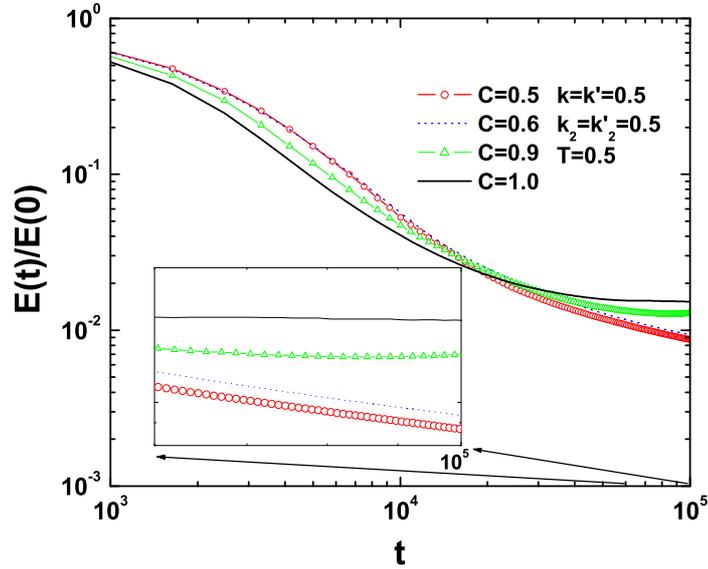


Figura 5.6: *Relajación para concentraciones  $C=0.5$  a  $1.0$ . Cada curva es el resultado de un promedio de 40 realizaciones.*

Siguiendo la idea de que a menos MVBF más lenta es la relajación, encontramos que las concentraciones de 0.0 a 0.5 siguen la idea, pero las concentraciones de 0.6 a 1.0 no la siguen para tiempos  $t < 10^4$ , lo que nos indica que hay un problema extra en el entendimiento de la relajación y que no puede radicar en el cambio de los MVBF, pues como vimos en la sección 1 de este capítulo, hay un decremento monótono conforme aumentan las concentraciones. Para tratar de entender este problema, decidimos ver la importancia de la colocación de los SV a ciertas concentraciones, para esto tomamos en cuenta que las concentraciones tuvieran la misma cantidad de modos normales (que se consigue por debajo del límite de Ishii[Ishii 1970]) y por tanto los mismos MVBF.

El primer paso fue ver la relajación para  $C=0.5$ , pues pareciera que este punto refleja una simetría en la gráfica de la relajación como se ve en las figuras 5.5 y 5.6, además de que es punto máxima entropía debido a que el número de posibilidades de poner los resortes es máxima. Para esta concentración ( $C=0.5$ ) decidimos comparar una cadena que dispone a sus SV de forma azarosa (cadena no-periódica) con una cadena que dispone a sus SV de forma periódica. Lo que encontramos, es que la relajación para tiempos  $t < 10^4$  no es sólo un problema de periodicidad de la red y de los MVFB, pues la relajación es diferente (ver figura 5.7) ya que notamos que la cadena periódica se relaja más rápido que la cadena no-periódica. Sin embargo, podemos decir que la periodicidad es importante en

la relajación y para ello graficamos la relajación para otras dos concentraciones y que presentamos en la figura 5.8.

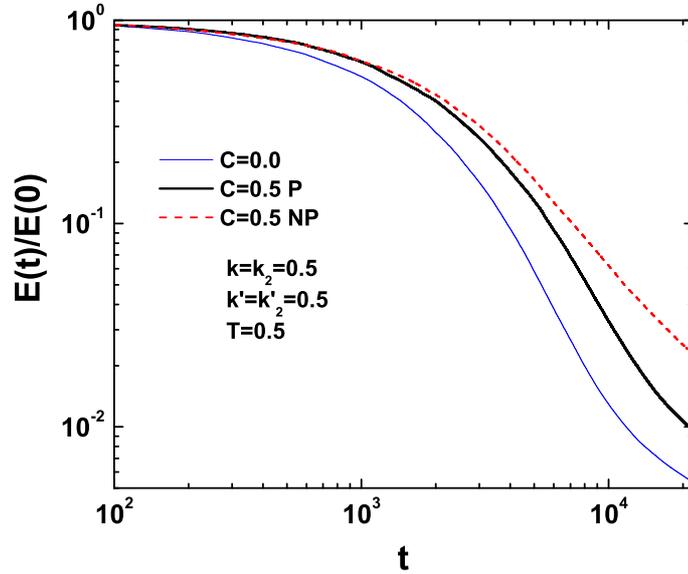


Figura 5.7: *Relajación para cadenas periódicas (P) y no-periódicas (NP),  $C=0.5$ . Cada curva es el resultado de un promedio de 40 realizaciones.*

El resultado obtenido fue curioso en la figura 5.8, pues como esperabamos la periodicidad de la red influye en el papel de relajación. Además obtuvimos que dos concentraciones de arreglos no-periódicos ( $C=0.25$  y  $C=0.75$ ) tuvieron una relajación similar. Este hecho, nos llevo a pensar que el entendimiento en la relajación de la cadena para tiempos  $t < 10^4$  fuera un problema en el cual se conjuntaran la periodicidad y alguna característica de no-linealidad de la red que hace que la gráfica de relajación pareciera simétrica para estos tiempos y no lo fuera. Otro hecho que vimos, es que para los arreglos periódicos no hay simetría en la gráfica de relajación para tiempos  $t < 10^4$ . No obstante para tiempos  $t > 10^4$  la idea de interpretar la relajación en términos de los MVBF funciona bien aunque el sistema presente periodicidad en la red.

Para tratar de comprender el efecto de no simetría en las gráficas de relajación para tiempos  $t < 10^4$ , intentaremos utilizar alguna propiedad de la no-linealidad como la formación de modos de respiración, a partir de la cantidad de energía localizada que tiene el sistema en cada instante y que discutiremos en la siguiente sección. Cabe mencionar, que la interpretación de los MVBF funcio-

na muy bien cuando el tiempo de relajación es largo pero cuando el tiempo es pequeño, la cantidad de MVBF no son suficientes para comprender la relajación del sistema. Es por ello que en la sección siguiente utilizaremos la idea de energía localizada para entender la relajación para tiempos cortos.

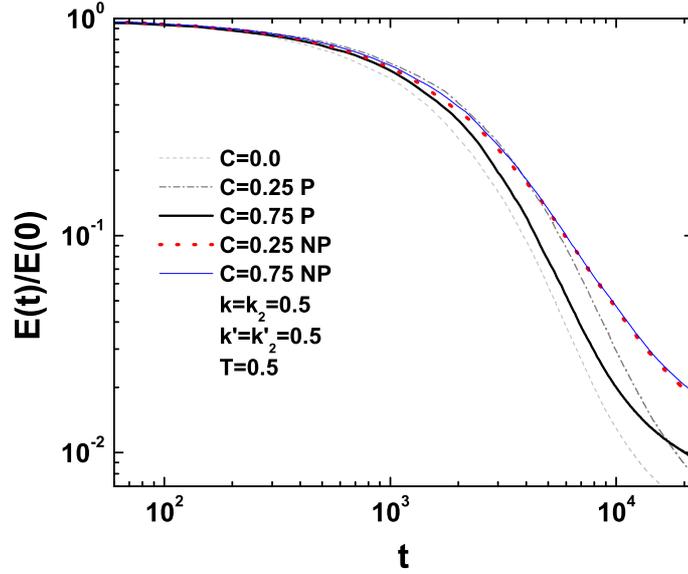


Figura 5.8: Relajación para cadenas periódicas (*P*) y no-periódicas (*NP*), diferentes concentraciones. Cada curva es el resultado de un promedio de 40 realizaciones.

## 5.5. Localización.

Como mencionamos, utilizaremos una nueva cantidad para describir el proceso de relajación. Para ello introduciremos una nueva cantidad llamada energía localizada mediante la forma [Piazza 2001]:

$$\mathcal{L} = \frac{\sum_{j=1}^N e_j^2(t)}{\left[ \sum_{j=1}^N e_j(t) \right]^2}, \quad (5.4)$$

donde  $e_j(t)$  es la energía por cada partícula  $j$  al instante  $t$  y definida por el Hamiltoniano de la ecuación 5.1 como:

$$e_j(t) = \frac{P_j}{2m} + \frac{1}{2}k(x_j - x_{j-1})^2 + \frac{1}{4}k'(x_j - x_{j-1})^4 + \Theta_{j+2,j} \left[ \frac{1}{2}k_2(x_j - x_{j-2})^2 + \frac{1}{4}k'_2(x_j - x_{j-2})^4 \right], \quad (5.5)$$

Cabe mencionar, que esta forma de localización energía en ciertas zonas de la cadena y por tanto la podemos relacionar con la creación de modos de respiración [Campbell 2004, Piazza 2001, Reigada 2001a, Reigada 2001b], como los mencionados en la introducción. Anteriormente habíamos mencionado que cuando los términos no-lineales  $k' \rightarrow 0$  la energía podía verse distribuida en cada modo normal y por tanto dijimos que la energía estaba localizada. Esta última forma de localización no se tomara en cuenta en la siguiente discusión, ya que los modos de respiración pueden encontrarse distribuidos en muchos modos normales del sistema.

Para interpretar el proceso de relajación con el parámetro  $\mathcal{L}$  analizamos los casos límite de nuestro arreglo, notando que cuando la localización de la energía (LE) aumenta la relajación del sistema es más lenta (ver la figura 5.9). Este hecho, concuerda con la interpretación de Reigada *et. al.* [Reigada 2001a, Reigada 2001b], ya que la energía en el sistema se empieza a localizar en ciertos sitios dando como resultado la aparición de modos de respiración que hacen que la energía no se pierda además de que estos modos no alcanzan a ver los extremos disipativos y por tanto hacen que el sistema se relaje más lento.

Lo siguiente que hicimos fue analizar los procesos de relajación para diferentes concentraciones no-periódicas. Cabe mencionar que el parámetro  $\mathcal{L}$  lo multiplicamos por el tamaño de la red, que fue de 100 sitios, para obtener un factor de escala, ya que  $\mathcal{L} < 1$ . El resultado obtenido fue interesante, pues en la gráfica 5.10 se ve que la LE decrece para la concentración  $C=0.0$  mientras que para las concentraciones  $C=0.1, 0.3$  y  $0.5$  permanece casi igual, salvo algunas fluctuaciones notables que nos ayudan describir el proceso de relajación a tiempos  $t < 10^4$ . La gráfica 5.11 hace notar con mayor fuerza la localización de la energía en el papel de la relajación, pues cuando hay incrementos en ésta la relajación se ve afectada, tal cual lo muestran los casos  $C=0.9$  y  $1.0$ .

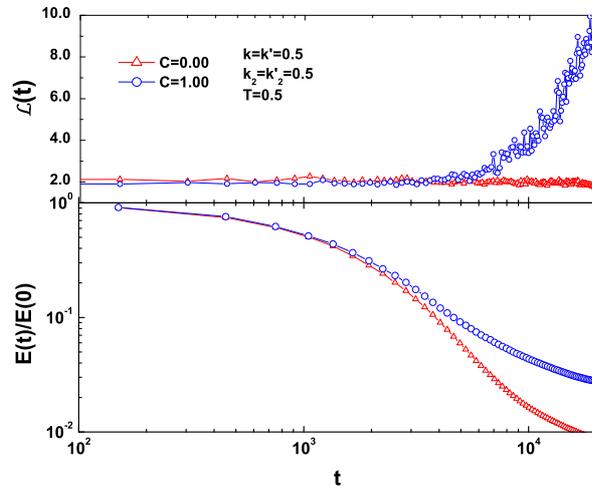


Figura 5.9: Localización y relajación contra tiempo:  $C=0.0$  y  $C=1.0$ .

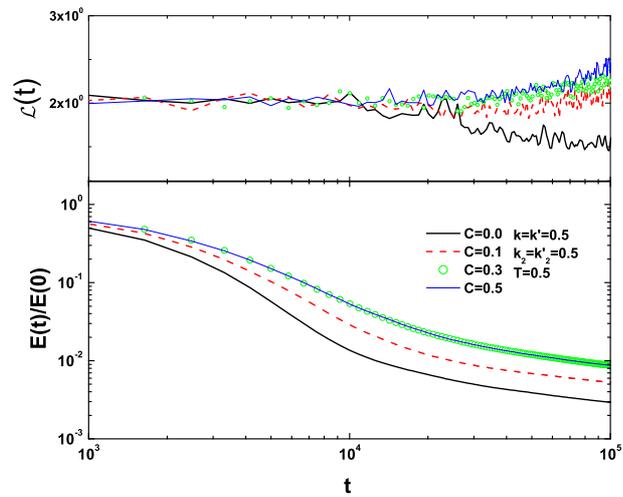


Figura 5.10: Localización y relajación para diferentes concentraciones. Concentraciones menores que  $C=0.5$ .

El incremento de la LE para tiempos cercanos a  $t = 10^4$  y mayores, hace una nueva forma de ver los efectos de los MVBF, ya que uno puede pensar que éstos siguen un efecto de cascada de energías como en turbulencia [Ponno 2005]. Lo cual nos dice que la transferencia de energía se da de los lugares más energéticos a los de poca energía y que estos últimos se encargan de disipar la energía. Como sabemos los MVBF son poco energéticos, por tanto siguiendo la idea de Ponno *et. al.*, estos serían los encargados de disipar la energía en nuestro modelo y por tanto los causantes de relajar al sistema. De aquí, que la interpretación de la LE para tiempos largos sólo se manifieste en que nuestras ideas de que los MVBF son los más importantes en la relajación. No obstante, vimos que la relajación para los tiempos  $t < 10^4$  es engorrosa aún, ya que la LE para esos tiempos es muy similar para todas las concentraciones. Sin embargo, una forma de interpretar los problemas de simetría en las gráficas de relajación sería mediante las fluctuaciones del parámetro  $\mathcal{L}$ , pues podríamos pensar que estas fluctuaciones generan modos de respiración que afectan la simetría y por tanto las gráficas de relajación no se ven simétricas alrededor de la concentración  $C=0.5$ .

Cabe mencionar que utilizar estas interpretaciones para cualquier tiempo es consistente a pesar de que el tiempo  $t = 10^4$  pueda ser solamente una manifestación de tomar arreglos finitos. No obstante, siempre podemos pensar en los tiempos largos e interpretar los resultados de las gráficas 5.10 y 5.11 con las ampliaciones de las gráficas 5.5 y 5.6 como una asimetría al alrededor de la concentración  $C=0.5$  debido a la formación de modos de respiración.

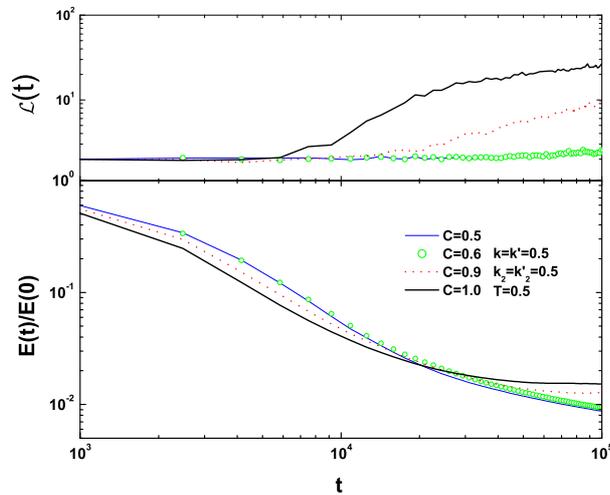


Figura 5.11: Localización y relajación para diferentes concentraciones. Concentraciones mayores que  $C=0.5$ .

## Capítulo 6

# Conclusiones.

Entender la importancia de los modos vibracionales de baja frecuencia (MVBF) en la relajación de un vidrio simple fue el tema principal de este trabajo. Durante el desarrollo, usamos la teoría de la rigidez para ir modificando gradualmente los MVBF y encontramos que éstos no fueron los únicos involucrados en el proceso de relajación. La forma en que quitamos MVBF fue poniéndole constricciones a nuestro modelo aumentando la concentración de segundos vecinos.

El primer punto que tratamos fue ver la variación de la densidad de modos al cambiar la concentración ( $C$ ) en el límite acústico para ver la forma en que cambiaban los MVBF. El resultado que obtuvimos fue que estos modos seguían una progresión lineal con pendiente negativa conforme  $C$  crecía, lo que indicaba que el número de MVBF disminuye conforme aumenta la concentración. El siguiente punto fue ver la relajación al aumentar la  $C$ , el resultado obtenido fue: para tiempos largos ( $t > 10^4$ ) los MVBF hacen que la relajación sea más lenta conforme van decreciendo, haciendo que el fenómeno de relajación se pueda interpretar como un efecto turbulento [Ponno 2005], donde la transferencia de energías grandes a pequeñas es de suma importancia para la disipación; sin embargo, para tiempos  $t < 10^4$  la forma de interpretar los MVBF en la relajación no fue suficiente, pues tuvimos que introducir un nuevo concepto, denominado localización de la energía, para enfatizar que la relajación se ve influenciada por la creación de modos de respiración y que se interpretan como sitios localizados de energía dentro de la cadena. La interpretación de este concepto no altera el entendimiento de la relajación para tiempos largos, pues encontramos que cuando el parámetro de localización es más fuerte (que sucede para tiempos  $t > 10^4$ ) hay un número mayor de modos de respiración que no permiten que haya transferencia de energía de modos de frecuencia alta a los modos de frecuencia baja y por tanto la interpretación de los MVBF es igual, pues si tenemos pocos modos de baja frecuencia la disipación se hace lenta.

El papel de la periodicidad de la red también fue de gran importancia para entender la relajación, pues notamos que para arreglos periódicos la relajación es más rápida que para sistemas no-periódicos. Este último punto al igual que la localización de la energía, nos llevo a concluir que la simetría en la gráfica de relajación que se pudiera observarse en los sistemas no-periódicos se rompe debido a la aparición de los modos de respiración en el sistema.

En forma general, la influencia de los MVBF en la relajación de sistemas vítreos son de suma importancia, pero no son los únicos que la afectan, ya que también los modos de respiración y la periodicidad de la red tienen impacto para tiempos  $t < 10^4$ . Sin embargo, las ideas desarrolladas para tiempos largos, que sólo se basan en la interpretación de los MVBF en la relajación, concuerda con la ideas de Phillips *et. al.* [Phillips 1996] donde se plantea que la velocidad para atrapar a un sistema en un estado metaestable basado en el paisaje de energías es de gran importancia debido a la habilidad que el sistema tiene para alcanzar el equilibrio térmico. En otras palabras, el paisaje de energías es un punto de partida para determinar la transición vítrea de un sistema.

Los resultados de este trabajo fueron presentados en un artículo bajo el nombre de *Thermal relaxation and low frequency vibrational anomalies in simple models of glasses: A study using nonlinear Hamiltonians* en la revista *Physical Review E*. El artículo fue aceptado el 16 de abril de 2008. La versión recibida por la revista se presenta en el apéndice C.

## Apéndice A

# Aproximaciones para 3 partículas.

Al tomar el hamiltonianos de la ecuación 2.23 para tres partículas, vemos que tiene la forma:

$$H = \sum_{j=1}^3 \frac{P_j^2}{2m} + \frac{1}{2}k(x_j - x_{j-1})^2 + \frac{1}{4}k'(x_j - x_{j-1})^4 + \frac{1}{2}k_2(x_j - x_{j-2})^2 + \frac{1}{4}k_2'(x_j - x_{j-2})^4, \quad (\text{A.1})$$

de aquí que las ecuaciones de movimiento del sistema son:

$$m\ddot{x}_1 = \begin{aligned} & -k(2x_1 - x_2) - k'((x_1)^3 - (x_2 - x_1)^3) \\ & -k_2(2x_1 - x_3) - k_2'((x_1)^3 - (x_3 - x_1)^3) \end{aligned}$$

$$m\ddot{x}_2 = \begin{aligned} & -k(2x_2 - x_1 - x_3) - k'((x_2 - x_1)^3 - (x_3 - x_1)^3) \\ & -k_2(2x_2) - k_2'((x_2)^3 - (-x_2)^3) \end{aligned}, \quad (\text{A.2})$$

y

$$m\ddot{x}_3 = \begin{aligned} & -k(2x_3 - x_2) - k'((x_3 - x_2)^3 - (-x_3)^3) \\ & -k_2(2x_3 - x_1) - k_2'((x_3 - x_1)^3 - (-x_3)^3) \end{aligned}$$

Ahora bien, si proponemos una solución tipo 2.16 y usamos la relación trigonométrica 2.17 podemos notar que habrá dependencias en las amplitudes con términos cúbicos, por tanto, pediremos que las amplitudes de la solución 2.16 sean tales que  $A_n^3 \simeq A_n$  al igual que  $B_n^3 \simeq B_n$ , para que al aplicar la relación trigonométrica del coseno cúbico podamos agrupar los términos del  $\cos(\omega t)$  y  $\cos(3\omega t)$  de la siguiente forma matricial:

$$D \cdot A \cdot \cos(\omega t) + [D' \cdot B + C \cdot A] \cdot \cos(3\omega t) = 0, \quad (\text{A.3})$$

donde

$$D = \begin{pmatrix} -m\omega^2 + 2k + \frac{3}{2}k' + 2k_2 + \frac{3}{2}k'_2 & -k - \frac{3}{4}k' & -k_2 - \frac{3}{4}k'_2 \\ -k - \frac{3}{4}k' & -m\omega^2 + 2k + \frac{3}{2}k' + 2k_2 + \frac{3}{2}k'_2 & -k - \frac{3}{4}k' \\ -k_2 - \frac{3}{4}k'_2 & -k - \frac{3}{4}k' & -m\omega^2 + 2k + \frac{3}{2}k' + 2k_2 + \frac{3}{2}k'_2 \end{pmatrix}$$

$$D' = \begin{pmatrix} -9m\omega^2 + 2k + 2k_2 & -k & -k_2 \\ -k & -9m\omega^2 + 2k + 2k_2 & -k \\ -k_2 & -k & -9m\omega^2 + 2k + 2k_2 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(k' + k'_2) & -\frac{1}{4}k' & -\frac{1}{4}k'_2 \\ -\frac{1}{4}k' & \frac{1}{2}(k' + k'_2) & -\frac{1}{4}k' \\ -\frac{1}{4}k'_2 & -\frac{1}{4}k' & \frac{1}{2}(k' + k'_2) \end{pmatrix}$$

y las matrices de amplitudes son:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{pmatrix}$$

y

$$B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}$$

Ahora bien, para encontrar una solución a la ecuación A.3, tendríamos que pedir que el determinante de las matrices  $D$  fueran cero. Pero encontramos un problema, pues el determinante de la matriz  $C$  es siempre diferente de cero por se una matriz constante. Así que para encontrar una solución aproximada pedimos también que los terminos no-lineales,  $k'$  y  $k'_2$  fueran pequeños y así poder encontrar la soluciones de las eigenfrecuencias del sistema al calcular sólo los determinantes  $\det |D| = 0$  y  $\det |D'| = 0$  que sería como ver el determiante de la matriz dinámica del sistema.

Para encontrar las eigenfrecuencias colocamos las matrices  $D$  y  $D'$  en el programa de matematicas Mathcad 8.0 usando los valores que se presentan en la tabla 4.1.

## Apéndice B

# Código fuente: programa en C++.

### B.1. Script de lanzamiento del programa.

```
#!/bin/bash
#
#Script para correr archivo cadena.cpp
#Se debe compilar cadena.cpp,thermal.cpp,promedio.cpp
antes de correr este programa;poner el mismo nombre
#del archivo *.cpp al ejecutable
#crea el archivo de entrada inputdata.txt
#
#aquí ponemos las condiciones iniciales de la Cadena.cpp
M=24
Nchain=1000
dt=0.01
m=1.0
K=0.5
Kp=0.5
K2=0.5
K2p=0.5
KbT=0.5
a=3
NNenergia=200
NNespectro=3000
conct_list="0.0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1.0"
for list in $conct_list
do
mkdir "$list"
for numero in `seq 5`
```

```

do
##cp "/thermal.${numero}.dat" "$list/"
cp "/cadena" "$list/"
cd $list
##mv "/thermal.${numero}.dat" "/thermal.dat"
date
echo $numero
echo $M >inputdata.txt
echo $Nchain >>inputdata.txt
echo $dt >>inputdata.txt
echo $m >>inputdata.txt
echo $K >>inputdata.txt
echo $Kp >>inputdata.txt
echo $K2 >>inputdata.txt
echo $K2p >>inputdata.txt
echo $KbT >>inputdata.txt
echo $a >>inputdata.txt
echo $list >>inputdata.txt
echo $NNenergia >>inputdata.txt
./cadena
##rm "/thermal.dat"
rm "/cadena"
rm "/inputdata.txt"
#mv "/spectrum.dat" "/spectrum.${numero}.dat"
mv "/energycut.dat" "/energycut.${numero}.dat"
mv "/localitation.dat" "/localitation.${numero}.dat"
cd ".."
done
#####promedio para la energia
cp "/promedio" "$list/"
cd $list
for q in `seq 5`
do
mv "/energycut.${q}.dat" "/$q.dat"
done
echo $NNenergia >NNchain.dat
./promedio
mv "/promedio.dat" "/penergy.${list}.dat"
for x in `seq 5`
do
rm "/$x.dat"
#mv "/$x.dat" "/energycut.${x}.dat"
done
rm "/promedio"
rm "/NNchain.dat"
cd ".."

```

```

#####
#####promedio espectro
#cp "./promedio" "$list/"
#cd $list
#for ss in `seq 1`
#do
#mv "./spectrum..${ss}.dat" "./$ss.dat"
#done
#echo $NNespectro >NNchain.dat
#./promedio
#mv "./promedio.dat" "./pspectrum..${list}.dat"
#for x in `seq 1`
#do
#rm "./$x.dat"
#done
#rm "./promedio"
#rm "./NNchain.dat"
#cd ".."
#####
#####promedio para la localizacion
cp "./promedio" "$list/"
cd $list
for q in `seq 5`
do
mv "./localitation..${q}.dat" "./$q.dat"
done
echo $NNenergia >NNchain.dat
./promedio
mv "./promedio.dat" "./plocalitation..${list}.dat"
for x in `seq 5`
do
rm "./$x.dat"
#mv "./$x.dat" "./localitation..${x}.dat"
done
rm "./promedio"
rm "./NNchain.dat"
cd ".."
#####
done

```

## B.2. Programa.

```

/*Autor: Romero Arias Jose Roberto
Last Date Review: 2007, November 14th
This program calculates the movement (with Runge Kutta metod) of a atomic
chain in a thermal equilibrium with interations (linear and nolinear) at first
and second neighbors. The thermal equilibrium is modelated with a gaussian
white noice and the aleatory number generator program
was taken at "Numerical Recipes in C:The art of Scientific Computing,1988-
1992.
Cambrige University Press" */
#include<stdio.h>
#include<math.h>
#include<stdlib.h>
#include<time.h>
#include<string.h>
#define IA 16807
#define IM 2147483647
#define AM (1.0/IM)
#define IO 127773
#define IR 2836
#define MASK 123459876
#define pi 3.1416
float linealforce(float ext_force,float gama,float vjj,float K_l, float K_r,float
uj_1,
float uj1,float m);
float nolinealforce(float Kp_l,float Kp_r,float m,float dt,float uj1,float uj_1,
float vj1,float vj_1);
float thermalforce(float mean, float sigma);
float aleatorynumbersgenerator(int N);
//float Correlation(float dt,int N, float **x, int Nchain);
//void potencia(int N,double **x,int Nchain,int jzero);
//void energy(int N, float **x,float **v,float K,float Kp, float *k2right,
float *k2pright,int Nchain,float dt,int izero);
main()
{
float *x,*v,**C,**F,*spring,**matriz,**xxx,**vvv;
float uj1=0,uj_1=0,uj=0,vj1=0,vj_1=0,vj=0,vjj=0,uj2=0,uj_2=0,
vj2=0,vj_2=0;
float gama=0,gamax=0,K=0,Kp=0,K2=0,K2p=0,Vzero=0,K_l,K_r,
Kp_l,Kp_r,K2_l,K2_r,K2p_l,K2p_r;
float *k2left=0,*k2right=0,*k2pleft=0,*k2pright=0;
float m=0,ext_force=0,dt=0,KbT=0,t=0,sigma=0,mean=0,cons=0,
w=0,w0=0,xx=0,conct=0,xjp,vjp;
float k1_x,k2_x,k3_x,k4_x,k1_v,k2_v,k3_v,k4_v;
float E,Ezero,Emean,Eplus,L;

```

```

int i,l,k,j,jzero,izero,N=0,M=0,Nchain=0,NNchain,sq,p,qq,count_ks=0;
int a=0,cuenta=0,paso=2,energystep=0,step=0,npt=0,nnpt=0,newstep=0,
newnpt=0,newnnpt=0;
FILE *input,*position,*velocity,*dispertion,*force,*output,*thermal,*matrix,
*localitation,*energycut;
//file conditions
//*****
//position=fopen("position.dat","w");
//velocity=fopen("velocity.dat","w");
//dispertion=fopen("dispertion.dat","w");
//force=fopen("force.dat","w");
//matrix=fopen("matrizderesortes.dat","w");
//output=fopen("outputdata.dat","w");
//thermal=fopen("thermal.dat","r");
energycut=fopen("energycut.dat","w");
localitation=fopen("localitation.dat","w");
//*****
input=fopen("inputdata.txt","r"); //Inicial data is read se inicie el archivo
de
condiciones inicialesp*/
fscanf(input,("%d\n%d\n%f\n%f\n%f\n%f\n%f\n%f\n%d\n%f\n%d\n"),\
&M,&Nchain,&dt,&m,&K,&Kp,&K2,&K2p,&KbT,&a,&conct,&nnpt);
printf("M= %d\tNchain= %d\tdt= %f\tm= %f\nK= %f\tKp= %f\tK2= %f\t
K2p= %f\nkbt= %f\ta= %d\tconct= %f\n",M,Nchain,dt,m,K,Kp,K2,K2p,KbT,a,conct);
//M=14; //power of step's numer
N=(int)(pow(2,M)); //numer of steps like power of two for helping the FFT
//Nchain=5; //numer of particules at the chain
jzero=(int)(Nchain+1)/2; //excited particule
izero=(4096); // maximum time of a thermalforce
npt=int(N/nnpt); ///numer of points on the grafics
newnpt=int(npt/nnpt);
//inicial conditions
//*****
*dt=0.01;
m=1.0;
K=1.0;
Kp=0.0;
K2=0.0;
K2p=0.0;
KbT=0.0;
gama=0.0;
a=1; //for choose the external force: 0) delta 1)constan 2)armonic 3)thermal
cons=0.0;
w=3.0;*/
//*****
gama=2.0*K*sin(pi/Nchain); //Damping conditions for the relaxation

```

```

//gama=0.1;
gamax=gama;
w0=sqrt(K);
sigma=sqrt(2.0*gama*KbT/(dt*m)); //initial condition for fluctation-disipation
teorem
Vzero=sqrt(2.0*KbT/(m)); //energy per unit of particule; initial condition
srand(time(NULL));
//*****
// array conditions
//*****
//x = (float**) malloc ((N+3)*sizeof(float *));
//if (x==NULL) exit (1);
//v = (float**) malloc ((N+3)*sizeof(float *)); //active memory for double
pointer
//if (v==NULL) exit (1);
x= (float*) calloc ((Nchain),6);
if (x==NULL) exit (1);
v = (float*) calloc ((Nchain),6);
if (v==NULL) exit (1);
xxx = (float**) malloc ((3)*sizeof(float *));
if (xxx==NULL) exit (1);
vvv = (float**) malloc ((3)*sizeof(float *));
if (vvv==NULL) exit (1);
F = (float**) malloc ((izero+3)*sizeof(float *));
if (F==NULL) exit (1);
matriz = (float**) malloc ((Nchain+1)*sizeof(float *));
if (matriz==NULL) exit (1);
//x[0] = (float *) malloc ((N+3) * (Nchain)*sizeof(float) );
//v[0] = (float *) malloc ((N+3) * (Nchain) * sizeof(float)); //the return
pointer will
relationed with the first array
F[0] = (float *) malloc ((izero+3) * (Nchain)*sizeof(float) );
matriz[0] = (float *) malloc ((Nchain+1) * (Nchain+1)*sizeof(float) );
for(i=1;i<=Nchain+1;i++) matriz[i]=matriz[i-1]+Nchain;
for (i=1;i<izero+3;i++)
{
//x[i] = x[i-1] + Nchain; //We need to calculate the rest of the pointers.
The next
point will be at Nchain pointers of distance
//v[i] = v[i-1] + Nchain;
F[i] = F[i-1]+ Nchain;
}
xxx[0] = (float *) malloc ((3) * (Nchain)*sizeof(float) );
vvv[0] = (float *) malloc ((3) * (Nchain) * sizeof(float));
for (i=1;i<3;i++)
{

```

```

xxx[i] = xxx[i-1] + Nchain;
vvv[i] = vvv[i-1] + Nchain;
}
for(i=0;i<=Nchain;i++) {for(j=0;j<=Nchain;j++) matriz[i][j]=0.0;}
for(i=0;i<=izero+1;i++) //for time
{
for(j=0;j<=Nchain+1;j++) //for particles
{
x[j]=0.0; //is a condition for the pointers
v[j]=0.0;
F[i][j]=0.0;
}
}
if(a==3)
{
for(j=2;j<=Nchain-1;j++) v[j]=pow(-1,j)*Vzero;
for(i=1;i<=izero;i++)
{
for(j=2;j<=Nchain-1;j++) F[i][j]=thermalforce(mean,sigma)/*fscanf(thermal,
("%f\n"),&F[i][j])*/;
}
}
//*****
k2left= (float*) calloc (Nchain,4);
if (k2left==NULL) exit (1);
k2right = (float*) calloc (Nchain,4);
if (k2right==NULL) exit (1);
k2pleft = (float*) calloc (Nchain,4); //second neighbors springs arrays
if (k2pleft==NULL) exit (1);
k2pright = (float*) calloc (Nchain,4);
if (k2pright==NULL) exit (1);
spring = (float*) calloc (Nchain,4);
if (spring==NULL) exit (1);
//*****
//*****
//*****
if(conct==1.0)
{
for(j=2;j<=Nchain-3;j++) //this loop is for modify the spring's constans.
This can
be used as desnsity of states
{
k2right[j]=K2; //note that the second neighbors are only conected at the in
of the
chain,i.e. the second neighbors

```

```

    k2pright[j]=K2p; // are not conected at the ends of the chain. If you want
that
the second neighbors conect with the ends
// of the chain rest one unit in the left side an sum one unit in the right
side.
    k2left[j+2]=K2;
    k2pleft[j+2]=K2p;
    }
    }
//*****
NNchain=Nchain-5;
p=int((NNchain)*(conct)); //put the concentration of 2nd neighbors springs
//qq=-2; //concentracion de 0.25
if (conct<1.0) //given the concentration we take the p springs that will be
in
    {
    for(i=0;i<=p;i++)
    {
    if(i==0)
    {
    for(j=0;j<=NNchain;j++) //this loop is for make a list of second neighbors
springs
    {
    spring[j]=j+2;
    }
    }
//*****
if(i>0)
    {
    for(j=0;j<=NNchain-i;j++) //this loop generated the new list of springs.
    {
    if(j<qq) spring[j]=spring[j];
    if(j>=qq) spring[j]=spring[j+1];
    }
    }
qq=int(-0.5+(NNchain-i)*(aleatorynumbersgenerator(1)+0.5)); //chose the
springs aleatority in the list
//*****
//
//
//qq=int(2*(1+i)); //concentracion de 0.5
//qq=int(4+qq); //concentracion de 0.25
/*
//*****
cuenta+=1;
qq=int(paso+i); //concentracion 7.5

```

```

if (cuenta==3){paso=paso+1;
cuenta=0;}
//*****
*/
sq=int (spring[qq]);
k2right[sq]=K2;
k2pright[sq]=K2p;
k2left[sq+2]=K2;
k2pleft[sq+2]=K2p;
//printf(" %d\t %d\t %d\t %f\n",i,qq,sq,k2right[sq]);
}
}
for(j=0;j<=Nchain;j++) if (k2right[j]>0.0) count_ks=count_ks+1;
printf(" %f\n",1.0*(count_ks)/(NNchain+1));
for(i=1;i<=Nchain;i++)
{
for(j=1;j<=Nchain;j++)
{
if(k2right[j]>0&i==j+2)
{matriz[i][j]=1.0;
matriz[j][i]=1.0;}
if(i==j+1) {
matriz[i][j]=1.0;
matriz[j][i]=1.0;}
}}
/*for(i=1;i<=Nchain;i++)
{
for(j=1;j<=Nchain;j++)fprintf(matrix," %f\t",matriz[i][j]);
fprintf(matrix,"\n");
}*/
//*****
//fprintf(output,"Initial data\n\nN=2^ %d\tNchain= %d\t dt= %f\t KbT= %f\n\n",
M,Nchain,dt,KbT);
//fprintf(output,"concentration= %0.2f\t gama= %f\n\nspring's constants\n
K= %f\t Kp= %f\t K2= %f\t K2p= %f\n",\
// 1.0*(count_ks)/(NNchain+1),gama,K,Kp,K2,K2p);
//*****
//Runge Kutta method for particules solution
//*****/
for(i=1;i<=N;i++) //for time
{
t=dt*i;
/* *****
vjj=0.0;
x[i][0]=0.0;
x[i][1]=0.0;

```

```

x[i][Nchain]=0.0; //border conditions
x[i][Nchain+1]=0.0;
v[i][0]=0.0;
v[i][1]=0.0;
v[i][Nchain]=0.0;
v[i][Nchain+1]=0.0;
//*****
if(i>=2){
for(j=2;j<=Nchain-1;j++)
{
x[j]=xxx[2][j];
v[j]=vvv[2][j];
}}
//*****
x[0]=x[1];
x[Nchain]=x[Nchain+1]; //free-end conditions
v[0]=v[1];
v[Nchain]=v[Nchain+1];
//*****
//fprintf(position,"%f\t",t);
//fprintf(velocity,"%f\t",t);
//*****
if(step==npt) {energystep=0;
step=0;}
if(i==izero) energystep=0;
if(i<npt&newstep==newnpt) {energystep=0;
newstep=0;}
if(i>=izero&energystep==0)
{
Eplus=0.0;
E=0.0;
Emean=0.0;
for(j=1;j<=Nchain;j++)
{
uj1=(x[j]-x[j+1]);
uj2=(x[j]-x[j+2]);
vj=v[j];
Eplus=(K/2.0)*(uj1*uj1)+(0.5)*(vj*vj)\
+(Kp/4.0)*(uj1*uj1*uj1*uj1)+(k2right[j]/2.0)*(uj2*uj2)\
+(k2pright[j]/4.0)*(uj2*uj2*uj2*uj2);
E+=Eplus;
Emean+=Eplus*Eplus;
} //energy for unit of particules
if(i==izero) Ezero=E;
if (i>=izero) fprintf(energycut,"%f\t%f\n",(i-izero)*dt,E/Ezero);
L=Nchain*Emean/(E*E);

```

```

fprintf(localitation," %f\t %f\n", (i-izero)*dt,L);
//printf(" %f\t %f\n", (i-izero)*dt,E/Ezero);
}
//*****
for(j=2;j<=Nchain-1;j++) //for particule
{
K_l=K;
K_r=K;
Kp_l=Kp;
Kp_r=Kp;
K2_l=k2left[j]; //this is for the springs constans
K2_r=k2right[j];
K2p_l=k2pleft[j];
K2p_r=k2pright[j];
if(a==0)
{
if(i==1&j==jzero)
{
x[j]=0.0; //here is the delta
v[j]=1.0;
}
}
if(a==1)
{
ext_force=cons; //chose the external force in the system
}
if (a==2)
{
ext_force=cos(w*i*dt/100.0);
}
if(a==3)
{
if(i<=izero)
{
//ext_force=thermalforce(mean,sigma); //simulate a brownian movement
ext_force=F[i][j];
//printf(" %f\n",ext_force);
}
if(i>izero) ext_force=0.0;
if(i>izero&(3>=j<=Nchain-2)) gama=0.0;
if(i>izero&j==2) gama=gamax;
if(i>izero&j==Nchain-1) gama=gamax;
}
uj1=(x[j+1]-x[j]); //first neighbors coeficient
uj_1=(x[j]-x[j-1]);
//uj=uj_1-uj1;

```

```

uj2=(x[j+2]-x[j]); //second neighbors coeficient
uj_2=(x[j]-x[j-2]);
vj1=(v[j+1]-v[j]); //first neighbors coeficient
vj_1=(v[j]-v[j-1]);
//vj=vj_1-vj1;
vjj=v[j];
vj2=(v[j+2]-v[j]); //second neighbors coeficient
vj_2=(v[j]-v[j-2]);
k1_x=vjj;
k2_x=vjj+linealforce(ext_force,gama,vjj,K_l,K_r,uj_1,uj1,m)*(dt/2.0)\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,0.0,uj1,uj_1,0.0,0.0)*(dt/2.0)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2,uj2,m)*(dt/2.0)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,0.0,uj2,uj_2,0.0,0.0)*(dt/2.0);
k3_x=vjj+linealforce(ext_force,gama,vjj,K_l,K_r,uj_1,uj1,m)*(dt/2.0)\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,0.0,uj1,uj_1,0.0,0.0)*(dt/2.0)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2,uj2,m)*(dt/2.0)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,0.0,uj2,uj_2,0.0,0.0)*(dt/2.0); // runge
kutta coeficients
k4_x=vjj+linealforce(ext_force,gama,vjj,K_l,K_r,uj_1,uj1,m)*dt\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,0.0,uj1,uj_1,0.0,0.0)*(dt)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2,uj2,m)*(dt)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,0.0,uj2,uj_2,0.0,0.0)*(dt);
k1_v=linealforce(ext_force,gama,vjj,K_l,K_r,uj_1,uj1,m)\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,0.0,uj1,uj_1,0.0,0.0)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2,uj2,m)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,0.0,uj2,uj_2,0.0,0.0);
k2_v=linealforce(ext_force,gama,vjj+k1_v*(dt/2.0),K_l,K_r,uj_1+vj_1*(dt/2.0),
uj1+vj1*(dt/2.0),m)\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,dt/2.0,uj1,uj_1,vj1,vj_1)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2+vj_2*(dt/2.0),uj2+vj2*(dt/2.0),m)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,dt/2.0,uj2,uj_2,vj2,vj_2);
k3_v=linealforce(ext_force,gama,vjj+k2_v*(dt/2.0),K_l,K_r,uj_1+vj_1*(dt/2.0),
uj1+vj1*(dt/2.0),m)\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,dt/2.0,uj1,uj_1,vj1,vj_1)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2+vj_2*(dt/2.0),uj2+vj2*(dt/2.0),m)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,dt/2.0,uj2,uj_2,vj2,vj_2);
k4_v=linealforce(ext_force,gama,vjj+k3_v*dt,K_l,K_r,uj_1+vj_1*dt,uj1+vj1*dt,m)\
+nolinealforce(Kp_l,Kp_r,m,dt,uj1,uj_1,vj1,vj_1)\
+linealforce(0.0,0.0,0.0,K2_l,K2_r,uj_2+vj_2*(dt),uj2+vj2*(dt),m)\
+nolinealforce(K2p_l,K2p_r,m,dt,uj2,uj_2,vj2,vj_2);
xxx[2][j]=x[j]+((k1_x +2.0*k2_x +2.0*k3_x + k4_x)*(dt/6.0));
vvv[2][j]=v[j]+((k1_v +2.0*k2_v +2.0*k3_v + k4_v)*(dt/6.0));
//x[j]=xjp;
//v[j]=vjpp;
//*****

```

```

//xx=xx+((x[i][j]*x[i][j])*(j-jzero)*(j-jzero)/(1.0*i)); //is for calculate the dis-
persion
of the waves
//if(j==50) fprintf(position," %f\n",x[j]); //make a table for position and
velocity
//fprintf(velocity," %f\t",v[i][j]);
}
//fprintf(dispertion," %f\t %f\n",t,xx);
//fprintf(position,"\n");
//fprintf(velocity,"\n");
step+=1;
energystep+=1;
newstep+=1;
}
//energy(N,x,v,K,Kp,k2right,k2pright,Nchain,dt,izero);
//Correlation(dt,izero,x,Nchain);
//getchar();
}
float linealforce(float ext_force, float gama, float vjj, float K_l,float K_r,
float uj_1,float uj1, float m)
{
float Pforce=0;
Pforce=((ext_force-gama*(vjj)-K_l*(uj_1)+K_r*(uj1))/m);
return(Pforce);
}
float nolinealforce(float Kp_l,float Kp_r,float m,float dt,float uj1,float uj_1,
float vj1,float vj_1)
{
float nlf=0;
nlf=0.0;
nlf=-(1.0/m)*((Kp_l*(uj_1*uj_1*uj_1)-Kp_r*(uj1*uj1*uj1))+(3*dt)*
(Kp_l*(uj_1*uj_1*vj_1)-Kp_r*(uj1*uj1*vj1)));
return(nlf);
}
float thermalforce(float mean, float sigma)
{
float FF; //aleatory numbers generetor with a gaussian distribution
FF=mean + sigma*(aleatorynumbersgenerator(12)); //sigma is the wigth
of
the gaussian
return(FF); //is used the central limit theorem
}
float aleatorynumbersgenerator(int N)
{
/*ranO(long *idum)
"Minimal" random number generator of Park and Miller. Returns a uniform

```

random deviate between 0.0 and 1.0. Set or reset idum to any integer value (except the unlikely value MASK) to initialize the sequence; idum must not be altered between calls for successive deviates in a sequence.

```

*/
int i,j;
long idum,k;
float ans;
FILE *salida;
//idum=MASK;
//salida=fopen("randomnumbers.dat","w");
//srand(time(NULL));
for(i=1;i<=1;i++)
{
ans=0.0;
for(j=1;j<=N;j++)
{
idum=rand();
k=(idum)/IO;
idum=IA*(idum-k*IO)-IR*k;
if (idum <0) idum += IM;
ans+=AM*(idum)-0.5;
//idum =(MASK);
//return ans;
}
//fprintf(salida," %f\n",ans);
return(ans);
}
//getchar();
}
void energy(int N, float **x,float **v,float K,float Kp, float *k2right,
float *k2pright,int Nchain,float dt,int izer0)
{
int i,j,cuenta=0,M,ii;
float E,Ezero,Emean,Eplus,sigmap=0,uj1,vj,uj2,L;
FILE *Energy,*energycut,*Sigma,*localitation;
//Energy=fopen("energy.dat","w");
energycut=fopen("energycut.dat","w");
localitation=fopen("localitation.dat","w");
//Sigma=fopen("standarddesviation.dat","w");
M=int(N/10);
for(i=1;i<=N;i++)
{
ii=10*i;
Eplus=0.0;
E=0.0;

```

```

Emean=0.0;
for(j=1;j<=Nchain;j++)
{
uj1=(x[i][j]-x[i][j+1]);
uj2=(x[i][j]-x[i][j+2]);
vj=v[i][j];
Eplus=(K/2.0)*(uj1*uj1)+(0.5)*(vj*vj)\
+(Kp/4.0)*(uj1*uj1*uj1*uj1)+(k2right[j]/2.0)*(uj2*uj2)\
+(k2pright[j]/4.0)*(uj2*uj2*uj2*uj2);
E+=Eplus;
Emean+=Eplus*Eplus;
/* es de prueba */if (i==1)fprintf(Sigma,"%0.2f\t%0.2f\t%0.2f\t%0.2f\n",
kright[j],kpright[j],k2right[j],k2pright[j]);
}
//fprintf(Energy,"%f\t%f\n",i*dt,E/(Nchain-2)); //energy for unit of par-
ticules
if(i==izero) Ezero=E;
if (i>=izero) fprintf(energycut,"%f\t%f\n",(i-izero)*dt,E/Ezero);
L=Nchain*Emean/(E*E);
fprintf(localitation,"%f\t%f\n",i*dt,L);
//Eplus+=E/(Nchain-2);
//if(i==izero) Emean=Eplus/izero;
}
/* for(i=1;i<=izero;i++)
{
E=0.0;
for(j=1;j<=Nchain;j++)
{
uj1=(x[i][j]-x[i][j+1]);
uj2=(x[i][j]-x[i][j+2]);
vj=v[i][j];
E+=(K/2.0)*(uj1*uj1)+(0.5)*(vj*vj)\
+(Kp/4.0)*(uj1*uj1*uj1*uj1)+(k2right[j]/2.0)*(uj2*uj2)\
+(k2pright[j]/4.0)*(uj2*uj2*uj2*uj2);
}
sigmap+=sqrt(((E/(Nchain-2))-Emean)*((E/(Nchain-2))-Emean));
fprintf(Sigma,"%f\t%f\n",i*dt,sigmap/(1.0*i));
}*/
}
float Correlation(float dt,int N, float **x,int Nchain)
{
int j,i,Tau,t,time;
float *C=0,R,S,w;
FILE *correlation,*Spectrum;
/******
C = (float*) calloc (N+3,7);

```

```

if (C==NULL) exit (1);
//*****
//correlation=fopen("correlation.dat","w");
Spectrum=fopen("spectrum.dat","w");
for(Tau=0;Tau<=N;Tau++)
{
R=0.0;
for(j=2;j<=Nchain;j++)
{
for(t=1;t<=N;t++)
{
if (t+Tau>N) time=0;
if (t+Tau<=N) time=t+Tau;
R+= ((x[t/*+2089152*//[j]-x[t/*+2089152*//[j-1]]*(x[time/*+2089152*//[j]-
x[time/*+2089152*//[j-1]]); //for obtain the autocorrelation
}
}
}
C[Tau]=R*dt/((Nchain-1)*(N));
//fprintf(correlation,"%f\t%f\n",Tau*dt,C[Tau]); //make a table
}
for(i=0;i<=3001;i++)
{
w=1.0*i/1000.0;
R=0.0;
for(j=0;j<=N;j++)
{
R+=C[j]*cos(w*j*dt);
}
fprintf(Spectrum,"%f\t%f\n",w,2.0*R);
}
}
}

```

## Apéndice C

### Artículo

Este artículo fue aceptado por la *American Physical Society* en la revista *Physical Review E* el 16 de abril de 2008. A continuación se presenta la versión enviada a esta revista. Cabe mencionar que antes de la publicación de este artículo, la revista hace algunos cambios su formato y por tanto el formato en el cual se presenta el artículo no será igual al publicado por dicha revista.

### Thermal relaxation and low frequency vibrational anomalies in simple models of glasses: an study using non-linear Hamiltonians

J.R. Romero-Arias<sup>1</sup>, Gerardo G. Naumis<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física-Química, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), Apartado Postal 20-364, 01000, México, D.F., Mexico.*

<sup>2</sup>*Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 10001, 62210 Cuernavaca, MOR., Mexico*

<sup>3</sup>*Departamento de Física-Matemática, Universidad Iberoamericana, Prolongación Paseo de la Reforma 880, Col. Lomas de Santa Fe. 01210, México DF, Mexico. and*

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) Apartado Postal 20-364, 01000, Distrito Federal, Mexico.*

(Dated: May 8, 2008)

Glasses exist because they are not able to relax in a laboratory time scale toward the most stable structure: a crystal. At the same time, glasses present low frequency vibrational modes (LFVM) anomalies. In this article, we explore in a systematic way how the number of such modes influences thermal relaxation in one dimensional models of glasses. The model is a Fermi-Pasta-Ulam chain with non-linear springs that join second neighbors at random. The corresponding number of LFVM decreases linearly with the concentration of these springs, and thus their effect upon thermal relaxation can be studied in a systematic way. To do so, we performed numerical simulations using lattices that were thermalized and afterwards placed in contact with a zero-temperature bath. The results indicate that the time required for thermal relaxation has two contributions: one depends on the number of LFVM and the other on the localization of modes due to disorder. By removing LFVM modes, relaxation becomes less efficient since the cascade mechanism that transfer energy between modes is stopped. On the other hand, normal mode localization also increases the time required for relaxation. We prove this last point by comparing periodic and non-periodic chains that have the same number of LFVM.

PACS numbers: 64.70.kj,05.45.-a,63.20.Ry,05.45.-a

The formation of glasses is still a source of many debates among the scientific community [1]. The main reason is the non-equilibrium nature of the process. As a consequence, some important questions for glass science and technology remain unanswered [2]. Among these we can cite the origin of non-exponential relaxation laws [3], or why certain materials are not able to reach the glassy state [2]. Both questions are interrelated. To make a glass, it must be cooled fast enough to avoid crystallization, but there is a minimal cooling speed for doing this. For lower velocities, the system relaxes toward the most stable configuration: the crystal. Other important property is the viscosity behavior, referred in the field as fragility [4][5] [6]. Fragility is related to the glass forming tendency, since a non-fragile glass former does not require a high cooling speed. It can be changed from strong to fragile by changing the chemical composition [6]. Although there are many theories available in the field of glasses, most of them are not able to predict the wide phenomenology observed. Furthermore, it is known that all glasses present anomalies in the density of low frequency vibrational modes (LFVM). The most famous one is the Boson peak [7], but there are others, like the floppy mode contribution, due to the flexible/rigid character of the atomic network. Floppy modes are explained very successfully by rigidity theory (RT) [8][9][10]. Surprisingly, most of the theories concerning glass transition do not give an special importance to this observation.

And it is surprising because for crystals, as shown by Peierls in 1935, thermal stability depends upon LFVM [7].

In a series of previous papers [11][12], we have shown that the anomalies in the density of LFVM determine mainly the glass transition temperature ( $T_g$ ). The key idea was to combine rigidity theory (RT) with the Lindemann criteria for the quadratic mean displacement [11]. Rigidity theory, introduced in this area by Phillips [8] and Thorpe [9] was a major step to understand glass formation. By considering covalent bonding as a mechanical constraint, the ease of glass formation is related with the ratio between available degrees of freedom and the number of constraints. When the number of constraints is lower than the degrees of freedom, there are nearly zero frequency vibrational modes called floppy [13]. The resulting network is under-constrained. A transition to a rigid lattice occurs by adding bonds. Glasses near the transition from flexible to rigid are easier to form [8]. Many interesting features of this transition have been experimentally observed, included a self-organized intermediate phase with zero internal stress which shows no-aging [14][15] [16]. Rigidity provides the unique opportunity for tuning the number of LFVM by chemical doping and then observe the resulting consequences in the physical properties [17][18][19]. For example, Selenium is a fragile glass, that follows a Vogel-Fulcher-Tamman law [6]. It must be cooled very fast. When doped with

other elements like  $Ge$  and  $Se$ , the average connectivity of the network is increased, and as a result, the glass becomes stronger and can be formed even by slow cooling [6]. However, even if it is believed that RT plays a role in this minimal cooling speed [8], up to now is not clear what is the mechanism behind this phenomena [20][21][22]. In this article, we made a first exploration of such problem by following a reductionist strategy. In particular, we discuss what are the effects of having an excess of LFVM in the thermal relaxation properties of simple models of glasses. As was pointed out many years ago by Fermi, Pasta and Ulam [25], the study of thermal relaxation requires the use of non-linear Hamiltonians. The first attempt to study such processes was the so called Fermi-Pasta-Ulam (FPU) model of a one dimensional chain with non-linear interaction [25][26]. It is amazing that still there are many unsolved question concerning this simple model [27]. As the research in the topic advanced, it became more or less clear that relaxation is dominated mainly by LFVM [28][29][30][31], due to their quasiresonant nature [28]. As a result, they share energy in an efficient way [31] when compared with high-frequency modes. In this article, we propose to join the study of non-linear Hamiltonians with the anomalies in LFVM of glasses, in order to get an insight about how fast a glass relaxes. Thus, here we will study how relaxation is affected by changing the density of LFVM, as well as the localization properties of vibrational modes in the system.

The structure of the article is the following. In section I we propose simple models in which the density of LFVM can be changed at will. Then in section II we explain how thermalization was achieved while in section III we present the results. Finally, section IV is devoted to give some conclusions and perspectives of the present work.

## I. MODELS OF GLASSES

As a starting point, we will formulate a suitable model to study the role of LFVM. The most simple one consists in modifying the FPU model to allow changes at will for the number of LFVM. The FPU model is simply a non-linear Hamiltonian defined in a one dimensional lattice made of equal masses ( $m$ ) joined by equal springs constants,

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2}(u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{k'}{4}(u_{j+1} - u_j)^4 \right], \quad (1)$$

where  $u_j$  is the displacement of the mass  $m$  at site  $j$ , and  $N$  is the number of sites.  $k$  is the harmonic spring constant, and  $k'$  is the strength of the non-linear interaction. In what follows, we set  $m = 1.0$ . The resulting equations

of motion are,

$$\frac{d^2 u_j}{dt^2} = k(u_{j+1} - u_j) - k(u_j - u_{j-1}) + k'(u_{j+1} - u_j)^3 - k'(u_j - u_{j-1})^3, \quad (2)$$

When the anharmonic term  $k'$  is small compared with  $k$ , it induces transitions between the normal modes of the pure harmonic Hamiltonian, plus a shifting of the eigenfrequencies to higher values [32]. Also, discrete breathers appear [27]. As was shown in references [28][29][30][31], LFVM are the ones that mainly influence thermal relaxation. But the actual number of LFVM depends on the structure of the pure harmonic Hamiltonian, since using the rotating phase approximation for small  $k'$ , one can show that the effect of non-linearity is a shift of the modes toward higher frequencies [32]. Thus, one needs first to change the basic structure of the pure harmonic Hamiltonian. This can be done by following the original idea of RT, in which each bond can be treated as a constraint [8][9]. By comparing the number of constraints with the number of degrees of freedom, one can get the fraction of modes with zero frequency, denoted by  $f$ . In the case of a linear chain, the number of degrees of freedom is  $N$ , while the number of bonds is also  $N$ . This means that there are no floppy modes. Removing bonds does not leads to a flexible lattice, since the lattice is separated in pieces. The only possibility is to add constraints to the system. In such a way, the number of LFVM can be reduced with respect to the FPU model. The most simple way to achieve this goal is to add new springs that connect second neighbors (we denote these new springs as SNS), as shown in Fig. 1 a) and b). The concentration of such springs is given by  $c$ , and is defined as the numbers of second neighbors springs divided by  $N$ . The springs can be placed at random, as shown is Fig. 1a), or in a periodic way (Fig 1b)). The Hamiltonian can be written as,

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2}(u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{k'}{4}(u_{j+1} - u_j)^4 \right] + \sum_{j=1}^N \Theta_{j+2,j} \left[ \frac{k_2}{2}(u_{j+2} - u_j)^2 + \frac{k'_2}{4}(u_{j+2} - u_j)^4 \right], \quad (3)$$

where  $\Theta_{j+2,j}$  is a random variable that takes values 0 or 1, with probability  $c$  and  $1 - c$  respectively. Eventually, and for comparison proposes, we will use a periodic function for  $\Theta_{j+2,j}$ .

If we consider the pure harmonic case ( $k' = 0$  and  $k'_2 = 0$ ), the number of LFVM changes as  $c$  goes from 0.0 to 1.0. There are many ways to prove this. First we notice that the limiting cases  $c = 0.0$  and  $c = 1.0$  are just periodic chains. For  $c = 0.0$ , the dispersion relationship is  $\omega(q) = \sqrt{2k(1 - \cos(q))}$ , where  $q$  is the wavevector and

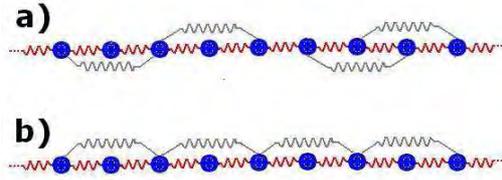


Figure 1: a) A glass model that has disorder in the second neighbours springs (SNS) connectivity. b) A modified model that has the same concentration of SNS as that in a), but disposed in a periodic arrangement.

$\omega(q)$  its corresponding frequency. Using that the density of modes  $\rho(\omega)$  in one dimension is given by,

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\pi} \left| \frac{dq}{d\omega(q)} \right| \quad (5)$$

and that for the acoustic region  $q \rightarrow 0$ ,  $\omega(q) = qv_{c=0}$ , where  $v_{c=0} = \sqrt{k}$  is the speed of sound for  $c = 0$ . It follows that for LFVM,  $\rho_{c=0}(\omega) \approx 1/\pi v_{c=0}$ , where the subindex in  $\rho(\omega)$  indicates the concentration of SNS. When  $c = 1.0$ , we have that,

$$\omega(q) = \sqrt{2(k + k_2 - k \cos(q) - k_2 \cos(2q))}, \quad (6)$$

which leads to the result,  $\rho_{c=1}(\omega) \approx 1/\pi v_{c=1}$  with  $v_{c=1} = \sqrt{k + 4k_2}$ . To treat other cases, we obtained the density of states by diagonalizing the dynamical matrix for chains with  $N = 20000$ , and over an average of 100 realizations of the disorder. For all cases, it was obtained that  $\rho_c(\omega)$  does not depend on  $\omega$  in the low frequency region. Since  $\rho_c(\omega)$  is a constant for  $\omega \rightarrow 0$ , we can define it as,

$$\rho_c(\omega) \equiv \frac{1}{\pi v_c} \quad (7)$$

In figure 2 we present a plot of  $1/v_c\pi$  obtained from the simulations. It can be seen that  $1/v_c$  is a linear function that interpolates between  $\rho_{c=1}(\omega)$  and  $\rho_{c=0}(\omega)$ . Such result is understandable since in the limit  $q \rightarrow 0$ , the system can be treated as a continuous medium. Thus, in the proposed model for the harmonic contribution, the density of LFVM decreases as a function of the concentration  $c$ .

## II. THERMALIZATION OF THE GLASSES

To study the dynamics of the relaxation, first we thermalized the systems by using a bath. Afterwards, the bath was retired and a damping term was added at the

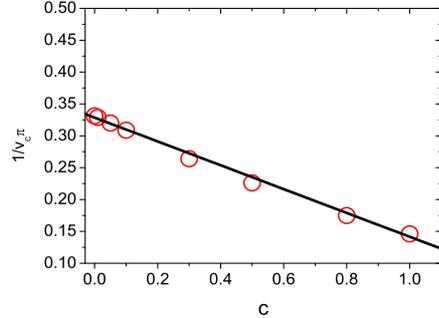


Figure 2: Limiting value of  $\rho_c(\omega)$  as  $\omega \rightarrow 0$  for different concentrations  $c$  of second neighbours springs. The circles are the results obtained by diagonalizing the Hamiltonian for a chain with  $N = 20000$  sites, averaged over 100 realizations of disorder. The solid line is a fit with a linear equation.

ends of the chains to observe the energy dissipation. These steps were made for harmonic and non-harmonic Hamiltonians, in order to compare the results. For the case of harmonic Hamiltonians, the systems were prepared in such a way that each normal mode had an energy  $k_B T/2$ , where  $k_B T$  is the temperature measured and  $k_B$  the Boltzmann constant. For non-linear Hamiltonians, we used a Langevin dynamics in which a stochastic force ( $\eta(t)$ ) and a damping was added to the equation of motion,

$$\frac{d^2 u_j}{dt^2} = -\frac{\partial H}{\partial u_j} - \gamma_0 \frac{du_j}{dt} + \eta_j(t).$$

As usual, the force had a Gaussian distribution, with zero mean  $\langle \eta_i(t) \rangle = 0$  and correlation given by,

$$\langle \eta_i(t) \eta_i(t') \rangle = 2\gamma_0 k_B T \delta(t - t') \quad (8)$$

where  $\gamma_0$  is the amplitude of the damping.

In all the cases, these equations were solved by using a fourth-order Runge-Kutta algorithm, with parameters such that  $\gamma_0 < 8\pi^2 k_j / N^2$  and  $0.0 \leq T \leq 1.0$ . Notice that  $k_B$  was set to 1.0 in all simulations, so  $T$  has always energy units. For validating the software and to test the thermal equilibrium, we performed several tests, including various limiting cases. For the linear Hamiltonians, the phonon dynamics was compared with results obtained from other methods. The achievement of thermal equilibrium was determined by monitoring the total energy  $E(t)$  as a function of time and the amount of energy in each normal mode. Also, for the harmonic chains we have checked that the kinetic and potential energies of the atoms were fluctuating around  $k_B T/2$ ,

as expected from the equipartition theorem in thermal equilibrium. Finally, we characterized our systems by looking at the frequency spectrum  $S(\omega)$  of the correlation function when thermal equilibrium is achieved,

$$S(\omega) = 2 \int_0^{\infty} C(\tau) \cos(\omega\tau) d\tau, \quad (9)$$

where the time correlation  $C(\tau)$  is defined as [30],

$$C(\tau) = \frac{1}{N-1} \sum_{j=2}^N \langle \Delta_j(t+\tau) \Delta_j(t) \rangle, \quad (10)$$

and  $\Delta_j(t)$  is the relative displacement,

$$\Delta_j(t) \equiv u_j(t) - u_{j-1}(t) \quad (11)$$

For a pure harmonic Hamiltonian,  $S(\omega)$  can be computed analytically,

$$S(\omega) = \frac{4\gamma_0 k_B T}{N} \sum_{q=0}^{N-1} \frac{1}{[r_1^2(q) + \omega^2][r_2^2(q) + \omega^2]} \quad (12)$$

where  $r_{1,2}(q)$  are conjugated roots of the secular equation obtained when diagonalizing the Hamiltonian. For a periodic chain, such roots are easily obtained,

$$r_{1,2}(q) = -\frac{\gamma_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma_0}{2}\right)^2 - 4k \sin^2\left(\frac{\pi q}{N}\right)}. \quad (13)$$

In figure 3,  $S(\omega)$  is shown for chains with different concentrations of SNS using a pure harmonic Hamiltonian, while in Fig. 4 the same calculation was repeated considering a non-linear interaction. In both cases, the temperature was  $T = 0.5$ , and the time step  $dt = 0.01$ . The damping constant  $\gamma_0$  was taken as  $\gamma_0 < 8\pi^2 k/N^2$  in such a way that  $r_{1,2}(q)$  has imaginary roots for the biggest separation between eigenfrequencies, avoiding a cut-off effect in  $S(\omega)$  for LFVM. For all harmonic cases, we have verified that the  $S(\omega)$  calculated from the Runge-Kutta method and from a direct diagonalization using eq. (12) are in complete agreement. In Fig. 3 and 4, we include a zoom of the low frequency region, showing that  $S(\omega)$  is reduced for small  $\omega$  with increasing  $c$  as expected.

### III. ENERGY RELAXATION AND LOW FREQUENCY MODES

The relaxation of the thermalized models from an initial temperature  $T$  to zero temperature has been studied following two steps: first the thermal bath was retired and then a damping term was added at both ends of the chains. The resulting equations of motion are the following,

$$\frac{d^2 u_j}{dt^2} = -\frac{\partial H}{\partial u_j} - \sum_{j=1}^N \Gamma_{jl} \frac{du_j}{dt}, \quad (14)$$

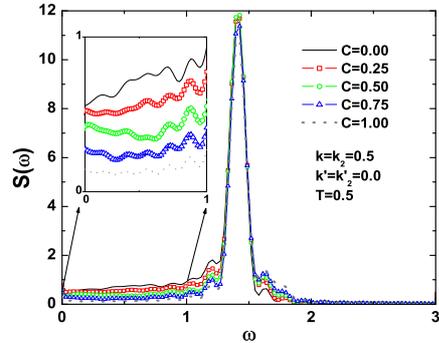


Figure 3:  $S(\omega)$  using a pure harmonic Hamiltonian for different concentrations of second neighbours springs (SNS). The inset depicts the low frequency region, showing the decreasing number of states as a function of  $c$ . The spectra has been obtained using  $N = 100$ ,  $T = 0.5$  and  $dt = 0.01$ . Each curve is an average over 10 disorder realizations.

where  $\Gamma_{jl}$  is the dissipation near the ends of the chain,

$$\Gamma_{jl} = \gamma \delta_{jl} [\delta_{j,1} + \delta_{j,N}], \quad (15)$$

$\gamma$  is the damping constant and  $\delta_{jl}$  is a Kronecker delta. As we are dealing with a system in a finite volume, we used fixed-end boundary conditions ( $u_0 = u_{N+1} = 0$ ). Also, for all chains we took  $\gamma = \gamma_0$ .

In Figures 6 and 7 we present a plot of the energy relaxation using non-linear Hamiltonians for different concentrations of SNS. Notice that in Fig. 6 we present the evolution from  $c = 0.0$  to  $c = 0.5$ , while in Fig. 7 the concentration goes from  $c = 0.5$  to  $1.0$ . This separation was made in order to simplify the discussion of the results. Each of the plots for the energy relaxation was made for  $N = 100$ , starting from thermalized baths at  $T = 0.5$ . An average over 40 realizations of disorder was made in all cases.

There are many different observations that can be made in the plots of the relaxation. The first one is that the time required for relaxation increases as  $c$  goes from 0.0 to 0.5. As  $c$  goes from 0.5 to 1.0, this behavior is reversed for times  $t \lesssim 10^4$ , since the time required for relaxation decreases with  $c$ . Near the cross-over time  $t \approx 10^4$ , the time relaxation becomes slower as the concentration of SNS is increased. At  $c = 1.0$ , the slowest relaxation is observed. Thus we can conclude that for long times, relaxation is always slower when the number of LFVM is reduced. This long time behavior can be understood in terms of the depletion of LFVM, as was explained in the introduction. According to ref. [30], the thermal relaxation of high frequency modes requires a transfer-

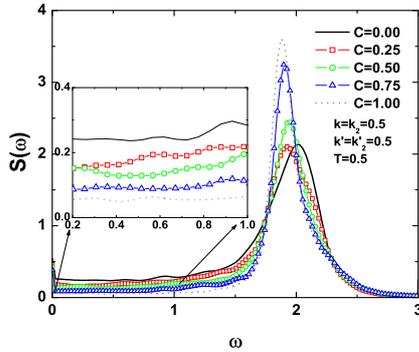


Figure 4:  $S(\omega)$  using a non-linear Hamiltonian for different concentrations of second neighbours springs (SNS). The inset depicts the low frequency region. The springs constants are shown inside the graph. The spectra has been obtained using  $N = 100, T = 0.5$  and  $dt = 0.01$ . Each curve is an average over 10 disorder realizations.

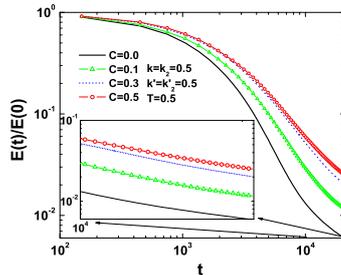


Figure 5: Energy relaxation as a function of time for  $c = 0$  to  $0.5$  using a non-linear Hamiltonian with parameters  $k' = k'_2 = 0.5$ . The inset shows a zoom of the relaxation tail. For all chains,  $N = 100, dt = 0.01$ , and an average over 40 realizations of disorder was made.

ence of energy from high frequency modes into LFVM, which then dissipate the energy. Such phenomena is akin to turbulence [31], in which energy is injected at a big scale, and transferred via a cascade of self-similar eddies to a small scale in which energy is finally dissipated. In the present case, the reduction of LFVM means that no so many modes are available to dissipate energy. As a result, energy relaxation is slower.

In spite of this, our results shows that this is not the

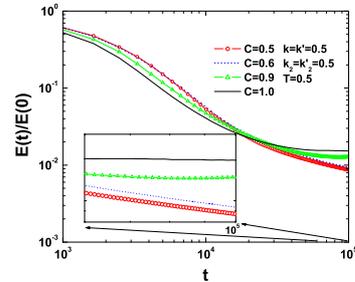


Figure 6: Energy relaxation as a function of time for  $c = 0.5$  to  $1.0$ . The inset shows a zoom of the relaxation tail. For all chains,  $N = 100, dt = 0.01$ , and an average over 40 realizations of disorder was made. The size of the non-linear interaction term is given by  $k' = k'_2 = 0.5$ .

only effect. The density of LFVM decreases from  $c = 0.0$  to  $c = 1.0$ , while the time required for thermal relaxation in disordered chains has a maximum around  $c = 0.5$  for times  $t < 10^4$ . That means that the transference toward LFVM is not the only factor that determines thermal relaxation. To clarify this point, we decided to compare disordered chains with periodic chains that contained the same concentration of SNS. An example of lattices with and without disorder but for a similar concentration of SNS was given in Fig. 1. In Fig. 7 we present some interesting cases, like the periodic cases  $c = 0.25$  and  $c = 0.75$ .

It is clear that the array with  $c = 0.75$  relaxes slower for intermediate times, however, at around  $t = 2.0 \times 10^4$ ,  $c = 0.75$  begins to relax slower than  $c = 0.25$ . This is a clear indicative that the depletion of LFVM produces a slower relaxation for very long times, as expected from the arguments of energy sharing. We can see in Fig. 7 that the disordered cases  $c = 0.75$  and  $c = 0.25$  relax in a very similar way before the cross-over. Since both contains different numbers of LFVM but almost the same degree of disorder when compared to  $c = 0.0$  and  $c = 1.0$  respectively, we can conclude that for this concentration and time scale, the spatial shape of the normal modes seems to be as important as the numbers of LFVM in disordered chain. Although both kinds of chains have nearly the same density of normal modes for LFVM (below the Ishii limit [35]), for the pure harmonic disordered cases the high frequency normal modes are localized. As a result, energy is not transferred so fast to the LFVM. However, the periodic cases  $c = 0.25$  and  $0.75$  show that in the long term behavior, the absence of LFVM is fundamental. This long trend behavior is very clear for the case  $c = 1$  which deserves a special mention, since although it relaxes very similar to the  $c = 0.0$  case at small

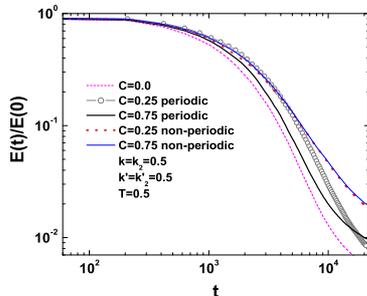


Figure 7: Energy relaxation of several concentrations and lattice topologies for a non-linear Hamiltonian, with the corresponding code given inside the plot. The parameters of the simulations were the same than those in the previous plots.

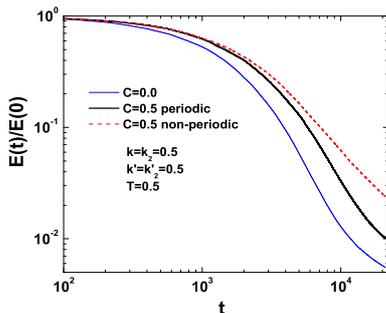


Figure 8: Energy relaxation as a function of time for the cases  $c = 0.0$ ,  $0.5$  periodic and  $0.5$  non-periodic using a non-linear Hamiltonian. Notice how the disordered case relaxes slower than the periodic case. The parameters used in the simulations were the same than those in the previous plots.

times, at  $t \approx 10^4$  begins to relax in a much slower way than any other curve.

In Fig. 8 we present another comparison of the relaxation for a periodic and a disordered chain with  $c = 0.5$ . One can clearly see that the non-periodic array relaxes slowly compared with the periodic array. In both cases, the relaxation is slower than the  $c = 0.0$  case. From this discussion, is possible to conclude that the localization of normal modes, due to disorder, plays a role in the relaxation time.

It is worthwhile mentioning that one must not be con-

fused by the term localization. In the previous discussion, the term localization was referred to the normal mode characteristics of the associated harmonic problem, i.e., when  $k' \rightarrow 0$ . Such localization is a consequence of disorder. There is another kind of localization due to the existence of breathers [29], which is basically a purely non-linear effect. To understand this, we calculated the energy localization parameter  $\mathcal{L}(t)$ , defined as [34],

$$\mathcal{L}(t) = \frac{\sum_{j=1}^N e_j^2(t)}{\left[ \sum_{j=1}^N e_j(t) \right]^2},$$

where  $e_j(t)$  is the energy localized in a given site,

$$e_j(t) = \left[ \frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2}(u_{j+1} - u_j)^2 + \frac{k'}{4}(u_{j+1} - u_j)^4 \right] + \Theta_{j+2j} \left[ \frac{k_2}{2}(u_{j+2} - u_j)^2 + \frac{k'_2}{4}(u_{j+2} - u_j)^4 \right]$$

The role of the parameter  $\mathcal{L}(t)$  is to give a rough estimate on how energy is localized in the chain. In figure 9 we compare  $\mathcal{L}(t)$  for the cases  $c = 0.0$  and  $c = 1.0$ . Clearly, for times  $t > 10^4$  the energy begins to be much more localized in the case  $c = 1$ , due to the absence of LFVM compared to  $c = 0.0$ . In the plot, the relaxation behavior is presented for comparison. It is clear that the slow relaxation properties are due to energy localization. However, both chains are periodic and there are no effects of disorder. As a consequence, if  $k' \rightarrow 0$ , both chains presents non-localized normal modes. In fact, it is easy to prove that for  $k' = 0$ , the chains with  $c = 0.0$  and  $c = 1.0$  relax at the same time.

In figure 10, we show a plot of the energy relaxation and localizations for  $c = 0.5$  to  $c = 1.0$  using non-linear chains. One can observe the clear relationship between localization of energy and relaxation due to non-linear effects, since the case  $c=1.0$  does not contain disorder as the cases  $c = 0.5$ ,  $c = 0.6$  and  $c = 0.9$ .

#### IV. CONCLUSIONS

The present study shows that low frequency modes have a great impact in thermal relaxation. Such impact not only arises as a consequence of the cascade mechanism that dissipates energy from high to low frequency modes, but also because of the interplay between localization and non-linearity. The present study shows that the density of low frequency modes is fundamental for long relaxation times. A decrease in such density leads to an increased relaxation time. It is worthwhile mentioning that our results are in complete agreement with the idea of J.C. Phillips that the cooling speed is related

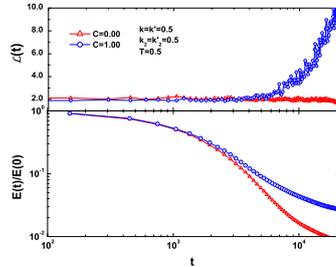


Figure 9: Comparison between the localization of energy and relaxation for the non-disordered cases  $c = 0.0$  and  $c = 1.0$ . Notice that the case  $c = 1.0$  contains less LFVM, and as a result, relaxation is slower. The parameters used were  $N = 100$ ,  $dt = 0.01$ .

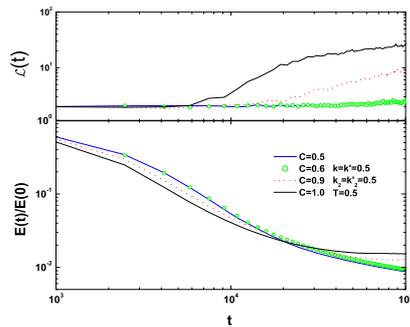


Figure 10: Energy localization for different concentrations  $c$  compared with the energy relaxation using disordered chains. The parameters used were  $N = 100$ ,  $dt = 0.01$  and an average over 40 realizations was made.

with rigidity [8], since the required speed to trap the system in a metastable basin of the energy landscape will be much higher due to the ability of the system to reach thermal equilibrium. In fact, such phenomena can be explained also in terms of the curvature of the energy landscape in the direction of floppy modes [12][22]

**Acknowledgments.** We thank DGAPA-UNAM projects IN-117806, IN-111906 and CONACyT 48783-F, 50368 for financial support.

- 
- [1] P.W. Anderson, *Science* **267**, 1615 (1995).  
 [2] J. Jackle, *Rep. Pro. Phys.* **49**, 171 (1986).  
 [3] J.C. Phillips, *Rep. Prog. Phys.* **59** 1133 (1996).  
 [4] P.G. Debenedetti, *Metastable Liquids*, Princeton Univ. Press, 1996.  
 [5] P.G. Debenedetti and F.H. Stillinger, *Nature* **410**, 259 (2000).  
 [6] M. Tatsumisago, B.L. Halpapp, J.L. Green, S.M. Lindsay, C.A. Angell, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1549 (1990).  
 [7] K. Binder, W. Kob, *Glassy materials and disordered solids*, (World Scientific, Singapoure, 2005).  
 [8] J.C. Phillips, *J. Non-Cryst. Solids* **34**, 153 (1979).  
 [9] M.F. Thorpe, *J. Non-Cryst. Solids* **57**, 355 (1983).  
 [10] J.C. Phillips, in *Rigidity Theory and Applications*, ed. by M. Thorpe and P.M. Duxbury, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 1999.  
 [11] G.G. Naumis, *Phys. Rev. B* **73**, 172202 (2006).  
 [12] G.G. Naumis, *J. of Non-Cryst. Solids* **352**, 4685 (2006).  
 [13] H. He and M.F. Thorpe, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2107 (1985).  
 [14] D. Selvanathan, W.J. Bresser and P. Boolchand, *Phys. Rev.* **B61**, 15061 (2000).  
 [15] P. Boolchand, *Vibrational Excitations in glasses: rigidity transition and Lamb-Mössbauer Factors*, in: *Insulating*

- and semiconducting glasses, ed. by P. Boolchand, World Scientific, Singapore, 2000.
- [16] Y. Wang, J. Wells, D.G. Georgiev, P. Boolchand, K. Jackson, M. Micoulaut, Phys. Rev. Lett. **87**,185503 (2001).
- [17] P. Lucas, E.A. King, A.D. Horner, S.K. Sundaram, J. of Non-Cryst. Solids 352,2067 (2006).
- [18] P. Lucas, J. of Phys.: Cond. Mat. 18, 5629 (2006).
- [19] P. Boolchand, D.G. Georgiev, T. Qu, F. Wang, L. Cai, S. Chakravarty, C.R. Chimie **5**, 713 (2002).
- [20] G.G. Naumis, Phys. Rev.B **61**, R9205 (2000).
- [21] A. Huerta, G.G. Naumis, Phys. Rev. Lett. **90**, 145701 (2003).
- [22] G.G. Naumis, Phys. Rev. E **71**, 026114 (2005).
- [23] A. Huerta, G. G. Naumis, Phys. Lett. **A299**, 660 (2002).
- [24] A. Huerta, G.G. Naumis, Phys. Rev. B **66**, 184204 (2002).
- [25] Fermi E., Pasta J. and Ulam S., Los Alamos report L.A.1940, Enrico Fermi, Collected Papers II (1955), Univ. Chicago Press, Chicago (1965).
- [26] M. Toda, *Theory of Non-Linear Lattices*, (Springer-Verlag, Berlin, 1988).
- [27] D.K. Campbell, S. Flach, Y.S. Kivshar, Physics Today, January **43** (2004) .
- [28] J. Ford, J. Math. Phys. **2**, 387 (1961).
- [29] R. Reigada, A. Sarmiento, K. Linderberg, Phys. Rev. E **64**, 066113 (2001).
- [30] R. Reigada, A. Sarmiento, K. Linderberg, Phys. Rev. E **64**, 066608 (2001).
- [31] A. Ponomo, in: *Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems*, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on International Summer School on Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems Cargèse, Corsica 18–30 August 2003, Vol. 182 (Springer Netherlands, Amsterdam, 2005) p. 431.
- [32] I. Cerón, G.G. Naumis, F. Salazar, and C. Wang Phys. Lett. A **337**, 141 (2005).
- [33] S. Lepri, R. Livi, A.Politi, arXiv: cond. mat./0112193 v2 (2003).
- [34] F. Piazza, S. Lepri, R. Livi, J. Phys. A: Math Gen. **34**, 9803 (2001).
- [35] K. Ishii, Suppl. Prog. Theor. Phys. **45**, 56 (1970).

# Bibliografía

- [Campbell 2004] D.K. Campbell, S. Flach, Y.S. Kivshar, *Physics Today*, January **43** (2004) .
- [Cerón 2005] I. Cerón, G. G. Naumis, F. Salazar, and C. Wang *Phys Lett. A* **337**, 141 (2005).
- [Chaikin 1995] P. M. Chaikin, T. C. Lubensky. *Principles of condensed matter physics*. Cambridge University Press (1995).
- [Elliot 1984] Elliott, S. R. "*Physics of Amorphous Materials*", Longman Scientific and Technical, England (1984).
- [Fermi 1965] Fermi E., Pasta J. and Ulam S., Los Alamos report L.A.1940, Enrico Fermi, *Collected Papers II* (1955), Univ. Chicago Press, Chicago (1965).
- [Ford 1961] J. Ford, *J. Math. Phys.* **2**, 387 (1961).
- [Fowles 1970] Fowles, Grant R. *Analytical mechanics*. Editorial Holt, Nueva York, 1970.
- [Goldstein 1972] Goldstein, Herbert. *Mecánica clásica*. Editorial Aguilar, Madrid 1972.
- [Huerta 2003] Huerta, A. "*Estudio sobre el comportamiento vítreo inducido por rigidez; aproximación computacional usando modelos simples de asociación de partículas*", Tesis doctorado (2003).
- [Ishii 1970] K. Ishii, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **45**, 56 (1970).
- [Kittel 1996] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, 1996.
- [Landau 2002] Landau, L. D., Lifshitz E. M. *Mecánica, Vol. 1 del Curso de Física Teórica*, segunda edición, editorial Reverté, España 2002.
- [Limas 2005] I. Limas Cerón. "*Estudio de oscilaciones no-lineales en sistemas no-periódicos*". Tesis de licenciatura (2005).

- [N. Recipes 2002] William H. Press, Saul A. Teukolsy. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press (2002).
- [Naumis 1998] Naumis, G. G. “Modelling of growth and agglomeration processes leading to various non-crystalline materials”, *J. Non-Cryst. Solids* **232-234**,600-606 (1998).
- [Naumis 2003] Naumis, G. G. “Nuevas tecnologías que surgen del desorden: los materiales amorfos”, *Ciencia Revista A. M. C.* 54, 4-9 (2003).
- [Naumis 2005] García Naumis, Gerardo. “Ser flexible o rígido: un problema de la naturaleza”. *Revista Digital Universitaria* [en línea]. 10 de julio 2005, Vol. 6, No. 7.
- [Naumis 2006a] G.G. Naumis, *Phys. Rev.* **B 73**, 172202 (2006).
- [Naumis 2006b] G.G. Naumis, *J. of Non-Cryst. Solids* **352**, 4685 (2006).
- [Phillips 1996] J.C. Phillips, *Rep. Prog. Phys.* **59** 1133 (1996).
- [Piazza 2001] F. Piazza, S. Lepri, R. Livi, *J. Phys. A: Math Gen.* **34**, 9803 (2001).
- [Ponno 2005] A. Ponno, in: *Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems*, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on International Summer School on Chaotic Dynamics and Transport in Classical and Quantum Systems Cargèse, Corsica 18–30 August 2003, Vol. 182 (Springer Netherlands, Amsterdam p. 431) (2005).
- [Reichl 1998] L. E. Reichl, *A modern Course in Statistical Physics*. John Wiley & Sons Inc. (1998).
- [Reigada 2001a] R. Reigada, A. Sarmiento, and K. Lindenberg, *Phys. Rev.* **E 64**,066608 (2001).
- [Reigada 2001b] R. Reigada, A. Sarmiento, K. Linderberg, *Phys. Rev.* **E 64**, 066113 (2001).
- [Thorpe 1999] M. F. Thorpe and P. M. Duxbury. “*Rigidity Theory and Applications*”, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York (1999).
- [Toda 1988] Toda, *Theory of Non-Linear Lattices*, Springer-Verlag, Berlin (1988).
- [Zallen 1998] Zallen, “*The physics of Amorphous Solids*”, John Wiley & Sons, New York (1998).