



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

FACULTAD DE CIENCIAS

LA TEORÍA DE DEBYE PARA SISTEMAS DE  
OSCILADORES EN REDES COMPLEJAS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

P R E S E N T A :

VÍCTOR MANUEL REZA ESTRADA

TUTOR

DR. FRANCISCO JAVIER SEVILLA PÉREZ



CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., 2023



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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.

1. Datos del alumno.

Víctor Manuel Reza Estrada  
Universidad Nacional Autónoma de México  
Facultad de Ciencias  
Física  
No. Cuenta 313154287

2. Datos del asesor.

Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez  
Instituto de Física, UNAM  
Departamento de Sistemas Complejos

3. Datos del jurado asignado.

Presidente: Dra. Patricia Goldstein Menache (FC)  
Vocal: Dr. Víctor Manuel Romero Rochín (IF)  
Secretario: Dr. Francisco Javier Sevilla Pérez (IF)  
Suplente: Dr. José Luis Mateos Trigos (IF)  
Suplente: Dra. Vicenta Sánchez Morales (FC)

4. Datos de la tesis.

La teoría de Debye para sistemas de osciladores en redes complejas  
106 p.  
2023.

# Dedicatoria

A mi madre Ana María, mi fuente de fortaleza. La fe que has depositado en mí ha impulsado a perseguir mis sueños y anhelos. Gracias por tu amor incondicional.

A mi padre Victor Reza, por ser mi ejemplo de vida. Tu amor y apoyo constante han sido fundamentales en mi camino para forjarme como físico y como persona.

A mi hermano José Carlos, mi compañero de aventuras y confidente. Tu presencia constante me ha dado la seguridad para enfrentar los desafíos que se me han presentado. Gracias por ser mi apoyo incondicional y por creer en mí incluso cuando ni yo mismo lo hacía.

A la memoria de mi abuela Ofelia, quien siempre estuvo presente en mi vida con su amor incondicional. Tu partida dejó un vacío en mi corazón, pero tu legado de amor y enseñanzas perdura en cada logro que alcanzo. Te dedico este trabajo como prueba de gratitud por todo lo que me diste.

Este trabajo es el resultado de un camino lleno de altibajos, pero también de aprendizaje y crecimiento personal. A cada uno de ustedes, gracias por ser mi apoyo constante y por creer en mí. Su amor y apoyo han sido los cimientos sobre los cuales he construido mis logros.



# Agradecimientos

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), por brindarme la oportunidad de formarme como físico.

Un profundo agradecimiento al Dr. Francisco Javier Sevilla, cuyas enseñanzas, y constante apoyo han sido fundamentales en mi desarrollo tanto como físico como persona. Su guía ha motivado a seguirme superando.

Asimismo, quiero agradecer a la Dra. Patricia Goldstein, al Dr. Víctor Romero, al Dr. José Luis Mateos y a la Dra. Vicenta Sánchez por su valioso tiempo, observaciones y correcciones en el proceso de desarrollo de esta tesis. Sus aportes han contribuido significativamente a enriquecer el contenido de mi trabajo.

Un agradecimiento especial al M. en C. Ivan Torres, quien generosamente compartió conmigo un algoritmo importante para el desarrollo de algunas redes que se exploran en esta tesis.

Por último, deseo agradecer a mis amigos en general, y especialmente a Alejandro García Villegas y Diana Karen Vigueras. Su apoyo incondicional y su amistad a lo largo de los años han sido un pilar fundamental durante este arduo proceso.



# Glosario

**Coherencia cuántica:** Fenómeno cuántico que hace referencia al comportamiento ondulatorio de las partícula, es decir, al hecho de que una partícula se encuentre superposición de los posibles estados.

**Ensamble canónico:** Ensamble estadístico, correspondiente a un sistema termodinámico aislado, es decir, sin intercambio de energía ni de partículas.

**Ensamble gran canónico:** Ensamble estadístico, correspondiente a un sistema termodinámico donde se permite el intercambio de energía y de partículas.

**Ensamble mircocanónico:** Ensamble estadístico, correspondiente a un sistema termodinámico en el cual se permite el intercambio de energía pero no de partículas.

**Función de estado:** Función que permite conocer los estados de equilibrio de un sistema termodinámico en términos de las variables que caracterizan dicho sistema.

**Potencial termodinámico:** Función de estado que describen la evolución del sistema en términos de la energía.

**Pared:** Son las fronteras que delimitan un sistema termodinámico, pueden ser abstractas o físicas y se dividen según su función. Por ejemplo, (1) paredes rígidas no permiten que el sistema se deforme, adiabáticas las cuales no permiten el paso de energía en forma de calor, o abstractas como el espacio que encierre cierto lugar geométrico.

**Proceso adiabático:** Proceso termodinámico en el cual no hay el cambio de calor en el sistema y su exterior.

**Transición de fase:** Son cambios en el comportamiento de un sistema que ocurren de manera discontinua.



# Índice de figuras

|   |    |
|---|----|
| 2.1. Ejemplos de microestados . . . . .   | 4  |
| 2.2. Representación de una cadena lineal monoatómica con condiciones periódicas . . . . . | 20 |
| 2.3. Espectro de frecuencias analítico de la cadena lineal monoatómica. . .               | 21 |
| 2.4. Espectro de frecuencias numérico de la cadena lineal monoatómica. . .                | 24 |
| 2.5. Energía interna de la cadena lineal monoatómica obtenido numéricamente. . . . .      | 29 |
| 2.6. Entropía de la cadena lineal monoatómica obtenido numéricamente. . .                 | 30 |
| 2.7. Capacidad calorífica de la cadena lineal monoatómica obtenido numéricamente. . . . . | 32 |
|   |    |
| 3.1. Ejemplos de gráficas. . . . .  | 42 |
| 3.2. Ejemplos de gráficas regulares. . . . .  | 43 |
| 3.3. Ejemplo de gráfica completa. . . . .   | 44 |
| 3.4. Ejemplos de redes $G_{WS}$ a primeros vecinos . . . . .                              | 52 |
| 3.5. Ejemplos de redes $G_{WS}$ a segundos vecinos . . . . .                              | 52 |
| 3.6. Distribuciones de grado para redes $G_{WS}(2000, 2, P)$ . . . . .                    | 53 |
| 3.7. Distribuciones de grado para redes $G_{WS}(2000, 4, P)$ . . . . .                    | 53 |
| 3.8. Ejemplos de redes $G_{NWS}$ a primeros vecinos . . . . .                             | 54 |
| 3.9. Ejemplos de redes $G_{NWS}$ a segundos vecinos . . . . .                             | 54 |
| 3.10. Distribuciones de grado para redes $G_{NWS}(2000, 2, P)$ . . . . .                  | 55 |
| 3.11. Distribuciones de grado para redes $G_{NWS}(2000, 4, P)$ . . . . .                  | 55 |
| 3.12. Ejemplos de redes de árboles de Cayley $S_C$ . . . . .                              | 57 |
| 3.13. Distribuciones de grado para redes $S_C(5, 5, P)$ . . . . .                         | 58 |
| 3.14. Ejemplos de redes $G_{BA}$ . . . . .  | 59 |
| 3.15. Distribuciones de grado para redes $G_{BA}$ . . . . .                               | 60 |
|   |    |
| 4.1. Espectros de frecuencias de redes $G_{WS}$ con distintas probabilidades. . .         | 65 |
| 4.2. Espectros de frecuencias de redes $G_{NWS}$ con distintas probabilidades. . .        | 66 |
| 4.3. Espectros de frecuencias de redes $S_C$ con distintas probabilidades. . .            | 67 |
| 4.4. Espectros de frecuencias de redes $G_{BA}$ con distintas probabilidades. . .         | 69 |
| 4.5. Espectros de frecuencias de redes $G_{WS}$ con distinto número de nodos. . .         | 70 |
| 4.6. Espectros de frecuencias de redes $G_{NWS}$ con distinto número de nodos. . .        | 70 |
| 4.7. Espectros de frecuencias de redes $S_C$ con distinto número de nodos. . .            | 71 |
| 4.8. Espectros de frecuencias de redes $G_{BA}$ con distinto número de nodos. . .         | 71 |

|   |     |
|---|-----|
| 4.9. Energía interna de redes $G_{WS}$ . . . . .  | 74  |
| 4.10. Energía interna de redes $G_{NWS}$ . . . . .  | 74  |
| 4.11. Energía interna de redes $S_C$ . . . . .  | 75  |
| 4.12. Energía interna de redes $G_{BA}$ . . . . .   | 76  |
| 4.13. Entropía de redes $G_{WS}$ . . . . .  | 79  |
| 4.14. Entropía de redes $G_{NWS}$ . . . . .   | 79  |
| 4.15. Entropía de redes $S_C$ . . . . .   | 80  |
| 4.16. Entropía de redes $G_{BA}$ . . . . .  | 80  |
| 4.17. Distintas configuraciones de una red $G_{NWS}$ pequeña . . . . .  | 81  |
| 4.18. Capacidad calorífica de redes $G_{WS}$ . . . . .  | 83  |
| 4.19. Capacidad calorífica de redes $G_{NWS}$ . . . . .   | 84  |
| 4.20. Capacidad calorífica de redes $S_C$ . . . . .   | 84  |
| 4.21. Capacidad calorífica de redes $G_{BA}$ . . . . .  | 85  |
| 4.22. Energía interna de redes $G_{WS}$ con número de nodos variable. . . . .   | 86  |
| 4.23. Entropía de redes $G_{WS}$ con número de nodos variable. . . . .  | 86  |
| 4.24. Capacidad calorífica de redes $G_{WS}$ con número de nodos variable. . . . .                                      | 87  |
| 4.25. Energía interna de redes $G_{NWS}$ con número de nodos variable. . . . .  | 87  |
| 4.26. Entropía de redes $G_{NWS}$ con número de nodos variable. . . . .   | 87  |
| 4.27. Capacidad calorífica de redes $G_{NWS}$ con número de nodos variable. . . . .                                     | 88  |
| 4.28. Energía interna de redes $S_C$ con número de nodos variable. . . . .  | 88  |
| 4.29. Entropía de redes $S_C$ con número de nodos variable. . . . .   | 88  |
| 4.30. Capacidad calorífica de redes $S_C$ con número de nodos variable. . . . .   | 89  |
| 4.31. Energía interna de redes $G_{BA}$ con número de nodos variable. . . . .   | 90  |
| 4.32. Entropía de redes $G_{BA}$ con número de nodos variable. . . . .  | 90  |
| 4.33. Capacidad calorífica de redes $G_{BA}$ con número de nodos variable. . . . .                                      | 90  |
|   |     |
| A.1. Comparativa de la energía interna de redes $G_{WS}$ con los modelos analíticos de Debye y Einstein. . . . .        | 96  |
| A.2. Comparativa de la energía interna de redes $G_{NWS}$ con los modelos analíticos de Debye y Einstein. . . . .       | 96  |
| A.3. Comparativa de la energía interna de redes $S_C$ con el modelo de Einstein. . . . .                                | 97  |
| A.4. Comparativa de la energía interna de redes $G_{BA}$ con el modelo de Einstein. . . . .                             | 97  |
| A.5. Comparativa de la entropía de redes $G_{WS}$ con los modelos analíticos de Debye y Einstein. . . . .               | 98  |
| A.6. Comparativa de la entropía de redes $G_{NWS}$ con los modelos analíticos de Debye y Einstein. . . . .              | 98  |
| A.7. Comparativa de la entropía de redes $S_C$ con el modelo de Einstein. . . . .                                       | 99  |
| A.8. Comparativa de la entropía de redes $G_{BA}$ con el modelo de Einstein. . . . .                                    | 100 |
| A.9. Comparativa de la capacidad calorífica de redes $G_{WS}$ con los modelos analíticos de Debye y Einstein. . . . .   | 100 |
| A.10. Comparativa de la capacidad calorífica de redes $G_{NWS}$ con los modelos analíticos de Debye y Einstein. . . . . | 101 |
| A.11. Comparativa de la capacidad calorífica de redes $S_C$ con el modelo de Einstein. . . . .                          | 101 |

A.12. Comparativa de la capacidad calorífica de redes  $G_{BA}$  con el modelo de Einstein. . . . . 102



# Índice general

|  |           |
|--|-----------|
| Dedicatoria  | III       |
| Agradecimientos  | V         |
| Glosario   | VII       |
| Índice de figuras  | IX        |
| <b>1. Introducción</b>   | <b>1</b>  |
| <b>2. Marco Teórico</b>  | <b>3</b>  |
| 2.1. Breve revisión de Física Estadística . . . . .  | 3         |
| 2.2. La cadena cristalina monoatómica . . . . .  | 18        |
| 2.3. Modos normales . . . . .  | 22        |
| 2.4. Termodinámica de la cadena lineal monoatómica . . . . .   | 26        |
| 2.4.1. La energía interna . . . . .  | 28        |
| 2.4.2. La entropía . . . . .   | 29        |
| 2.4.3. Capacidad calorífica . . . . .  | 30        |
| 2.5. El modelo de Einstein . . . . .   | 32        |
| 2.6. El modelo de Debye . . . . .  | 33        |
| <b>3. Breve introducción a la Teoría de Gráficas</b>   | <b>41</b> |
| 3.1. Teoría espectral de gráficas . . . . .  | 46        |
| 3.2. Redes complejas . . . . .   | 48        |
| 3.3. Redes de mundo pequeño: Modelo de Watts-Strogatz . . . . .  | 49        |
| 3.3.1. Redes WS . . . . .  | 51        |
| 3.3.2. Redes NWS . . . . .   | 54        |
| 3.4. Árboles de Cayley complejos . . . . .   | 56        |
| 3.5. Redes libres de escala: Modelo de Barabási-Albert . . . . .   | 58        |
| <b>4. Efectos de la estructura de redes complejas en la termodinámica de osciladores lineales acoplados.</b> | <b>61</b> |
| 4.1. Espectros de frecuencias . . . . .  | 64        |
| 4.2. Energía interna de osciladores dispuestos en redes . . . . .  | 71        |
| 4.3. Entropía de osciladores dispuestos en redes. . . . .  | 76        |
| 4.4. Capacidad calorífica de osciladores dispuestos en redes . . . . .                                       | 81        |

|  |           |
|--|-----------|
| 4.5. Parámetros termodinámicos en redes con distinto número de nodos . | 85        |
| <b>5. Conclusiones</b>   | <b>93</b> |
| <b>Apéndice A. Comparativa con lo modelos de Debye y Einstein</b>      | <b>95</b> |

# 1 Introducción

Actualmente, uno de los conceptos que ha tomado gran relevancia por la efectividad al describir fenómenos donde hay elementos que interactúan entre sí, es el de “sistema complejo”. Algunos ejemplos de estos sistemas, que se presentan de manera cotidiana, son los ecosistemas, las organizaciones económicas, los sistemas de telecomunicaciones, *v. gr.*, el internet y el cerebro humano. En pocas palabras un sistema complejo es un sistema con muchas componentes, en el cual emergen fenómenos colectivos como consecuencia de la interacción entre ellas. En particular, muchos de los sistemas complejos se pueden describir con gráficas, en estos casos a las gráficas se les suele llamar “redes complejas” pues se presentan particularidades en su estructura que permiten extraer información relevante de un sistema.

Por otro lado, cuando se consideran osciladores armónicos acoplados generalmente se viene a la mente una cadena con muchas masas y muelles el cual se resuelve con métodos empleados en Mecánica Clásica, ya sea obteniendo el Lagrangiano del sistema y encontrando sus ecuaciones de movimiento, desde el formalismo Hamiltoniano, o bien, resolver mediante el método de los modos normales. Sin embargo, estos sistemas pueden ser tratados como redes, por lo que inmediatamente se cae en la necesidad de preguntarse no solo por la dinámica individual de cada constituyente sino que también de su comportamiento colectivo.

Si bien, el análisis termodinámico de un conjunto de osciladores armónicos acoplados no es una idea nueva, la novedad de introducir el enfoque de redes a estos sistemas físicos permitió explorar la estrecha relación entre la estructura de red y su comportamiento termodinámico, al menos para las redes aquí empleadas.

Para llevar a cabo el estudio antes mencionado, en el capítulo dos se realizó un breve, pero necesario, repaso de Termodinámica Estadística y, a manera de motivación, se estudió el sólido cristalino unidimensional en la aproximación armónica, a partir de este sistema físico se generaliza para incorporar los modelos de redes complejas en sistemas de osciladores armónicos acoplados.

Luego, en el capítulo tres, se introdujeron los conceptos básicos así como algunos resultados de Teoría de redes, con el fin de tener los fundamentos necesarios para entender matemáticamente que son las redes.

Posteriormente en el capítulo cuatro, y haciendo uso de redes, se llevó a cabo un análisis detallado de la estructura interna de los sistemas de osciladores acoplados (espectros de frecuencias) y con esta información se pudieron hallar las propiedades termodinámicas en estado de equilibrio de dichos sistemas.

Si bien, se procuró que este trabajo fuese lo más completo para evitar ambigüedades o “cabos sueltos” para el análisis del capítulo cuatro, también es cierto que se omitieron muchos resultados en el estudio de redes pues, para los propósitos del presente trabajo, solo se permitió desarrollar el caso más simple de red, pero si se considera que existen redes en las cuales se puede incluir efectos disipativos o ponderar de distinta manera las interacciones haciendo uso de redes con peso, entonces queda mucho campo por explorar para intentar introducir estas maravillosas ideas en sistemas reales y mucho más complicados de la física.

## 2 Marco Teórico

### 2.1. Breve revisión de Física Estadística

La *Física Estadística* o *Mecánica Estadística* es un formalismo que tiene como propósito describir el comportamiento macroscópico de un sistema partiendo de las propiedades de sus constituyentes microscópicos, haciendo uso de la probabilidad y la estadística; en particular se abordará la *Termodinámica Estadística*, que no es más que usar los métodos matemáticos de la *Física Estadística* para el análisis de sistemas en **equilibrio termodinámico**.

Dicho de otra manera, cuando se aborda un sistema desde este formalismo lo que se plantea es encontrar una forma en la que se pueda reducir el número de variables de manera substancial<sup>1</sup> partiendo, como ya se dijo, de las características de sus componentes. Por ejemplo, los gases son sistemas que poseen un número exorbitantemente grande de moléculas, en vez de resolver la dinámica de todas y cada una de las partículas, se pueden modelar de manera macroscópica con unas cuantas variables como, la temperatura, el volumen, la presión y quizás otras más; considerando que el número de moléculas es del orden de  $10^{23}$ , entonces el número de variables a contemplar ha disminuido notablemente.

Es necesario señalar que la *Termodinámica Estadística* se puede dividir en dos regímenes, a saber, la **Termodinámica Estadística Clásica** (CST por sus siglas en inglés Classical Statistical Thermodynamics) y la **Termodinámica Estadística Cuántica** (QST por sus siglas en inglés Quantum Statistical Thermodynamics), la principal diferencia entre ambos regímenes es que el primero no toma en cuenta el fenómeno de **coherencia cuántica** de los constituyentes mientras que el segundo sí, consúltese [1]. Para los propósitos del presente trabajo solo se hará uso de la CST.

Como pasa en casi todos los campos de la física, no existe un único método para desarrollar un esquema teórico y la *Termodinámica Estadística* no es la excepción, en particular se usará el método de la **distribución más probable**, para deducir algunas propiedades importantes de este esquema. No hay una razón en especial para la elección de este método más que, a consideración mía, es sencilla de explicar. Esta

---

<sup>1</sup>Siempre y cuando las nuevas variables describan su comportamiento termodinámico correctamente

sección está basada en las referencias [1, 2, 3, 4, 5], donde el lector puede encontrar un panorama más amplio de este formalismo.

De manera general, en un sentido macroscópico, un **estado del sistema** o simplemente **estado** es una configuración del sistema de interés, es decir, se han especificado los valores de las variables que lo caracterizan. Si se trata de un sistema termodinámico, entonces el estado del sistema se acostumbra a llamar **estado termodinámico**, más aún, si sus **variables termodinámicas** poseen un valor fijo en el tiempo cuando las condiciones externas se mantienen sin cambios, entonces el estado termodinámico es llamado **estado de equilibrio**. A manera de ejemplo, considérese un gas ideal, cuyas variables que lo caracterizan son la presión, el volumen y la temperatura,  $\{P, V, T\}$ , mediante la ecuación de gas ideal

$$PV = N_T K_B T$$

donde  $N_T$  es el número de partículas que constituyen el gas y  $K_B$  es una constante, entonces, ejemplos de estados termodinámicos son  $\left\{1[N/m], 1[m^3], \frac{1}{N K_B}[K]\right\}$ ,  $\{5[N/m], 3N K_B[m^3], 15[K]\}$ , donde  $N$  son Newtons,  $m$  son metros. y  $K$  son Kelvin.

Ahora, se introducirán las siguientes dos definiciones que serán fundamentales:

- i) **microestado**: Es una configuración del sistema en la que el valor de todas las variables de los constituyentes microscópicos están especificados.
- ii) **macroestado**: Es un estado termodinámico de equilibrio del sistema macroscópico.

Note que, dado un macroestado, existen varios microestados que son **compatibles** con éste, es decir, para un sistema en el cual se requiere medir el valor de una variable termodinámica, existen distintas configuraciones microscópicas que tienen como resultado el mismo valor de la variable macroscópica de interés.

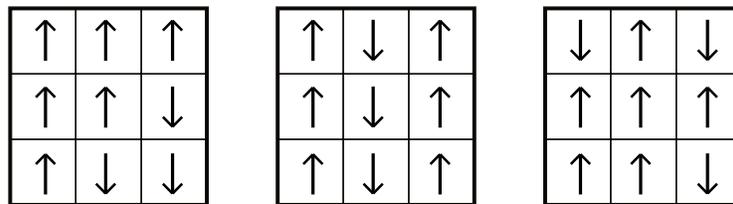


Figura 2.1: Tres posibles microestados de un sistema de nueve partículas con espín, todos compatibles con un mismo macroestado. En los tres casos el espín neto o macroestado es espín “arriba”.

Para ejemplificar lo antes mencionado considérese un sistema pequeño, pero que clarifica lo supuesto, de nueve partículas cuya única propiedad que pueden poseer son “espín arriba” o bien “espín abajo”, supóngase que se tienen los microestados que

muestran en la figura 2.1, todos los microestados son diferentes, sin embargo, desde la perspectiva termodinámica, el sistema posee el mismo macroestado, que en este caso es tres “espín arriba” neto.

Comúnmente existen tres descripciones para abordar un problema desde la *Física Estadística*, cada una asociada a un **potencial termodinámico** y a las características del sistema, es decir, cada una es más o menos adecuada para describir los fenómenos termodinámicos en función de las variables con las que se modele el sistema de interés, dichas descripciones son: el **ensamble microcanónico**, el **ensamble canónico** y el **ensamble gran canónico**.

Por razones que se aclararán más adelante, solo se revisará el ensamble gran canónico. Para hacer una presentación autocontenida es necesario introducir la idea de **ensamble estadístico**: considérese que el sistema macroscópico de interés es un **sistema aislado**, es decir, que no puede intercambiar energía ni materia con sus **alrededores**. Supóngase que el sistema de interés se encuentra en un macroestado determinado y que a su vez consta de  $A$  subsistemas<sup>2</sup> cuyas “paredes” pueden intercambiar energía y partículas, entonces se postula que *los microestados compatibles, asociados al macroestado, tienen la misma probabilidad de manifestarse*, al conjunto de los  $A$  subsistemas que cumplen con estas características se llama ensamble. Es de resaltar que la elección de como se ha de “dividir” el sistema macroscópico en subsistemas es arbitraria y dependerá de las consideraciones que se hagan sobre el sistema.

Hasta este punto, no hay razón para pensar que los microestados que posee algún sistema necesariamente se distribuyen de manera uniforme<sup>3</sup>, es decir, se ha de postular que existen sistemas que tengan más microestados que den como resultado un macroestado que otros, esta es precisamente la esencia del método de la distribución más probable, que consiste en encontrar qué macroestado tiene el mayor número de microestados compatibles.

Aunque quizás sea repetitivo, es necesario mencionar que el estado en el que pueda encontrarse uno de los subsistemas de  $A$  y un microestado no son lo mismo, el primero sólo define los valores particulares que han tomado las variables de un sólo subsistema, mientras que el segundo define los valores que poseen todas las variables que caracterizan a cada uno de los constituyentes microscópicos del sistema. Una vez aclarado lo anterior, se ha de puntualizar como se caracterizarán los subsistemas en el ensamble gran canónico.

Una vez aclarado lo anterior, se ha de puntualizar como se caracterizarán los subsistemas en el ensamble gran canónico. Primero se supondrá que todos los subsis-

---

<sup>2</sup>Aquí se ha supuesto que cada subsistema es lo suficientemente grande para ser considerado un sistema termodinámico.

<sup>3</sup>Volviendo al ejemplo del sistema de nueve partículas con espín, se puede ver que la manera en que se distribuyen los microestados depende enteramente del macroestado en el que se encuentre el sistema macroscópico.

temas poseen el mismo volumen  $V_A$ , además el número de partículas se denotará por  $N$ , finalmente,  $E_j$  serán las etiquetas que tendrán las energías<sup>4</sup> que pueden poseer los subsistemas, esto debido a la naturaleza<sup>5</sup> del ensamble. Así, se utilizará  $E_{N,j}$  para etiquetar al subsistema que tiene  $N$  partículas y energía  $E_j$ .

Supóngase que de los  $A$  subsistemas hay  $m$  de ellos que poseen el igual número de partículas y tienen el mismo valor de energía, entonces a  $m$  se le llama **número de ocupación** y se denota con  $a_{N,j}$ . Al conjunto de números de ocupación se denota como  $a = \{a_{N,j}\}$  y se llama simplemente **ocupación**. Es de suma importancia señalar que  $a$  es un conjunto ordenado, así el primer valor<sup>6</sup> de  $a$  corresponderá al nivel de energía más bajo con el menor número de partículas, el siguiente valor corresponderá a la misma energía con el siguiente número de partículas más pequeño, o bien a la segunda energía más baja con el menor número de partículas, y así sucesivamente hasta que el último elemento del conjunto tendrá el valor más alto de energía de todos los subsistemas con el mayor número de partículas para dicha energía. Así, la ocupación  $a$  tiene la forma general

$$a = \{a_{q_1,j_1}, a_{q_2,j_1}, \dots, a_{q_k,j_1}, a_{r_1,j_2}, a_{r_2,j_2}, \dots, a_{s_{m-2},j_l}, a_{s_{m-1},j_l}, a_{s_m,j_l}\}. \quad (2.1)$$

Además, por la manera en que se han definido los número de ocupación se satisface que

$$A = \sum_N \sum_j a_{N,j}, \quad (2.2)$$

ya que cero es un valor permitido para los número de ocupación; esta expresión refleja el hecho que el número de subsistemas es fijo.

Para ejemplificar lo antes mencionado, supóngase que se tiene un sistema con seis subsistemas cuyas ocupaciones son

$$a = \{1, 2, 2, 1\},$$

$$a' = \{2, 1, 1, 2\},$$

aunque  $a$  y  $a'$  poseen los mismos elementos, físicamente son configuraciones diferentes ya que si  $E_1 < E_2 < E_3 < E_4$  son las energías que pueden adquirir los subsistemas, entonces la ocupación  $a$  indica que hay un subsistema con energía  $E_1$ , dos con energía  $E_2$ , dos más con energía  $E_3$  y finalmente uno con energía  $E_4$ ; por otro lado, para la ocupación  $a'$  hay dos subsistemas con energía  $E_1$ , uno con energía  $E_2$ , otro con energía  $E_3$  y dos con energía  $E_4$ . Nótese que en este ejemplo se ha tomado en cuenta una partícula en cada subsistema por simplicidad.

---

<sup>4</sup>Note que  $E_j = E_j(N, V)$ , además en lo sucesivo  $E_i < E_j$  si  $i < j$ .

<sup>5</sup>Más adelante se verá que el ensamble gran canónico está asociado al llamado gran potencial que es una función que define la energía del sistema a partir de los parámetros termodinámicos de volumen, temperatura y potencial químico

<sup>6</sup>de izquierda a derecha

Considérese lo siguiente, sea  $A$  el número de subsistemas y supóngase que se tiene una ocupación  $a$  dada, entonces de combinatoria se tiene que dichos subsistemas se pueden reordenar en  $A!$  formas y todas estas reordenaciones dan como resultado el mismo macroestado, tal como muestra en el ejemplo de las partículas con espín, más aún, se ha supuesto que hay subsistemas que pueden tener el mismo estado, en este caso hay reordenaciones que son indistinguibles que no deberán ser tomadas en cuenta, entonces se pueden contar cuántas configuraciones para la ocupación son posibles para obtener el mismo macroestado:

$$W_a = \frac{A!}{\prod_N \prod_j a_{N,j}!}. \quad (2.3)$$

Nótese que mientras mayor sea  $W_a$ , entonces dicha ocupación tiene una mayor cantidad de configuraciones “compatibles” con el macroestado, por lo que  $W_a$  brinda una medida de qué ocupación es más probable que se manifieste.

Es fácil ver que  $W_a$  siempre es positiva, pues únicamente se multiplican y dividen los factoriales de números naturales, además, es claro que  $A!$  es una cota superior para cualquier ocupación; luego, una función que es positiva definida y acotada superiormente alcanza su máximo. Por otro lado, la función logaritmo es diferenciable y monótonamente creciente, por lo que si se encuentra la ocupación  $a^*$  tal que  $\ln(W_a)$  es máximo, entonces dicha ocupación también maximiza  $W_a$ .

Debido a que es más fácil manipular

$$\ln(W_a) = \ln(A!) - \sum_N \sum_j \ln(a_{N,j}!), \quad (2.4)$$

entonces se maximizará la ecuación (2.4) bajo las siguientes restricciones correspondientes a un sistema aislado:

$$E = \sum_N \sum_j a_{N,j} E_j, \quad (2.5a)$$

$$N_T = \sum_N \sum_j a_{N,j} N, \quad (2.5b)$$

el hecho de que la energía total del sistema se conserve está descrito por la ecuación (2.5a) mientras que la (2.5b) indica que el número total de partículas no es variable.

Es así que para maximizar (2.4) se usará el método de los **multiplicadores de Lagrange**. Puesto que hay tres restricciones dadas por las ecuaciones (2.2), (2.5a) y

(2.5b), entonces se debe satisfacer la siguiente relación

$$0 = \left( \frac{\partial}{\partial a_{N,j}} \ln(W_a) \right)_{a_{N,j}^*} - \alpha \left( \frac{\partial}{\partial a_{N,j}} \sum_N \sum_j a_{N,j} \right)_{a_{N,j}^*} \quad (2.6)$$

$$- \beta \left( \frac{\partial}{\partial a_{N,j}} \sum_N \sum_j a_{N,j} E_j \right)_{a_{N,j}^*} - \gamma \left( \frac{\partial}{\partial a_{N,j}} \sum_N \sum_j a_{N,j} N \right)_{a_{N,j}^*},$$

donde  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$  son parámetros (multiplicadores de Lagrange) por determinar, estos parámetros carecen de significado físico por el momento, aunque más adelante lo tendrán, por ahora solo basta decir que  $\alpha$  está relacionado con los números de ocupación pues acompañan a esa restricción, así como  $\beta$  estará relacionado con la energía y  $\gamma$  con el número de partículas. Simplificando la expresión anterior se tiene

$$\left( \frac{\partial \ln(A!)}{\partial a_{N,j}} - \frac{\partial \ln(a_{N,j}!)}{\partial a_{N,j}} \right)_{a_{N,j}^*} - \alpha - \beta E_j - \gamma N = 0. \quad (2.7)$$

Notando que  $\ln(a_{N,j}!)$  se puede aproximar por la **fórmula de Stirling** para valores grandes de  $a_{N,j}$ , es decir,

$$\begin{aligned} \ln(a_{N,j}!) &= \sum_{x=1}^{a_{N,j}} \ln(x) \approx \int_1^{a_{N,j}} \ln(x) dx \\ &= [x \ln(x) - x]_1^{a_{N,j}} \\ &= a_{N,j} \ln(a_{N,j}) - a_{N,j} + 1, \end{aligned}$$

esta aproximación es válida pues al tratarse de la distribución más probable, entonces cada  $a_{N,j}^*$  es mucho mayor que el resto de los elementos de cualquier otra ocupación, por lo que (2.7) se reduce a

$$- \ln(a_{N,j}^*) - \alpha - \beta E_j - \gamma N = 0, \quad (2.8)$$

o equivalentemente

$$a_{N,j}^* = e^{-\alpha} e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}. \quad (2.9)$$

Puesto que se debe satisfacer la ecuación (2.2) para cualquier ocupación y usando (2.9), entonces

$$\begin{aligned} A &= \sum_N \sum_j a_{N,j}^* \\ &= \sum_N \sum_j e^{-\alpha} e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N} \\ &= e^{-\alpha} \sum_N \sum_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}, \end{aligned}$$

obteniendo la siguiente relación funcional entre los parámetros  $\alpha, \beta$  y  $\gamma$ ,

$$e^{-\alpha} = \frac{A}{\sum_N \sum_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}, \quad (2.10)$$

de esta manera es fácil obtener al número de ocupación  $a_{N,j}^*$  en términos de los parámetros  $\beta$  y  $\gamma$ , dado por

$$a_{N,j}^* = \frac{A e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}{\sum_N \sum_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}. \quad (2.11)$$

Ya se han obtenido los números de ocupación  $a_{N,j}^*$  que maximizan  $W_a$ , es decir, para la distribución más probable, sin embargo, nada se ha dicho acerca del macroestado del sistema, para ello se hará el siguiente tratamiento. Dada una ocupación  $a$ , entonces  $\frac{a_{N,j}}{A}$  puede pensarse como la probabilidad<sup>7</sup> de hallar un subsistema con  $N$  partículas y energía  $E_j$ , sin embargo para hallar la probabilidad “global” de que un sistema se encuentre en el estado  $E_{N,j}$  sobre todas las posibles distribuciones se obtiene mediante la **media ponderada** para  $\frac{a_{N,j}}{A}$ , donde el peso de cada distribución está dado por  $W_a$ , esto en concordancia con el postulado de equiprobabilidad *a priori*.

Sea  $\mathcal{A}$ , el conjunto que contiene todas las posibles ocupaciones, entonces la probabilidad “global” de que un sistema se encuentre en el estado  $E_{N,j}$  está dada por,

$$P_{N,j} = \frac{\sum_{a \in \mathcal{A}} \frac{W_a a_{N,j}}{A}}{\sum_{a' \in \mathcal{A}} W_{a'}}, \quad (2.12)$$

donde se ha considerado el límite en el cual  $A \rightarrow \infty$  para que la dispersión de la media sea arbitrariamente estrecha. Considerando que la ocupación más probable  $a^*$  es aquella con un número de configuraciones mucho mayor que cualquier otra, es decir,

$$W_{a^*} \gg W_a; \quad a \in \mathcal{A} \setminus \{a^*\},$$

entonces las sumas en (2.12) pueden aproximarse por  $W_{a^*} a_{N,j}^*$  y  $W_{a^*}$ , respectivamente, de manera que

$$P_{N,j} \simeq \frac{W_{a^*} a_{N,j}^*}{A W_{a^*}},$$

por lo tanto se obtiene que

$$P_{N,j} = \frac{a_{N,j}^*}{A}.$$

Es así que la probabilidad de que un subsistema se encuentre en el estado  $E_{N,j}$  del macroestado cuya ocupación tiene un mayor número de configuraciones es

$$P_{N,j} = \frac{e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}{\sum_{N'} \sum_{j'} e^{-\beta E_{j'}} e^{-\gamma N'}}. \quad (2.13)$$

---

<sup>7</sup>Esta cantidad también es la fracción de subsistemas en el estado  $E_{N,j}$

Así pues, es natural preguntarse cuál será la energía promedio del sistema, entonces calculando el promedio sobre el ensamble se tiene

$$\bar{E} = \sum_N \sum_j E_j P_{N,j} = \sum_N \sum_j \frac{E_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}{\sum_{N'} \sum_{j'} e^{-\beta E_{j'}} e^{-\gamma N'}},$$

o reescribiendo el numerador

$$\bar{E} = \frac{-\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_N \sum_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}{\sum_{N'} \sum_{j'} e^{-\beta E_{j'}} e^{-\gamma N'}}, \quad (2.14)$$

en aras de la ecuación anterior se hará la siguiente definición

$$\Xi(\beta, \gamma, \{E_j\}) \equiv \sum_N \sum_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}, \quad (2.15)$$

donde a  $\Xi$  se le conoce como la **gran función de partición** o **función de partición macrocanónica**, entonces la energía promedio sobre el ensamble es simplemente

$$\bar{E} = -\frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial \beta}. \quad (2.16)$$

Hasta este punto nada más se ha dicho acerca de los parámetro  $\beta$  y  $\gamma$  pues solo habían sido utilizados como entes meramente matemáticos, sin embargo, para hacer una descripción completa hace falta determinarlos, para ello habrá que recurrir a la *Termodinámica*.

Puesto que la *Termodinámica* es un campo de conocimiento muy amplio, sería poco conveniente tratar de incluir todas las deducciones pertinentes de los resultados mostrados en esta sección, sin embargo en las referencias [6, 7, 8] pueden encontrarse dichos resultados con sus explicaciones detalladas.

Anteriormente, en esta misma sección se introdujo la noción de estado de equilibrio, este concepto es de suma importancia pues únicamente se tratarán sistemas que se encuentran en estados de equilibrio. Ahora es necesario introducir el concepto de **proceso termodinámico** o simplemente **proceso**, supóngase que inicialmente un sistema se encuentra en el estado de equilibrio  $X$  y después se perturba de tal manera que como resultado el sistema se encuentra en el estado de equilibrio  $Y$ , entonces se dice que el sistema ha realizado un proceso para cambiar del estado inicial  $X$  al estado final  $Y$ . Si en particular el estado inicial coincide con el estado final entonces se dice que el sistema ha realizado un **ciclo**.

Otro concepto clave es el de **función de estado**, supóngase que se conoce una función  $f(x_1, x_2, \dots, x_r) = 0$  donde  $x_1, x_2, \dots, x_r$  son variables termodinámicas del sistema, si  $f$  brinda como información los estados de equilibrio a los que puede acceder

el sistema entonces  $f$  se llama función de estado.

En la descripción de sistemas termodinámicos en equilibrio se acostumbra a usar la aproximación de **proceso cuasiestático**, esto significa que cuando el sistema cambia del estado de equilibrio inicial  $X$  al estado de equilibrio final  $Y$  existe un continuo de estados de equilibrio intermedios por lo cuales el sistema transita.

Es preciso destacar que, en general, existen dos tipos de procesos, los **reversibles** y los **irreversibles**. Se dice que un proceso, del estado  $X$  al estado  $Y$ , es reversible si es posible regresar al sistema del estado  $Y$  al estado  $X$  y simultáneamente los alrededores del sistema regresan a su estado inicial; un proceso que no es reversible entonces es irreversible. Pese a que en la naturaleza no existen los procesos reversibles, son una muy buena aproximación para describir la evolución de un sistema.

Ahora se puede presentar la **primera ley de la termodinámica**, esta ley es una forma de expresar la conservación de la energía<sup>8</sup> para sistemas termodinámicos, en particular para sistemas cerrados está dada por

$$\Delta U = Q - W, \quad (2.17)$$

donde  $U$  es la energía total que posee el sistema y generalmente se acostumbra a llamar **energía interna**,  $W$  representa el **trabajo mecánico** que realiza el sistema, es decir, la energía que puede absorber o ceder el sistema a sus alrededores siempre y cuando sea asociada a propiedades mecánicas<sup>9</sup> del sistema, y por último,  $Q$  es la letra que denota al **calor** y representa la cantidad de energía, absorbida o cedida, entre un sistema termodinámico y sus alrededores que no sea asociada a propiedades mecánicas ni químicas del sistema. A manera de comentario, cabe mencionar que está ley es puramente empírica, es decir, es un postulado del formalismo de la *Termodinámica*.

Puesto que únicamente se trabajarán con procesos cuasiestáticos, entonces, entre dos estados infinitesimalmente cerca, la ecuación (2.17) toma la forma diferencial

$$dU = \delta Q - \delta W,$$

donde se ha usado el símbolo  $\delta$  para denotar que, las diferenciales de calor y de trabajo no son exactas, es decir, el proceso que lleve a cabo un sistema termodinámico para llegar de un estado inicial a uno final, es relevante para determinar el trabajo y el calor.

Tomando en cuenta que los subsistemas del sistema termodinámico son, a su vez, sistemas termodinámicos abiertos, es decir, permiten el intercambio de partículas, entonces la primera ley para los subsistemas toma la forma siguiente

$$dU = \delta Q - \delta W + \mu dN, \quad (2.18)$$

---

<sup>8</sup>Esto no quiere decir que la energía interna del sistema se conserve en el sistema necesariamente sino que más bien, lo que indica es cuánta energía del sistema es cedida o en su caso absorbida cuando se ha realizado un proceso.

<sup>9</sup>Los fenómenos eléctricos y magnéticos (campos externos) que puedan afectar al sistema también son considerados fenómenos mecánicos desde la termodinámica

donde  $\mu$  es el **potencial químico** y  $dN$  es la cantidad partículas de dicha sustancia. Por simplicidad y para los propósitos del presente trabajo sólo se ha considerado una sustancia química pero los resultados aquí presentados son fácilmente generalizables a más sustancias.

Cabe aclarar que  $N$  es un número entero y hablar de la diferencial de un número entero no tiene mucho sentido, sin embargo, debe entenderse que en la práctica el número total de constituyentes es enorme en comparación con un solo constituyente, es así que  $dN$  debe pensarse como un cambio “pequeño” en el número de partículas en relación con el número total de partículas. Por ejemplo, supóngase que se tiene un gas que contiene un número de partículas del orden de  $10^{23}$ , si el subsistema  $i$  intercambia cinco partículas con el subsistema  $j$  entonces dicho cambio puede considerarse como infinitesimal en relación al número total de partículas.

Continuando con esta breve presentación, la **segunda ley de la termodinámica** establece que “*Un proceso cuyo único resultado sea convertir en trabajo el calor extraído de una fuente que está a la misma temperatura en todo momento es imposible. (Postulado de Kelvin)*” [9]. Como consecuencia del postulado anterior se introduce la existencia de una cantidad  $S$  llamada entropía, la concepción de entropía en *Termodinámica Clásica*, es la de una magnitud que indica cuánta energía del sistema no puede ser utilizada como trabajo [6, 7].

Es sabido que la entropía de un proceso entre estados de equilibrio infinitesimalmente cerca, se relaciona con el calor vía

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad (2.19)$$

donde  $dS$  es la diferencial, exacta, de la entropía y  $T$  es la temperatura absoluta. Dada la primera ley, entonces se tiene que

$$dS = \frac{dU + dW + \mu dN}{T}.$$

Considerando que el trabajo termodinámico únicamente está dado por las variable de presión y volumen, entonces se puede establecer la siguiente relación

$$dU = TdS - pdV + \mu dN, \quad (2.20)$$

donde  $U$  es la energía interna,  $T$  la temperatura del sistema,  $S$  la entropía,  $p$  la presión,  $V$  el volumen,  $\mu$  el potencial químico y  $dN$  es el número de partículas. Nótese que las variables termodinámicas  $T$ ,  $p$  y  $\mu$ , pueden determinarse directamente de la ecuación

(2.20) de la siguiente forma

$$T = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V,N}, \quad (2.21a)$$

$$p = - \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S,N}, \quad (2.21b)$$

$$\mu = \left( \frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S,V}. \quad (2.21c)$$

Recordando que  $E_j = E_j(N, V)$  y en virtud de la ecuación (2.21b), entonces la presión de cada subsistema está dada por

$$p_{N,j} = - \frac{\partial E_j}{\partial V}, \quad (2.22)$$

por lo que ahora se puede calcular la presión promedio del ensamble de manera análoga a como se hizo con la energía  $\bar{E}$

$$\bar{p} = \sum_N \sum_j \left( - \frac{\partial E_j}{\partial V} \right) P_{N,j} = \frac{1}{\beta} \sum_N \sum_j \frac{\partial E_j}{\partial V} \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial E_j},$$

y por regla de la cadena para derivadas parciales, entonces

$$\bar{p} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial V}. \quad (2.23)$$

Nótese que en la ecuación (2.16) y en la ecuación (2.23) aparece la función

$$f = \ln(\Xi), \quad (2.24)$$

para determinar los valores promedio del sistema, lo que indica su relevancia. Debe ser claro de (2.15) que

$$f = f(\beta, \gamma, \{E_j\}),$$

por lo que se puede obtener la diferencial de  $f$ , dada por

$$df = \frac{\partial f}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial f}{\partial \gamma} d\gamma + \sum_N \sum_j \frac{\partial f}{\partial E_j} dE_j, \quad (2.25)$$

la derivada parcial  $\frac{\partial f}{\partial \beta}$  es directa pues es la relación obtenida en (2.16), sin embargo,

aún no es claro el significado de las derivadas  $\frac{\partial f}{\partial \gamma}$  y  $\frac{\partial f}{\partial E_j}$ . Éstas son:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial \gamma} &= \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial \gamma} \\
&= \frac{1}{\Xi} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sum_N \sum_j e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N} \\
&= \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_j \frac{\partial}{\partial \gamma} (e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}) \\
&= \frac{1}{\Xi} \sum_N \sum_j (-N) e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N} \\
&= - \sum_N \sum_j N \left( \frac{e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}{\Xi} \right),
\end{aligned}$$

donde el factor de la derecha de la última igualdad no es otra cosa que la probabilidad  $P_{N,j}$ , véase ecuación (2.13), por lo tanto

$$\frac{\partial f}{\partial \gamma} = -\bar{N}, \quad (2.26)$$

es el negativo del número de partículas promedio. Por otra parte, la otra derivada parcial es

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial E_j} &= \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial E_j} \\
&= \frac{1}{\Xi} \frac{\partial}{\partial E_j} \sum_{N'} \sum_{j'} e^{-\beta E_{j'}} e^{-\gamma N'} \\
&= \frac{1}{\Xi} \sum_{N'} \sum_{j'} \frac{\partial}{\partial E_j} (e^{-\beta E_{j'}} e^{-\gamma N'}) \\
&= \frac{1}{\Xi} (-\beta) (e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}) \\
&= -\beta \left( \frac{e^{-\beta E_j} e^{-\gamma N}}{\Xi} \right),
\end{aligned}$$

obteniendo la relación

$$\frac{\partial f}{\partial E_j} = -\beta P_{N,j}. \quad (2.27)$$

Es así como la ecuación (2.25) toma la forma

$$df = -\bar{E}d\beta - \bar{N}d\gamma - \beta \sum_N \sum_j P_{N,j} dE_j, \quad (2.28)$$

si a la expresión anterior se le suman los términos  $d(\beta\bar{E})$ ,  $d(\gamma\bar{N})$  y haciendo uso de la linealidad del operador diferencial  $d$ , entonces

$$d(f + \beta\bar{E} + \gamma\bar{N}) = -\bar{E}d\beta - \bar{N}d\gamma - \beta \sum_N \sum_j P_{N,j} dE_{N,j} + d(\beta\bar{E}) + d(\gamma\bar{N}),$$

si además se usa la regla del producto en los dos últimos términos de la expresión anterior, se obtiene

$$d(f + \beta\bar{E} + \gamma\bar{N}) = \beta d\bar{E} + \gamma d\bar{N} - \beta \sum_N \sum_j P_{N,j} dE_j.$$

Puesto que los sistemas que se han tratado aquí son sistemas de la termodinámica del equilibrio, entonces  $dE_j$ , al ser una diferencial exacta, puede considerarse como el trabajo mecánico de un proceso reversible (*cf.* [3]). Dado que el elemento de volumen es el mismo para los subsistemas, entonces

$$d(f + \beta\bar{E} + \gamma\bar{N}) = \beta d\bar{E} + \gamma d\bar{N} + \beta \sum_N \sum_j P_{N,j} p_{N,j} dV,$$

llegando a la expresión

$$d(f + \beta\bar{E} + \gamma\bar{N}) = \beta d\bar{E} + \gamma d\bar{N} + \beta \bar{p} dV. \quad (2.29)$$

Ahora se ha de hacer un postulado adicional para seguir con el desarrollo de este formalismo, en la literatura a veces se puede encontrar como el **Postulado de Gibbs**:

*El promedio sobre el ensamble de las propiedades termodinámicas de los subsistemas coincide con el valor de las variables macroscópicas del sistema,*

consúltese [1]. Entonces la ecuación (2.29) en términos de las variables macroscópicas es

$$d(f + \beta U + \gamma N) = \beta dU + \beta p dV + \gamma dN. \quad (2.30)$$

Ahora bien, reescribiendo la ecuación (2.20) de la siguiente manera

$$dS = \frac{1}{T} dU + \frac{p}{T} dV - \frac{\mu}{T} dN, \quad (2.31)$$

así, comparando (2.30) y (2.31), entonces, lo que se puede concluir es que  $dS$  es proporcional a  $d(f + \beta U + \gamma N)$ , sea  $C$  una constante de proporcionalidad, entonces

$$\beta = \frac{C}{T}; \quad \gamma = -\frac{C\mu}{T},$$

más aún  $C = K_B^{-1}$  donde  $K_B$  es la llamada constante de Boltzmann, *c.f.* [3], por lo que finalmente se obtiene que

$$\beta = \frac{1}{K_B T}, \quad (2.32a)$$

$$\gamma = -\frac{\mu}{K_B T}. \quad (2.32b)$$

Es así, como la gran función de partición queda completamente determinada y toma la forma siguiente

$$\Xi \equiv \sum_N \sum_j e^{-\frac{1}{K_B T}(E_j - \mu N)}, \quad (2.33)$$

usando la ecuación (2.32a) y regla de la cadena en (2.16), entonces

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{\partial T}{\partial \beta} \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial T} \\ &= \frac{1}{K_B \beta^2} \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial T} \\ &= K_B T^2 \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial T},\end{aligned}$$

obteniendo la expresión, final

$$\bar{E} = K_B T^2 \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial T}. \quad (2.34)$$

Cuando se mencionaron los tres ensambles más comunes en *Física Estadística* se dijo que éstos están asociados a potenciales termodinámicos, pero no se ahondo más en el tema, sin embargo para hacer la conexión entre termodinámica estadística y *Termodinámica clásica* es necesario aclarar a que se hacía referencia. Un tipo muy particular de funciones de estado son aquellas que se conoce como potenciales termodinámicos, que son funciones, con unidades de energía, que describen como evoluciona un sistema en términos de un conjunto de variables termodinámicas llamadas **variables naturales**, estas variables pueden determinarse a partir de las formas diferenciales del cada potencial. Usualmente, la energía interna  $U$  es una de las primeras variables termodinámicas que se utilizan para describir un sistema, en estos casos se dice que el sistema está en la **representación energética**, sin embargo no es la única variable que puede ser de interés y en algunas ocasiones puede no ser no la descripción más adecuada para algún sistema termodinámico, por esta razón se exhibirán algunos potenciales útiles

$$\begin{array}{ll} F = U - TS & \text{Energía Libre de Helmholtz,} \\ H = U + pV & \text{Entalpía,} \\ G = U + pV - TS & \text{Energía Libre Gibbs.}\end{array}$$

Además de los antes mencionados el potencial de mayor interés para la descripción de ensamble gran canónico será el llamado **potencial canónico** o **gran potencial** dado por

$$\Psi = U - TS - \mu N, \quad (2.35)$$

si además se considera que, para una sola especie química, el potencial químico se relaciona con la energía libre de Gibbs, vía  $G = \mu N$ , consúltese [7], y usando los potenciales anteriores se puede encontrar la siguiente relación

$$\Psi = F - \mu N = F - G,$$

por lo tanto

$$\Psi = -pV. \quad (2.36)$$

Si ahora se calcula la diferencial total de  $\Psi$ , entonces

$$\begin{aligned} d\Psi &= d(U - TS - \mu N) \\ &= dU - d(TS) - d(\mu N) \\ &= TdS - pdV + \mu dN - TdS - SdT - Nd\mu - \mu dN, \end{aligned}$$

por lo que la diferencial del gran potencial resulta en

$$d\Psi = -SdT - pdV - Nd\mu, \quad (2.37)$$

entonces son inmediatas las siguientes relaciones

$$S = - \left( \frac{\partial \Psi}{\partial T} \right)_{V, \mu}, \quad (2.38a)$$

$$p = - \left( \frac{\partial \Psi}{\partial V} \right)_{T, \mu}, \quad (2.38b)$$

$$N_i = - \left( \frac{\partial \Psi}{\partial N} \right)_{T, V}; \quad (2.38c)$$

invocando a la ecuación (2.23) y comparando con (2.38b) entonces se obtiene que

$$\frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial \ln(\Xi)}{\partial V} \right)_{T, \mu} = - \left( \frac{\partial \Psi}{\partial V} \right)_{T, \mu};$$

por lo que necesariamente se debe cumplir la relación

$$\Psi(V, T, \mu) = -K_B T \ln[\Xi(V, T, \mu)] \quad (2.39)$$

esta relación será clave pues permitirá la conexión entre *Termodinámica Estadística* y *Termodinámica* del sistema.

En este punto debe dejarse muy en claro que se ha trabajado con las propiedades de los subsistemas para conocer el comportamiento termodinámico del sistema, sin embargo esto no es lo que se planteó inicialmente, lo que realmente se busca es describir el sistema a partir de las propiedades de los constituyentes microscópicos. Antes de realizar la descripción macroscópica en términos de la microscópica se presentará la relación que existe entre la gran función de partición y la **función de partición canónica**, véase [1, 3, 2], posteriormente, en las siguientes dos secciones, se revisará la cadena lineal monoatómica para luego calcular la función de partición particular que servirá para acceder al comportamiento termodinámico de los sistemas que serán abordados en el presente trabajo. Partiendo de la ecuación (2.33)

$$\begin{aligned} \Xi &= \sum_N \sum_j e^{-\beta(E_j - \mu N)} \\ &= \sum_N \left( e^{\beta\mu N} \sum_j e^{-\beta E_j} \right), \end{aligned}$$

debe recordarse que  $E_j = E_j(N, V)$  por lo que para cada  $N$  se tiene que

$$Z_N = \sum_j e^{-\beta E_j}, \quad (2.40)$$

donde  $Z_N$  es la función de partición canónica, entonces la gran función de partición puede reescribirse como

$$\Xi = \sum_N Z_N \lambda^N; \quad \lambda = e^{\beta\mu}. \quad (2.41)$$

donde  $\lambda$  es la **fugacidad**.

## 2.2. La cadena cristalina monoatómica

En la sección anterior se introdujo a la *Termodinámica Estadística* de manera muy breve y general, ahora se pueden aplicar los resultados anteriores al sistema de la **cadena lineal cristalina monoatómica**, pues éste será el punto de partida que dará paso a la incorporación de los modelos de **Watts y Strogatz**, de **Barabási-Albert** y de redes tipo **árbol de Cayley**, para el análisis de sus efectos en los modos colectivos de sistemas de osciladores acoplados. Gran parte de la información contenida en esta sección puede encontrarse en libros clásicos de *Estado Sólido* como el de Ashcroft y Mermin [10] y el de Kittel [11].

Un **sólido cristalino** o simplemente un **crystal** es un sólido cuyos constituyentes poseen una organización regular y periódica, es decir, que sus componentes (átomos, moléculas o iones) se encuentran ordenados en estructuras bien definidas que se repiten en todo el sólido. Entonces un sólido puede pensarse como una caja que contiene partículas en interacción y que además tienen posiciones<sup>10</sup> bien definidas, como en un mallado.

Una aproximación muy utilizada en el estudio de los cristales es la llamada **aproximación armónica**, ésta consiste en suponer que la contribución más relevante del potencial de interacción de las partículas del sistema es a orden cuadrático, en particular, el **potencial armónico** para un cristal unidimensional está dado por, véase capítulo 22 de [10],

$$U^{\text{arm}} = \frac{1}{2} \mathcal{K} \sum_n [u(na) - u([n+1]a)]^2, \quad (2.42)$$

donde  $\mathcal{K}$  es una constante que corresponde a la intensidad de una fuerza restitutiva,  $n$  es un número entero que servirá para etiquetar las posiciones de equilibrio,  $a$  es la distancia entre posiciones de equilibrio y  $u$  representa los desplazamientos de los átomos desde la posición de equilibrio  $na$ . En adelante se supondrá que la interacción

---

<sup>10</sup>Estas posiciones hacen referencia a la posiciones de equilibrio de los constituyentes.

entre sus constituyentes es a primeros vecinos y que además la cadena tiene un número finito  $N_T$  de partículas.

Debe aclararse que  $U^{\text{arm}}$  es la contribución a la energía potencial total, en adelante solo se considerará esta contribución como la energía interna total, la razón de que sea así es que, así como en el gas ideal se supone que los constituyentes (casi) no interactúan y por lo tanto las interacciones se pueden despreciar y se toma solo la energía cinética, una de las hipótesis principales de un cristal es que los constituyentes poseen desplazamientos muy pequeños respecto a sus posiciones de equilibrio, en comparación con el espaciamiento entre dichas posiciones, por lo que, para términos prácticos, dichos constituyentes permanecen (casi) estáticos.

Para facilitar el análisis se supondrá que la cadena satisface las condiciones periódicas de *von Karman*, estas condiciones definen la periodicidad del sistema y están dadas por

$$u(0) = u(N_T a); \quad u(na) = u([N_T + n]a), \quad (2.43)$$

entonces se buscarán soluciones del tipo periódicas en el tiempo y en el espacio, el caso más general de este tipo de solución es:

$$u(na, t) \propto \exp[i(kna - \omega t)], \quad (2.44)$$

que son soluciones de onda plana, en (2.44)  $k$  es lo que se conoce como número de onda,  $\omega$  es una frecuencia y  $t$  el tiempo. Debido a las condiciones de frontera (2.43) se ha de satisfacer

$$\begin{aligned} Ae^{i(0-\omega t)} &= Ae^{i(kN_T a - \omega t)}, \\ Ae^{-i\omega t} &= Ae^{ikN_T a} e^{-i\omega t}, \end{aligned}$$

donde  $A$  es una constante por determinar para hacer válida la relación (2.44), por lo que

$$e^{ikN_T a} = 1, \quad (2.45)$$

entonces de la ecuación anterior, es claro que  $k$  debe satisfacer la condición

$$k = \frac{2\pi m}{aN}, \quad \text{con } m \text{ entero}, \quad (2.46)$$

por la periodicidad del sistema, periodo  $2\pi$ , basta con tomar el caso particular  $m = 1$ .

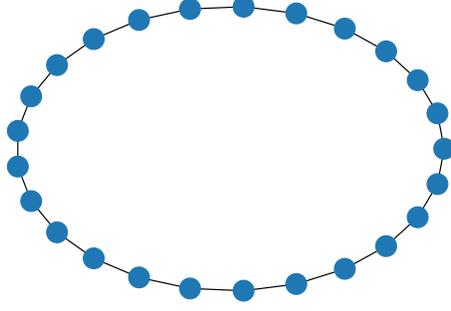


Figura 2.2: Representación de una cadena lineal monoatómica con condiciones de *von Karman* de  $N_T = 25$  átomos.

Nótese que las soluciones en (2.44) son dependientes del tiempo, sin embargo dadas las condiciones de periodicidad, dicha dependencia puede pensarse únicamente como un cambio de fase en las ondas, por lo que la dinámica de los constituyentes del cristal solo está determinada por la parte espacial.

Puesto que el sistema es no disipativo ya que las interacciones se pueden derivar de un potencial y suponiendo que los átomos son de una única especie, es decir, todas las masas son iguales, entonces la dinámica del sistema se rige por

$$m\ddot{u}(na) = -\frac{\partial}{\partial u(na)}U^{arm}. \quad (2.47)$$

Se debe notar que los desplazamientos están acoplados por la interacción emanada del potencial, sin embargo, son funciones independientes entre sí, es decir, cada  $u_n$  solo depende de su posición de equilibrio. Si ahora se definen los desplazamientos como

$$u(na) \equiv u_n, \quad (2.48)$$

entonces sustituyendo (2.42) en (2.47) y desarrollando, se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial U^{arm}}{\partial u_n} &= \frac{\partial}{\partial u_n} \frac{1}{2} \mathcal{K} \sum_{n'} (u_{n'} - u_{n'+1})^2 \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{K} \frac{\partial}{\partial u_n} \left[ (u_0 - u_1)^2 + \cdots + (u_{n-1} - u_n)^2 + (u_n - u_{n+1})^2 + \cdots + (u_{N_T-1} - u_0)^2 \right] \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{K} \frac{\partial}{\partial u_n} \left[ (u_{n-1}^2 - 2u_{n-1}u_n + u_n^2) + (u_n^2 - 2u_nu_{n+1} + u_{n+1}^2) \right] \\ &= \frac{1}{2} \mathcal{K} (-2u_{n-1} + 2u_n + 2u_n - 2u_{n+1}) \end{aligned}$$

obteniendo la expresión

$$m\ddot{u}_n = -\mathcal{K} (2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}), \quad (2.49)$$

de la que se encuentra que

$$-m\omega^2 A e^{i(kna - \omega t)} = -\mathcal{K} A [2 - e^{-ika} - e^{ika}] e^{i(kna - \omega t)},$$

empleando la relación (2.44), simplificando y usando que

$$\cos(ka) = \frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2},$$

entonces se obtiene

$$\omega(k) = \sqrt{\frac{2\mathcal{K}[1 - \cos(ka)]}{m}}, \quad (2.50)$$

dado que  $2 \sin^2\left(\frac{1}{2}ka\right) = 1 - \cos(ka)$ , entonces se puede encontrar la forma funcional del **espectro de frecuencias**,  $\omega = \omega(k)$ , dado por

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\mathcal{K}}{m}} \left| \sin\left(\frac{1}{2}ka\right) \right|, \quad (2.51)$$

es decir, se ha encontrado una función que proporciona las **frecuencias normales de vibración**, estas frecuencias definen un conjunto de ondas planas, una por cada frecuencia, con las cuales se puede descomponer cualquier movimiento oscilatorio del sistema, en otras palabras, cualquier movimiento oscilatorio de los constituyentes se puede escribir como **combinación lineal** del conjunto de soluciones dadas por las frecuencias en (2.51). Nótese que si  $\frac{1}{2}ka \approx 0$ , entonces  $\omega(k) \sim k$ .

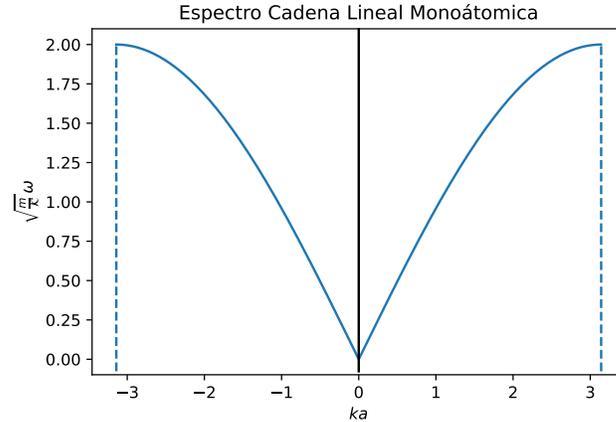


Figura 2.3: Espectro de frecuencias para una cadena lineal monoatómica obtenido analíticamente.

Como se ha supuesto una cadena de  $N_T$  átomos, entonces debido a la relación (2.46) existen  $N_T$  frecuencias no redundantes<sup>11</sup>, por esta razón en adelante únicamente se tomarán los valores para los cuales  $k > 0$  debido a que esta cantidad está ligada a la longitud de onda.

<sup>11</sup>Matemáticamente la degeneración de dos por cada modo normal se encuentra en el valor absoluto del la función seno.

Es así que se pueden etiquetar las frecuencias, en orden creciente, con valores que van desde uno y hasta  $N_T$ , de la siguiente forma

$$\omega_1 \leq \omega_2 \leq \dots, \leq \omega_{N_T-1} \leq \omega_{N_T}; \quad (2.52)$$

es decir, se tienen  $N_T$  modos normales en la cadena. Desde ahora las etiquetas se usarán para hacer referencia a los modos de oscilación y a los desplazamientos en la sección siguiente.

## 2.3. Modos normales

En la sección anterior se calculó el espectro de frecuencias de la cadena lineal a partir de una solución prueba, sin embargo existe una manera alternativa de hacerlo mediante matrices, de esta manera se vuelve un problema numérico. Se debe hacer énfasis en que ahora la cadena lineal se debe pensar como un conjunto osciladores lineales acoplados, donde cada oscilador representa una partícula, esto es válido ya que se está considerando la aproximación armónica.

Partiendo de la ecuación (2.49), una para cada  $n$ , entonces en conjunto se tiene un sistema de  $N_T$  ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden acopladas y homogéneo, por lo que este sistema posee solución analítica, véase [12], considerando la notación de (2.48) para el  $n$ -ésimo desplazamiento, entonces el sistema de ecuaciones diferenciales que modelan la cadena lineal está dado por

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 u_1}{dt^2} &= -\mathcal{K}2u_1 + \mathcal{K}u_N + \mathcal{K}u_2, \\ m \frac{d^2 u_2}{dt^2} &= -\mathcal{K}2u_2 + \mathcal{K}u_1 + \mathcal{K}u_3, \\ m \frac{d^2 u_3}{dt^2} &= -\mathcal{K}2u_3 + \mathcal{K}u_2 + \mathcal{K}u_4, \\ &\vdots \\ m \frac{d^2 u_{N_T-1}}{dt^2} &= -\mathcal{K}2u_{N_T-1} + \mathcal{K}u_{N_T-2} + \mathcal{K}u_{N_T}, \\ m \frac{d^2 u_{N_T}}{dt^2} &= -\mathcal{K}2u_{N_T} + \mathcal{K}u_{N_T-1} + \mathcal{K}u_1, \end{aligned} \quad (2.53)$$

o bien reescribiendo matricialmente se obtiene

$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = -\frac{\mathcal{K}}{m} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

o de manera compacta,

$$\frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} = -\frac{\mathcal{K}}{m} \mathbb{L} \mathbf{u}, \quad (2.55)$$

donde

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \mathbb{L} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix},$$

entonces toda la información de la dinámica del sistema está contenida en la matriz  $\mathbb{L}$ , por lo que si se conoce la estructura y propiedades de  $\mathbb{L}$  se puede obtener el comportamiento de la cadena lineal.

Una propiedad importante de  $\mathbb{L}$  es que es una matriz semidefinida positiva, esto quiere decir que si  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N_T}$  es un vector no nulo, se satisface que

$$0 \leq \mathbf{x}^T \mathbb{L} \mathbf{x}, \quad (2.56)$$

donde  $\mathbf{x}^T$  es el vector transpuesto de  $\mathbf{x}$ , esta propiedad es fácil de verificar, haciendo lo siguiente,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^T \mathbb{L} \mathbf{x} &= 2x_1^2 - x_1x_N - x_1x_2 + 2x_2^2 - x_2x_1 - x_2x_3 + 2x_3^2 - x_3x_2 - x_3x_4 + \cdots + \\ &\quad + 2x_{N-1}^2 - x_{N-1}x_{N-2} - x_{N-1}x_N + 2x_N^2 - x_Nx_{N-1} - x_Nx_1 \\ &= 2x_1^2 - 2x_1x_N - 2x_1x_2 + 2x_2^2 - 2x_2x_3 + 2x_3^2 - 2x_3x_4 + \cdots + \\ &\quad + 2x_{N-1}^2 - 2x_{N-1}x_{N-2} - 2x_{N-1}x_N + 2x_N^2, \end{aligned}$$

donde se ha omitido el subíndice  $T$  en  $N_T$ , es así que

$$\mathbf{x}^T \mathbb{L} \mathbf{x} = (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 + \cdots + (x_{N-1} - x_N)^2 + (x_N - x_1)^2,$$

con esto se ha probado que la matriz  $\mathbb{L}$  es una matriz semidefinida positiva.

Nótese que  $\mathbb{L}$  es simétrica por lo tanto siempre se puede diagonalizar [13], así, el sistema (2.53) ya desacoplado (expresado en su forma diagonal) será analíticamente resoluble. Puesto que  $\mathbb{L}$  se puede diagonalizar, entonces existe una matriz  $\mathbb{P}$  invertible con coeficientes reales constantes que satisface, véase [13],

$$\mathbb{D} = \mathbb{P}^{-1} \mathbb{L} \mathbb{P}, \quad (2.57)$$

donde  $\mathbb{D}$  es una matriz diagonal, entonces la matriz  $\mathbb{P}$  permite llevar la ecuación (2.55) a un sistema equivalente de  $N_T$  osciladores lineales desacoplados cada uno con una frecuencia de oscilación propia, de aquí que en algunas ocasiones en el texto se haga referencia a las frecuencias del sistema desacoplado como eigenfrecuencias. En otras palabras la relación

$$\mathbf{u} = \mathbb{P} \mathbf{v}, \quad (2.58)$$

es una transformación de coordenadas que permite trabajar con las **coordenadas normales** del sistema, *cf.* [14]. Partiendo de las ecuaciones (2.55) y (2.58) se tiene

$$\frac{d^2 (\mathbb{P}\mathbf{v})}{dt^2} = -\frac{\mathcal{K}}{m} \mathbb{L} \mathbb{P}\mathbf{v},$$

puesto que  $\mathbb{P}$  es constante e invertible, entonces

$$\frac{d^2 \mathbf{v}}{dt^2} = -\frac{\mathcal{K}}{m} \mathbb{P}^{-1} \mathbb{L} \mathbb{P} \mathbf{v},$$

por lo que

$$\frac{d^2 \mathbf{v}}{dt^2} = -\frac{\mathcal{K}}{m} \mathbb{D} \mathbf{v}, \quad (2.59)$$

de esta manera se ha logrado obtener un sistema de  $N_T$  osciladores armónicos simples cada uno con frecuencia

$$\omega_n = \sqrt{\frac{\mathcal{K}}{m} \Lambda_n}; \quad n = 1, \dots, N_T, \quad (2.60)$$

donde  $\Lambda_n$  es el  $n$ -ésimo eigenvalor de la matriz  $\mathbb{L}$ .

Es así como los eigenvalores de la matriz  $\mathbb{L}$  físicamente pueden asociarse al cuadrado de las frecuencias (escaladas por un factor  $\omega_0 = \sqrt{\frac{\mathcal{K}}{m}}$ ) asociadas a los modos normales de cada partícula en la cadena cristalina. Este método permite obtener el espectro (discreto) de las frecuencias del sistema de manera numérica. Este espectro contiene la información necesaria para obtener los parámetros termodinámicos del sistema, como se verá más adelante.

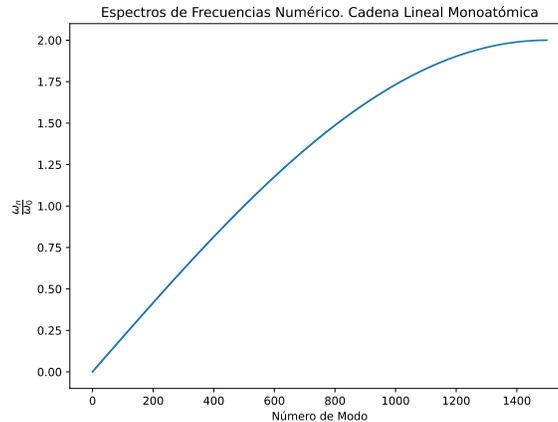


Figura 2.4: Espectro de frecuencias numérica de una cadena lineal cristalina con  $N = 1500$  átomos.

Hay que hacer énfasis en la diferencia principal de las gráficas 2.3 y 2.4; primeramente, en 2.3 la variable correspondiente al eje horizontal es el número de onda  $k$  obteniendo así  $\omega = \omega(k)$ , mientras que en 2.4 la variable utilizada en el eje horizontal

es el número de modo, dicha variable aparece naturalmente al describir las interacciones de la cadena de forma matricial. Nótese que en la gráfica 2.3 hay una doble degeneración debido al valor absoluto de la función seno, sin embargo para la segunda gráfica no se muestra tal degeneración ya que únicamente se toma la raíz positiva del eigenvalor y no el valor absoluto.

A manera de comentario, cabe mencionar que la cadena lineal consta de  $N_T$  partículas y dado que el movimiento se lleva a cabo en una dimensión, entonces se tienen  $N_T$  grados de libertad correspondientes a los desplazamientos longitudinales de cada partícula.

Cabe señalar que empleando este método se clarifica el hecho de que la descripción de la cadena lineal se realice a partir de sus modos normales<sup>12</sup> en vez de conocer la dinámica de cada partícula. esto ya que si se conocen los modos y la relación de dispersión de las frecuencias entonces es posible conocer el movimiento general de todos los constituyentes de manera colectiva.

En relación al párrafo anterior, entonces hay que dilucidar el concepto de **cuasi-partícula** ya que los modos normales caen en esta categoría. Una cuasipartícula es un ente físico que puede considerarse como una partícula, es decir, un objeto con propiedades bien definidas, pero que dichas propiedades se ven modificadas al cambiar el volumen o temperatura del sistema total. Para esclarecer este concepto considérese la cadena lineal de longitud  $L$ , supóngase que se modifica el tamaño de la cadena hasta obtener una nueva longitud<sup>13</sup>  $L'$ , esta nueva configuración no ha modificado sus partículas sin embargo, en virtud de la ecuación (2.45) los modos normales sí han cambiado. Esto cobrará relevancia en la siguiente sección.

Algo que aún no se ha dicho, pero que es importante señalar para el análisis termodinámico, es que la matriz  $\mathbb{L}$  tiene un eigenvalor nulo, es decir, siempre hay un modo o cuasipartícula en el ensamble cuya energía es cero y por lo tanto no contribuye a la energía interna del sistema, razón por la cual solo habrá  $N = N_T - 1$  eigenfrecuencias que contribuyen a un análisis termodinámico, habiendo hecho esta observación, entonces las frecuencias ahora se reetiquetarán como

$$0 < \omega_1 \leq \omega_2 \leq \dots, \leq \omega_{N-1} \leq \omega_N,$$

asegurando que todas las frecuencias sean no nulas.

---

<sup>12</sup>Como se verá más adelante su descripción será a partir de las frecuencias asociadas a estos modos.

<sup>13</sup>De tal manera que sus constituyentes siguen distribuidos de manera uniforme.

## 2.4. Termodinámica de la cadena lineal monoatómica

Como ya se ha visto en el apartado 2.1, existen diversas cantidades termodinámicas asociadas a un mismo sistema, sin embargo, en este trabajo únicamente se limitará a estudiar la energía interna, la entropía y la **capacidad calorífica**<sup>14</sup>.

El primer paso para acceder al comportamiento termodinámico de la cadena lineal es obtener la gran función de partición asociada. Como se mencionó en la sección 2.2, el tratamiento que se le dio al sólido fue clásico, esto en el sentido de que las partículas, que desde ahora serán tratados como osciladores lineales, son distinguibles, es decir, cada partícula puede ser identificada por su posición de equilibrio.

Una propiedad que poseen los osciladores lineales acoplados es que bajo una transformación de coordenadas<sup>15</sup> el Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  del sistema puede ser escrito como la suma de los Hamiltonianos de osciladores armónicos desacoplados, es decir,

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_i, \quad \mathcal{H}_i = \frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \mathcal{K}_i Q_i^2 \quad (2.61)$$

donde  $P_i$  y  $Q_i$  son el momento y su coordenada generalizada, respectivamente, del  $i$ -ésimo oscilador, el hecho de que el Hamiltoniano sea “separable” es importante debido a que de esta manera la función de partición canónica se puede desacoplar además de que en este caso  $H_i$  coincide con la energía del  $i$ -ésimo oscilador.

Ahora bien, para cada subsistema con etiqueta  $E_{N,j}$  se cumple que

$$N = \sum_k n_k \quad (2.62a)$$

$$E_j = \sum_k n_k \varepsilon_k \quad (2.62b)$$

donde  $\varepsilon_k$  es la energía que puede poseer una de las cuasipartículas y  $n_k$  es el número

---

<sup>14</sup>Como se sabe esta cantidad que se puede asociar a las fluctuaciones de la energía interna, pero este concepto se revisará a detalle más adelante.

<sup>15</sup>Esta transformación esta dada por la matriz  $\mathbb{P}$  que diagonaliza  $\mathbb{L}$ .

de cuasipartículas que poseen energía  $\varepsilon_k$ , entonces

$$\begin{aligned}
\Xi &= \sum_N \sum_j \lambda^N e^{-\beta E_j} \\
&= \sum_{\{n_k\}} \lambda^{\sum_k n_k} e^{-\beta \sum_k n_k \varepsilon_k} \\
&= \sum_{\{n_k\}} \prod_k (\lambda e^{-\beta \varepsilon_k})^{n_k} \\
&= \prod_k \sum_{n_k} (\lambda e^{-\beta \varepsilon_k})^{n_k}
\end{aligned}$$

donde  $\{n_k\}$  significa que la suma corre sobre los estados de los constituyentes. Debe recordarse que se está trabajando en el ensamble gran canónico, pues en principio los subsistemas poseen un número variable de partículas, sin embargo, hay que hacer hincapié en que la descripción de la cadena lineal es a partir de los modos normales o cuasipartículas y éstas no se conservan ya que se crean y aniquilan cuando hay fluctuaciones térmicas<sup>16</sup>, entonces, para ser consistentes, necesariamente  $\mu = 0$ , por lo que

$$\Xi = \prod_k \frac{1}{1 - e^{-\beta \varepsilon_k}}, \quad (2.63)$$

que es el resultado esperado si se hubiera hecho un tratamiento a partir del ensamble canónico, esto es congruente con el hecho de que los tres ensambles estadísticos son equivalente en el límite termodinámico, véase [3].

El segundo paso es conocer cómo las energías  $\varepsilon_k$  se relacionan con las frecuencias  $\omega_k$  para ello se hará uso de la relación fundamental

$$\varepsilon_k = \hbar \omega_k, \quad (2.64)$$

donde  $\hbar$  es la constante de Planck reducida. El hecho que se haga uso  $\hbar$  en (2.64) es debido a que de esta manera las energías en (2.62b) corresponden a las del oscilador armónico cuántico y con esto obtiene la distribución de *Planck*, como se verá a continuación, esta distribución corrige los efectos anómalos<sup>17</sup> de la capacidad calorífica, es decir, que tienda a cero cuando la temperatura tienda a cero cuya explicación descansa en la teoría cuántica, entonces se obtiene

$$\Xi(\{\omega_n\}, T) = \prod_{n=1}^N \frac{1}{1 - e^{-\hbar \omega_n \beta}}, \quad (2.65)$$

donde la dependencia del volumen del sistema se encuentra implícitamente en las eigenfrecuencias.

<sup>16</sup>Lo cual sigue siendo coherente con el ensamble gran canónico.

<sup>17</sup>Esto es, que la energía diverja cuando el número de nodos tienden a infinito o en el límite del continuo, esto es consecuencia de la equipartición de la energía considerando la distribución de Maxwell-Boltzmann.

### 2.4.1. La energía interna

Como ya se pudo ahondar en el primer apartado de este capítulo, la energía interna  $U$  es una de las cantidades más importante cuando se trata de termodinámica. Se sabe que la energía interna del sistema, de acuerdo a la ecuación (2.34), está dada por

$$U = K_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln(\Xi),$$

por lo que habrá que obtener  $\ln(\Xi)$  de manera explícita

$$\begin{aligned} \ln(\Xi) &= \ln \left[ \prod_{n=1}^N \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_n\beta}} \right] \\ &= \sum_{n=1}^N \ln \left[ \frac{1}{1 - e^{-\hbar\omega_n\beta}} \right] \\ &= \sum_{n=1}^N [-\ln(1 - e^{-\hbar\omega_n\beta})], \end{aligned}$$

por lo tanto,

$$\ln(\Xi) = - \sum_{i=1}^N \ln \left( 1 - e^{-\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} \right). \quad (2.66)$$

Introduciendo en (2.34) la ecuación (2.66), entonces

$$\begin{aligned} U &= K_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \sum_{n=1}^N [-\ln(1 - e^{-\hbar\omega_n\beta})] \\ &= K_B T^2 \sum_{n=1}^N \left[ -\frac{\partial}{\partial T} \left( \ln \left[ 1 - e^{-\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} \right] \right) \right] \\ &= K_B T^2 \sum_{n=1}^N \left[ -\frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}}} \left( -\frac{\hbar\omega_n}{K_B T^2} e^{-\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} \right) \right] \\ &= K_B T^2 \sum_{n=1}^N \left[ \frac{1}{K_B T^2} \frac{\hbar\omega_n}{e^{\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} - 1} \right], \end{aligned}$$

entonces la energía interna del sistema en términos de las eigenfrecuencias es

$$U = \sum_{n=1}^N \frac{\hbar\omega_n}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1}. \quad (2.67)$$

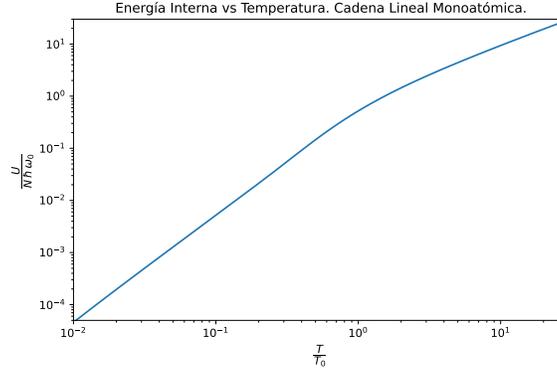


Figura 2.5: Energía interna de la cadena lineal monoatómica de  $N = 1500$  átomos, para el espectro numérico obtenido al resolver (2.54).

### 2.4.2. La entropía

La concepción de entropía que se dio en la sección 2.1 puede parecer un tanto limitada y de hecho no fue hasta que se desarrolló la *Termodinámica Estadística* que se pudo dar un fundamento sólido y una mejor noción de lo describe. Una mejor noción de entropía es la de la información asociada al sistema debido a que la entropía (de Boltzmann) está relacionada directamente con la derivada del logaritmo de la gran función de partición, consúltese [1].

Una razón por la cuál es importante conocer la entropía de un sistema es debido a que permite verificar la **tercera ley de la termodinámica**<sup>18</sup> la cual establece que cuando la temperatura absoluta tiende a cero  $T \rightarrow 0$  entonces la entropía del sistema tiende a cero  $S \rightarrow 0$ , consúltese [2], de esta manera se puede corroborar que el sistema es congruente con las leyes de la *Termodinámica*.

De la *Física Estadística* se sabe que la entropía promedio se obtiene mediante la ecuación

$$S = - \left( \frac{\partial \Psi}{\partial T} \right)_V,$$

desarrollando para este caso particular

$$\begin{aligned} S &= - \frac{\partial}{\partial T} [-K_B T \ln(\Xi)] \\ &= K_B \ln(\Xi) + K_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln(\Xi) \\ &= K_B \ln(\Xi) + \frac{1}{T} K_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln(\Xi) \\ &= K_B \ln(\Xi) + \frac{U}{T}, \end{aligned}$$

<sup>18</sup>Si bien la tercera ley de la termodinámica implica una referencia absoluta para la entropía de los sistemas termodinámicos, en el presente trabajo únicamente se utilizará para poder caracterizar los sistemas empleados, como se verá más adelante.

además, de (2.66) y (2.67), se tiene

$$S = K_B \left( \sum_{n=1}^N [-\ln(1 - e^{-\hbar\omega_n\beta})] \right) + \frac{1}{T} \left( \sum_{n=1}^N \frac{\hbar\omega_n}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1} \right)$$

$$= \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\hbar\omega_n}{T(e^{\hbar\omega_n\beta} - 1)} - K_B \ln(1 - e^{-\hbar\omega_n\beta}) \right],$$

por lo que la entropía resulta en

$$S = K_B \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\hbar\omega_n\beta}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega_n\beta}) \right]. \quad (2.68)$$

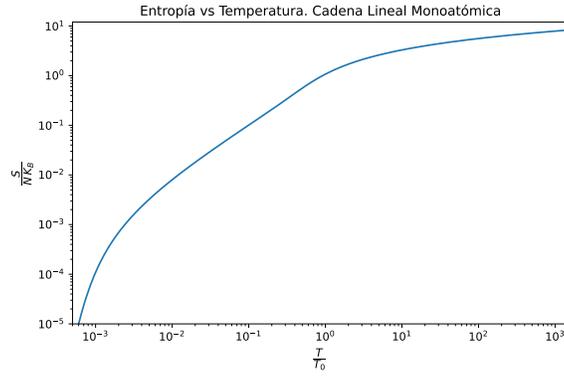


Figura 2.6: Entropía de la cadena lineal monoatómica de  $N = 1500$  átomos, para el espectro numérico obtenido al resolver (2.54).

### 2.4.3. Capacidad calorífica

Otro parámetro termodinámico importante es la capacidad calorífica, también llamada capacidad térmica,  $C$ , ésta se define de manera general como

$$C \equiv \frac{dQ}{dT}, \quad (2.69)$$

es decir, es la cantidad de calor que se debe suministrar al sistema para aumentar en  $dT$  la temperatura de un sistema, [6, 7].

Para sistemas termodinámicos arbitrarios existen distintas capacidades caloríficas dependiendo de las variables con la que dicho sistema se caracterice, sin embargo, aquí se ha considerado un sistema cerrado cuyas variables son  $T$  y  $V$  por lo que la ecuación que rige su comportamiento, de acuerdo a la primera ley, es

$$dQ = dU + pdV,$$

en este caso la capacidad calorífica cuando el volumen es constante simplemente es

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V,$$

donde el subíndice  $V$  indica que el volumen es constante.

En esta situación  $C_V$  brinda como información las fluctuaciones de la energía interna [3], sin embargo, para el caso de una cadena lineal el volumen del sistema es equivalente a la longitud  $L$  de la cadena, por lo que se define la capacidad calorífica unidimensional como

$$C_L = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_L, \quad (2.70)$$

empleando las ecuaciones (2.67) y (2.70) se puede desarrollar de la siguiente manera

$$\begin{aligned} C_L &= \frac{\partial}{\partial T} \left( \sum_{n=1}^N \frac{\hbar\omega_n}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1} \right) \\ &= \sum_{n=1}^N \hbar\omega_n \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} - 1} \right) \\ &= \sum_{n=1}^N \hbar\omega_n \left( -\frac{1}{\left( e^{\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} - 1 \right)^2} \right) \left( -\frac{\hbar\omega_n}{K_B T^2} e^{\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} \right) \\ &= \sum_{n=1}^N \left( \frac{\hbar\omega_n}{e^{\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}} - 1} \right)^2 \left( \frac{e^{\frac{\hbar\omega_n}{K_B T}}}{K_B T^2} \right) \\ &= K_B \sum_{n=1}^N \left( \frac{\hbar\omega_n\beta}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1} \right)^2 e^{\hbar\omega_n\beta} \\ &= K_B \sum_{n=1}^N \left( \frac{\hbar\omega_n\beta}{e^{\frac{\hbar\omega_n\beta}{2}} - e^{-\frac{\hbar\omega_n\beta}{2}}} \right)^2 \\ &= K_B \sum_{n=1}^N \left( \frac{\hbar\omega_n\beta}{2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega_n\beta}{2}\right)} \right)^2, \end{aligned}$$

así, la capacidad calorífica a longitud contante resulta en

$$C_L = K_B \sum_{n=1}^N \left( \frac{\hbar\omega_n\beta}{2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega_n\beta}{2}\right)} \right)^2. \quad (2.71)$$

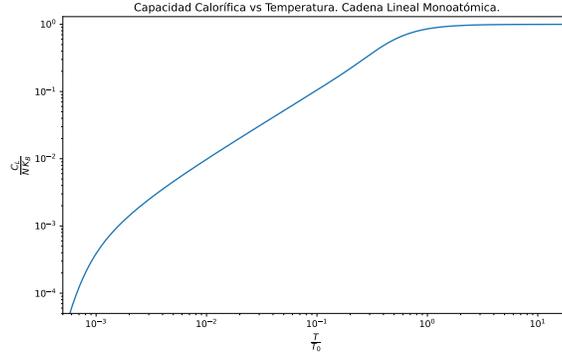


Figura 2.7: Capacidad calorífica de la cadena lineal monoatómica de  $N = 1500$  átomos, para el espectro numérico obtenido al resolver (2.54).

En este análisis no se ha hecho la aproximación de que el número de partículas es tan grande que se puede considerar el límite  $N \rightarrow \infty$ , ni tampoco se ha supuesto que las frecuencias tienen valores tan cercanos entre sí de tal forma que el espectro de frecuencias se puede considerar como un continuo. No obstante, existen dos modelos relevantes en los cuales si se hace la aproximación del continuo, en las siguientes dos secciones se presentan.

## 2.5. El modelo de Einstein

Por completez se presenta el **modelo de Einstein** ya que no es un modelo muy adecuado para poder describir sólidos existentes en la naturaleza, sin embargo es una buena motivación para el **modelo de Debye**. Para una revisión más detallada de este modelo puede consultarse [10].

La hipótesis fuerte del modelo de *Einstein* es que asume que las frecuencias de todas las partículas son las mismas, como hipótesis adicional asume que las frecuencias son un continuo, note que esto implica que el número de onda también es continuo; así, la relación de dispersión en función del número de onda  $k$  es

$$\omega(k) \equiv \omega_0, \quad (2.72)$$

donde  $\omega_0 = \sqrt{\frac{\kappa}{m}}$ .

Puesto que se ha considerado un continuo de frecuencias, entonces las sumas en (2.67), (2.68) y (2.71), pueden aproximarse por integrales

$$\begin{aligned} U &\longrightarrow \int \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} g(\omega) d\omega, \\ S &\longrightarrow K_B \int \left[ \frac{\hbar\omega\beta}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) \right] g(\omega) d\omega, \\ C_L &\longrightarrow \int \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} \right) g(\omega) d\omega, \end{aligned}$$

donde  $g(\omega)$  es la función de **densidad de estados** que, como su nombre lo indica, tiene como información el número de estados por unidad de frecuencias entre  $\omega$  y  $\omega + d\omega$ . Nótese que las expresiones anteriores se han omitido intencionalmente los límites de integración, ya que a continuación se explicará cuales serán lo indicados.

Hay que hacer énfasis en que la función  $g(\omega)$  está constreñida a la condición.

$$\int_0^{\omega_{\text{máx}}} g(\omega) d\omega = N,$$

donde  $\omega_{\text{máx}}$  es la frecuencia máxima que puede poseer el sistema y cero es el valor mínimo que puede tener una eigenfrecuencia. Puesto que todas las frecuencias están saturadas en un solo valor, entonces la función de densidad más adecuada es una distribución **delta de Dirac**, es decir,

$$g(\omega) = N\delta(\omega - \omega_0),$$

pero la distribución delta de Dirac está definida en todo el espacio (de frecuencias), por lo que se puede expresar

$$\int_0^{\infty} N\delta(\omega - \omega_0) d\omega = N.$$

De esta manera los parámetros termodinámicos toman la forma

$$\begin{aligned} U &= \int \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} [N\delta(\omega - \omega_0)] d\omega, \\ S &= K_B \int \left[ \frac{\hbar\omega\beta}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) \right] [N\delta(\omega - \omega_0)] d\omega, \\ C_L &= \int \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} \right) [N\delta(\omega - \omega_0)] d\omega, \end{aligned}$$

debido a las propiedades de la distribución delta de Dirac es inmediata la integración obteniendo

$$U = \frac{N\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0\beta} - 1}, \quad (2.73a)$$

$$S = NK_B \left[ \frac{\hbar\omega_0\beta}{e^{\hbar\omega_0\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega_0\beta}) \right], \quad (2.73b)$$

$$C_L = NK_B \frac{(\hbar\omega_0\beta)^2 e^{\hbar\omega_0\beta}}{(e^{\hbar\omega_0\beta} - 1)^2}. \quad (2.73c)$$

Con las expresiones (2.73) se concluye este repaso del modelo de Einstein.

## 2.6. El modelo de Debye

Ahora se presentará el modelo de Debye propuesto por *Peter Debye* en 1912. En contraste al modelo Einstein, en este se asume que las frecuencias de oscilación son

distintas y dadas por los modos normales de oscilación, de aquí se motiva el título del presente trabajo, sin embargo, las frecuencias siguen en la aproximación del continuo.

En la aproximación de Debye se tiene que la relación de dispersión (2.51) se reemplaza únicamente por la siguiente relación lineal

$$\omega(k) = v_p k, \quad (2.74)$$

es decir, se extrapola el comportamiento lineal a  $ka \ll 1$  de (2.51); en (2.74),  $v_p$  es una constante de proporcionalidad cuyas dimensiones son de velocidad para que la relación tenga coherencia.

Si ahora se define la **velocidad de grupo** del sistema como

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}, \quad (2.75)$$

entonces la velocidad de grupo puede pensarse como como la velocidad de propagación<sup>19</sup> de la superposición de todas la ondas que generan por cada  $\omega$ , véase (2.44). Si se comparan (2.51) y (2.74) entonces es claro que en el límite cuando  $k \rightarrow \pm \frac{\pi}{a}$  la velocidad de grupo no tienden al mismo valor ya que en este modelo  $v_g$  permanece constante mientras que para la relación analítica tiende a cero, esta observación es únicamente para hacer notar que , a pesar de que la aproximación de Debye es buena, tiene carencias en el régimen de bajas temperaturas, como se verá más adelante.

Partiendo de la ecuación (2.46), entonces se tiene que el número de onda es función de  $n$ , tomando en cuenta que no hay degeneración en el intervalo  $0 < k < \frac{\pi}{a}$ , entonces se puede tomar únicamente

$$k_n = \frac{n\pi}{L} = \frac{n\pi}{aN_T}, \quad (2.76)$$

donde se han etiquetado los números de onda. En adición,  $k$  se relaciona con la longitud de onda  $\lambda$  vía

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n}, \quad (2.77)$$

por lo que las longitudes de onda máxima y mínima están limitadas por el espacio entre partículas  $a$  y la longitud de la cadena, es decir,

$$\lambda_{\text{mín}} = 2a, \quad (2.78a)$$

$$\lambda_{\text{máx}} = 2L, \quad (2.78b)$$

además se debe notar que  $k$  es máximo cuando  $\lambda$  es mínimo, es decir,

$$k_{\text{máx}} = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{mín}}} = \frac{N\pi}{L}. \quad (2.79)$$

---

<sup>19</sup>De hecho es la velocidad de propagación de lo que se conoce como **la envoltente** de las ondas pues es a velocidad que tendría la onda cuyo resultado es la superposición de las contribuciones de las ondas correspondientes a los distintos modos normales.

Análogamente al modelo de Einstein, las sumas en (2.67), (2.68) y (2.71), pueden aproximarse por integrales

$$U \approx \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} g(\omega) d\omega, \quad (2.80a)$$

$$S \approx K_B \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \left[ \frac{\hbar\omega\beta}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) \right] g(\omega) d\omega, \quad (2.80b)$$

$$C_L \approx \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} \right) g(\omega) d\omega, \quad (2.80c)$$

donde  $g(\omega)$  es, nuevamente, la función de *densidad de estados* de frecuencia con la constricción

$$\int_0^{\omega_{\text{máx}}} g(\omega) d\omega = N, \quad (2.81)$$

en la literatura, *v. gr.* [10, 11], a  $\omega_{\text{máx}}$  se le acostumbra a llamar **frecuencia de Debye**  $\omega_D$  para hacer énfasis en que es la frecuencia máxima asociada a este modelo, sin embargo, aquí se seguirá usando la notación  $\omega_{\text{máx}}$ .

Para hallar la densidad de estados en este modelo se debe notar que notar que  $k = k(n)$ , entonces

$$N = \int_0^N dn = \int_0^{k_{\text{máx}}} \frac{L}{\pi} dk = \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \frac{L}{\pi v_p} d\omega,$$

por lo tanto la densidad de estados es

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi v_p}, \quad (2.82)$$

mientras que la frecuencia  $\omega_{\text{máx}}$  resulta en

$$\omega_{\text{máx}} = \frac{\pi N v_p}{L}. \quad (2.83)$$

Usando la expresión explícita de la densidad de estados se pueden calcular los parámetros termodinámicos, primero la energía interna

$$\begin{aligned} U &= \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} \left( \frac{L}{\pi v_p} \right) d\omega, \\ &= \frac{L}{\pi v_p} \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} d\omega, \\ &= \frac{L}{\pi v_p \beta} \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x}{e^x - 1} \frac{dx}{\hbar\beta}; \quad x = \hbar\omega\beta \\ &= \frac{N}{\omega_{\text{máx}} \hbar \beta^2} \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x}{e^x - 1} dx \\ &= \frac{N K_B^2 T^2}{\omega_{\text{máx}} \hbar} \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x}{e^x - 1} dx; \quad \beta = \frac{1}{K_B T}, \end{aligned}$$

debe recordarse que para calcular estos parámetros se ha considerado que el sólido está compuesto por osciladores armónicos con igual constante de restitución  $\mathcal{K}$  y con la misma masa  $m$ , si se define

$$\omega_0 \equiv \sqrt{\frac{\mathcal{K}}{m}}, \quad (2.84)$$

como la **frecuencia fundamental** del sólido<sup>20</sup>, entonces la energía interna puede escribirse como

$$U = N\hbar \left( \frac{\omega_0^2}{\omega_{\text{máx}}} \right) \left( \frac{T}{T_0} \right)^2 \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x}{e^x - 1} dx,$$

donde

$$T_0 \equiv \frac{\hbar\omega_0}{K_B}. \quad (2.85)$$

si además se define la variable  $\mathcal{T}$ , dada por

$$\mathcal{T} = \frac{\omega_0 T}{\omega_{\text{máx}} T_0}. \quad (2.86)$$

entonces la expresión analítica para la energía interna con el modelo de Debye es

$$U = N\hbar\omega_{\text{máx}}\mathcal{T}^2 \int_0^{1/\mathcal{T}} \frac{x}{e^x - 1} dx. \quad (2.87)$$

Antes de continuar con la entropía y la capacidad calorífica en la aproximación de Debye es necesario realizar unos comentarios, usualmente la ecuación (2.87) se escribe en términos de la **temperatura de Debye**  $\theta_D$ , dada por

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{K_B} = \frac{N\pi\hbar v_p}{K_B L}$$

sin embargo variable  $\mathcal{T}$  que se introdujo en (2.86) será mucho más útil para el análisis que se realizará en el capítulo cuatro ya que, como se verá más adelante, la única información que se obtendrá de los sistemas aquí abordados serán los espectro de frecuencias. Por otro lado  $T_0$  es la **temperatura crítica** y difiere de la temperatura de Debye por un factor de  $\omega_{\text{máx}}/\omega_0$ , véase ecuación (2.51), en el caso particular de la cadena lineal se tiene que

$$\theta_D = \pi T_0.$$

Para tener una idea de la magnitud de  $T_0$  en *Introduction to Solid State Physics* [11] pueden encontrarse los valores experimentales para la temperatura de Debye de distintos elementos, por lo que el rango de  $T_0$  para la mayoría de los elementos es entre  $60K$  y  $200K$ .

---

<sup>20</sup>Evidentemente cristales unidimensionales de distintos materiales poseen frecuencias fundamentales diferentes.

Haciendo un proceso análogo para la entropía entonces se tiene

$$\begin{aligned}
S &= K_B \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \left[ \frac{\hbar\omega\beta}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) \right] \left( \frac{L}{\pi v_p} \right) d\omega \\
&= \frac{K_B L}{\pi v_p} \int_0^{x_{\text{máx}}} \left[ \frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x}) \right] \frac{dx}{\hbar\beta}; \quad x = \hbar\omega\beta \\
&= \frac{NK_B}{\omega_{\text{máx}} \hbar\beta} \int_0^{x_{\text{máx}}} \left[ \frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x}) \right] dx \\
&= \frac{NK_B^2 T}{\omega_{\text{máx}} \hbar} \int_0^{x_{\text{máx}}} \left[ \frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x}) \right] dx \\
&= \frac{NK_B \omega_0 T}{\omega_{\text{máx}} T_0} \int_0^{x_{\text{máx}}} \left[ \frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x}) \right] dx
\end{aligned}$$

por lo que la forma analítica de la entropía usando la aproximación de Debye es

$$S = NK_B \mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} \left[ \frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x}) \right] dx. \quad (2.88)$$

Finalmente, se puede calcular la capacidad calorífica  $C_L$

$$\begin{aligned}
C_L &= K_B \int_0^{\omega_{\text{máx}}} \frac{(\hbar\omega\beta)^2 e^{\hbar\omega\beta}}{(e^{\hbar\omega\beta} - 1)^2} g(\omega) d\omega \\
&= K_B \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{(\hbar\omega\beta)^2 e^{\hbar\omega\beta}}{(e^{\hbar\omega\beta} - 1)^2} \left( \frac{L}{\pi v_p} \right) d\omega \\
&= \frac{LK_B}{\pi v_p} \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \frac{dx}{\hbar\beta}; \quad x = \hbar\omega\beta \\
&= \frac{NK_B^2 T}{\omega_{\text{máx}} \hbar} \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx; \quad \beta = \frac{1}{K_B T} \\
&= \frac{NK_B \omega_0 T}{\omega_{\text{máx}} T_0} \int_0^{x_{\text{máx}}} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx
\end{aligned}$$

es así que la expresión analítica para la capacidad calorífica se puede compactar como

$$C_L = NK_B \mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (2.89)$$

Ahora un breve análisis de  $C_L$  para altas y bajas temperaturas. Primeramente, para altas temperaturas y considerando que  $\omega$  es finito, entonces  $x = \hbar\omega\beta$  se hace muy pequeño, es decir,  $x \rightarrow 0$ , en esta situación el integrando en (2.89) se puede

desarrollar en **serie de Taylor** hasta orden cuadrático obteniendo así

$$\begin{aligned} C_L &\approx NK_B\mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} \frac{x^2(1+x+\frac{x^2}{2})}{((1+x+\frac{x^2}{2})-1)^2} dx \\ &\approx NK_B\mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} \frac{x^2}{x^2} dx \\ &\approx NK_B\mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} dx. \end{aligned}$$

de esta manera es inmediato que la capacidad calorífica para altas temperaturas es simplemente

$$C_L = NK_B, \quad (2.90)$$

por lo que a temperaturas altas se recupera el caso clásico que es conocido como la **ley de Dulong-Petit**.

Partiendo nuevamente de la ecuación (2.90) pero ahora considerando el régimen de temperaturas bajas, se tiene que  $1/\mathcal{T} \rightarrow \infty$  por lo que la integral se modifica como

$$C_L = NK_B\mathcal{T} \int_0^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx,$$

para resolver la integral anterior se usará la siguiente igualdad

$$\zeta(s)\Gamma(s) = \int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx; \quad s > 1,$$

donde  $\zeta(s)$  es la función zeta de Riemann y  $\Gamma(s)$  es la función Gamma de Euler. Integrando por partes el miembro de la derecha se tiene que

$$\zeta(s)\Gamma(s) = \frac{x^s}{s(e^x - 1)} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty \frac{x^s e^x}{s(e^x - 1)^2} dx,$$

notando que el primer término del miembro de la derecha de la ecuación anterior se anula, entonces

$$s\Gamma(s)\zeta(s) = \int_0^\infty \frac{x^s e^x}{(e^x - 1)^2} dx,$$

usando las propiedades de la función Gamma y en el caso particular cuando  $s = 2$  entonces

$$\Gamma(3)\zeta(2) = \int_0^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx,$$

dado que la función gamma se reduce a  $\Gamma(n) = (n-1)!$  cuando  $n$  es un número natural, entonces

$$C_L = (NK_B\mathcal{T})(2!)\zeta(2),$$

obteniendo finalmente que

$$C_L = \kappa N K_B T, \quad (2.91)$$

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3\sqrt{\Lambda_{\text{máx}}}T_0}$$

con esto se ha mostrado que a bajas temperaturas con la aproximación de Debye el calor específico tiene un comportamiento lineal.



# 3 Breve introducción a la Teoría de Gráficas

Así como los diagramas de *Feynman* que con su simpleza codifican conceptos y cálculos que pueden intimidar a cualquiera, las gráficas, así con su sencillez que hay entre unir puntos con líneas, encierra un gran potencial para describir una cantidad de fenómenos muy amplia que van desde las ciencias sociales, sistemas biológicos, redes de computadoras y muchas otras aplicaciones [33]. Por esta razón, hoy en día, la *Teoría de Gráficas* o *Teoría de Grafos* ha tenido un importante auge, en particular por su gran efectividad para describir **sistemas complejos** o bien fenómenos que emergen de la colectividad de un sistema, en estos casos las gráficas reciben el nombre de **redes**. Particularmente el uso de redes en la descripción de estructuras atómicas como cristales es de gran ayuda pues permite una descripción matricial, en principio, siempre que las interacciones entre átomos sea lineal, es decir, desde la aproximación armónica.

A continuación se presentarán varias definiciones que son básicas para un entendimiento claro de este tema, la presente información se puede encontrar, con mucho más resultados y en mayor detalle, en las referencias [15, 16, 17, 18]. Lo primero que hay que hacer notar es que existen dos tipos de gráficas, las **gráficas dirigidas** o **digráficas** y las **gráficas no dirigidas**.

**Definición 3.1** [18] *Una gráfica no dirigida  $G$  es un par ordenado  $G = (V, E)$ , donde  $V$  es un conjunto finito no vacío y  $E$  es un conjunto cuyos elementos son parejas no ordenadas, es decir,*

$$E = \{\{u, v\} = \{v, u\} \mid u, v \in V\}. \quad (3.1)$$

*Al conjunto  $V$  se le conoce como conjunto de vértices o nodos y al conjunto  $E$  como el conjunto de las aristas o enlaces.*

**Definición 3.2** [17] *Una digráfica  $D$  es un par ordenado  $D = (V, E)$ , donde  $V$  es un conjunto finito no vacío y  $E \subseteq V \times V$ , es decir, un subconjunto del producto cartesiano de  $V$  consigo mismo, en símbolos*

$$E = \{(u, v) \mid u, v \in V\}. \quad (3.2)$$

Al igual que en la definición 3.1,  $V$  es el conjunto de los vértices y  $E$  el conjunto de las aristas.

Es conveniente dejar en claro que desde ahora solo se hará uso de las gráficas no dirigidas para los propósitos del presente trabajo.

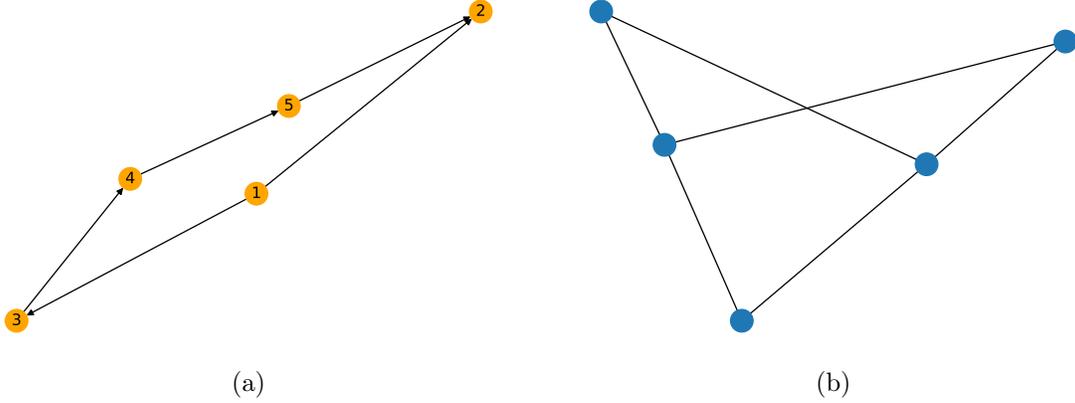


Figura 3.1: (a) Ejemplos de gráfica dirigida de cinco vértices. (b) Ejemplo de gráfica no dirigida simple con cinco vértices.

**Definición 3.3** [18] Sea  $G = (V, E)$  un gráfica no dirigida, si existe un elemento de la forma  $\{u, u\} \in E$ , entonces se dice que  $\{u, u\}$  es un **lazo** o **loop**.

**Definición 3.4** [18] Sea  $G = (V, E)$  un gráfica no dirigida. Se dice que dos **aristas** son **paralelas** si existen dos elementos en  $E$  con los mismos vértices.

**Definición 3.5** [18] Una gráfica no dirigida  $G = (V, E)$  se llama **simple** si no tiene aristas paralelas ni lazos.

Para evitar desviarse del tema principal del presente trabajo y eludir ambigüedades solo se tratará con gráficas no dirigidas simples por lo que los resultados que se mencionan, en adelante, únicamente harán referencia a este tipo de gráficas.

Si bien, ya se ha puntualizado que es lo que se entenderá cuando se haga referencia al concepto de gráfica, aún no se ha dicho nada acerca de su estructura, por lo que se continuará presentando algunas definiciones más con la finalidad de presentar un texto autocontenido.

**Definición 3.6** [18] Sea  $G = (V, E)$  una gráfica, sean  $v_i, v_j$  elementos de  $V$  tales que  $\{v_i, v_j\} \in E$ , entonces se dice que  $v_i$  es **adyacente** a  $v_j$ , o bien,  $v_j$  es adyacente a  $v_i$ .

**Definición 3.7** [18] Sea  $G = (V, E)$  una gráfica, sea  $v_i \in V$ . La **vecindad**  $N_{v_i}$  del vértice  $v_i$  es el conjunto de todos los vértices adyacentes al vértice  $v_i$ , es decir,

$$N_{v_i} = \{v_j \mid \{v_i, v_j\} \in E\}. \tag{3.3}$$

**Definición 3.8** [18] Sea  $V$  el conjunto de vértices de una gráfica  $G$ , el número de aristas que posee un vértice  $v_i \in V$  se le llama **grado** o **valencia** del vértice y se denota por  $g(v_i)$ . Nótese que  $g(v_i) = |N_{v_i}|$ , donde  $|N_{v_i}|$  es la cardinalidad del conjunto  $N_{v_i}$ .

A veces es de interés conocer el promedio de algunas de las cantidades relacionadas con las gráficas, por eso se presentarán algunas definiciones simples de estas cantidades.

**Definición 3.9** [15] *El grado promedio de una gráfica, es simplemente el promedio aritmético de los grados de todos los vértices de una gráfica, es decir,*

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_i k_i, \quad (3.4)$$

donde  $N$  es el número de vértices de una gráfica y  $k_i = g(v_i)$ .

Sea  $K_T$  el número total de aristas de una gráfica no dirigida, entonces se tiene que

$$K_T = \frac{1}{2} \sum_i k_i,$$

donde el factor de un medio aparece debido a que cada arista se cuenta dos veces, es así que el número promedio y el número total de aristas se pueden relacionar de la siguiente manera

$$K_T = \frac{N}{2} \langle k \rangle. \quad (3.5)$$

**Definición 3.10** [18] *Sea  $V$  el conjunto de vértices de una gráfica  $G$ . Si todos los vértices de una gráfica tienen el mismo grado, es decir,*

$$g(v) = \ell; \quad \ell \in \mathbb{R}, \quad \forall v \in V,$$

entonces se dice que la red es  $\ell$ -regular.

**Definición 3.11** [18] *Sea  $V$  el conjunto de vértices de una gráfica  $G$ . Se dice que  $G$  es **completa** si para cualquier par de vértices, entonces existe una arista que lo une; en símbolos se tiene*

$$G \text{ completa} \iff (\forall v, u \in V \implies \{v, u\} \in E).$$

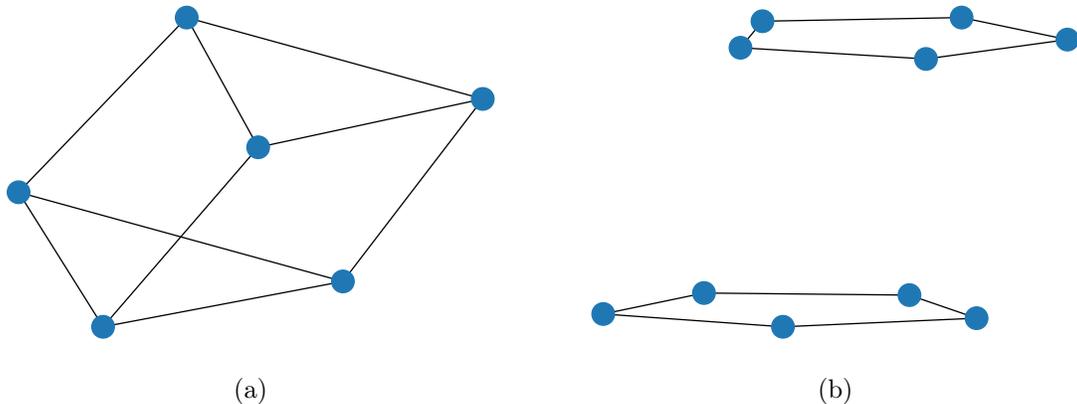


Figura 3.2: (a) Ejemplos de gráfica 3-regular de seis vértices . (b) Ejemplos de gráfica 2-regular de diez vértices.

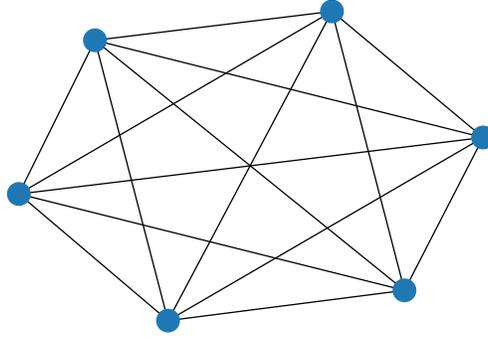


Figura 3.3: Gráfica completa de seis vértices

Algunos ejemplos de gráficas regulares se muestran en la figura 3.2, mientras que en la figura 3.3 se muestra una gráfica completa.

**Definición 3.12** [18] Un **camino**  $\mathbf{C}$  es una sucesión de  $l$  vértices  $[v_1, v_2, \dots, v_{l-1}, v_l]$  tales que  $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$ , donde  $i = 1, 2, \dots, l - 1$ . A los vértices  $v_1$  y  $v_l$  se les llaman **vértices extremos** mientras que a los vértices  $v_j$ ,  $j = 2, \dots, l - 1$ , se les llama **vértices interiores**. Si los vértices extremos son iguales, entonces  $\mathbf{C}$  se le llama **camino cerrado**.

Si a un camino se le prohíbe repetir vértices interiores, entonces se dice que el camino es una **trayectoria**  $\mathbf{T}$ , más aún, si los vértices extremos son iguales, entonces se dice que  $\mathbf{T}$  es una trayectoria cerrada. Si dos vértices  $u$  y  $v$  de una gráfica  $G$  están conectados mediante una trayectoria, entonces se dirá que  $u$  y  $v$  forman una  $uv$ -trayectoria.

**Definición 3.13** [18] Sea  $G = (V, E)$  una gráfica. Se dice que  $G$  es **conexa** si para todo par de vértices  $u, v \in V$  existe una  $uv$ -trayectoria, es decir, si  $u$  y  $v$  están conectados. Se dice que una gráfica es **disconexa** si no es conexa.

Ejemplo de una gráfica conexa se muestra en la figura 3.2a, mientras que una gráfica disconexa se muestra en 3.2b.

**Definición 3.14** [18] Al número de aristas de un camino  $\mathbf{C}$  se le denomina **longitud de camino** y se denota por  $\mathcal{L}(\mathbf{C})$ . En particular si se tiene una trayectoria, entonces la longitud de trayectoria se denotará por  $\mathcal{L}(\mathbf{T})$ .

**Definición 3.15** [18] Sea  $G$  una gráfica conexa. La **distancia** de dos vértices  $u, v \in V$ , denotada por  $d(u, v)$ , está dada por

$$d(u, v) = \begin{cases} \text{mín} \{ \mathcal{L}(\mathbf{T}) \mid \mathbf{T} \text{ es una } uv\text{-trayectoria} \} & \text{si } u \neq v, \\ 0 & \text{si } u = v. \end{cases} \quad (3.6)$$

Nótese que esta distancia satisface las propiedades usuales:

- i)  $d(u, v) \geq 0$  para todo  $u, v \in V$  y  $d(u, v) = 0 \iff u = v$ .
- ii)  $d(u, v) = d(v, u)$  para todo  $u, v \in V$ .
- iii)  $d(u, v) + d(v, w) \geq d(u, w)$  para todo  $u, v, w \in V$ .

**Definición 3.16** [15] Sea  $G$  una gráfica conexa. El **diámetro** de  $G$ , denotado por  $\mathcal{D}(G)$ , está dada por

$$\mathcal{D}(G) = \text{máx}\{d(u, v) \mid u, v \in V\}. \quad (3.7)$$

Para una gráfica no dirigida de  $N$  nodos, se tiene que el número total de posibles parejas es

$$\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2},$$

suponiendo que la red es conexa, entonces la distancia promedio será

$$\langle d \rangle = \frac{1}{\frac{N(N-1)}{2}} \frac{1}{2} \sum_i \sum_j d_{i,j}; \quad d_{i,j} = d(v_i, v_j),$$

el factor de un medio aparece puesto que  $d(v_i, v_j) = d(v_j, v_i)$ , por lo que

$$\langle d \rangle = \frac{1}{N(N-1)} \sum_i \sum_j d_{i,j}, \quad (3.8)$$

note que si  $N \gg 1$ , entonces  $\langle d \rangle$  se puede aproxima por

$$\langle d \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_i \sum_j d_{i,j}.$$

**Definición 3.17** [34] Una **gráfica cíclica**  $C_N$ , también conocida como **anillo** o **ciclo**, es una gráfica 2-regular de  $N$  nodos cuyo conjunto de aristas es

$$E = \{\{u_i, u_j\} \mid u_i, u_j \in V \text{ y } j = i + 1, \quad 1 \leq i \leq n - 1\} \cup \{u_1, u_n\}. \quad (3.9)$$

**Definición 3.18** [17] Una **gráfica estrella** de  $N$  nodos denotada por  $\mathcal{S}_N = (V, E)$ , es una gráfica que satisface las siguientes dos condiciones:

- i) Existe un nodo, llamado **nodo central**,  $v_c$  tal que su vecindad es  $N_c = V \setminus \{v_c\}$ .
- ii)  $g(v) = 1$  para todo  $v \in V \setminus \{v_c\}$ .

Una gráfica puede representarse usualmente por puntos y líneas, como se puede ver en la figuras 3.1, 3.2 y 3.3, los vértices son asociados a los puntos mientras que las aristas son asociadas a las líneas, sin embargo esta representación no es la única que se le puede dar a una gráfica y en mucho casos solo es útil visualmente. Una forma de abstraer una gráfica es usando matrices, de esta manera es posible obtener mucho más información de una red.

**Definición 3.19** [17] Sea  $G = (V, E)$  una gráfica, sea  $D_V = |V|$  la cardinalidad del conjunto de vértices, entonces la **matriz de adyacencia**  $\mathbb{A}_G$ , asociada a la gráfica  $G$ , es una matriz cuadrada  $D_V \times D_V$  que tiene por elementos

$$\mathbb{A}_{ij} = \begin{cases} 1, & (v_i, v_j) \in E \text{ e } i \neq j \\ 0, & \text{otro caso.} \end{cases} \quad (3.10)$$

Hay que hacer énfasis en que para gráficas simples y no-dirigidas, la matriz de adyacencia es simétrica. Es claro que esta matriz da como información qué vértices están conectados entre sí.

Otra matriz que brinda información importante es la **matriz de incidencia** pues permite ponderar cuantas conexiones o aristas tiene un vértice dado, a continuación se presenta su definición.

**Definición 3.20** [17] Sea  $G = (V, E)$  una gráfica, sea  $D_V = |V|$  la cardinalidad del conjunto de vértices, entonces la matriz de incidencia  $\mathbb{B}_G$ , asociada a la gráfica  $G$ , es una matriz cuadrada  $D_V \times D_V$  que tiene por elementos

$$\mathbb{B}_{ij} = \begin{cases} g(v_i), & i = j \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (3.11)$$

Las matrices anteriores brindan información parcial de una red cualquiera, sin embargo, la información contenida en ambas se puede englobar en una sola matriz, a dicha matriz se le conoce como la **matriz Laplaciana**, **matriz dinámica** o **matriz de Kirchhoff** [24, 17].

**Definición 3.21** [17] Sea  $G = (V, E)$  una gráfica, sea  $D_V = |V|$  la cardinalidad del conjunto de vértices, entonces la matriz de laplaciana  $\mathbb{L}_G$ , asociada a la gráfica  $G$ , es una la matriz cuadrada  $D_V \times D_V$  dada por

$$\mathbb{L}_G = \mathbb{B}_G - \mathbb{A}_G. \quad (3.12)$$

Se uso el subíndice  $G$  en la matrices anteriores para hacer énfasis en que son la matrices asociadas a la gráfica  $G$ , sin embargo en lo sucesivo se omitirá dicho subíndice y se emplearán únicamente cuando el contexto no sea claro respecto a qué matriz se hace referencia.

### 3.1. Teoría espectral de gráficas

Esta sección será corta en relación a las antes presentadas, sin embargo, es importante incluirla pues ofrecerá las herramientas necesarias para describir sistemas físicos a partir de redes.

Ya se ha visto como una gráfica puede ser representada por la matriz Laplaciana asociada, por esta razón, lo que se pretende en sección es abordar algunas de las propiedades que posee dicha matriz.

Aunque ya se menciono anteriormente, las gráficas de interés serán simples y no-dirigidas, en este supuesto la matriz de adyacencia es simétrica, véase ecuación (3.4), y dado que la matriz de incidencia es diagonal por definición, entonces la matriz laplaciana es simétrica, entonces esta es la primer propiedad de  $\mathbb{L}$ .

A continuación se presentan tres propiedades más, las cuales serán de suma importancia más adelante.

**Proposición.** La matriz laplaciana  $\mathbb{L}$  tiene la siguientes propiedades:

1.  $\mathbb{L}$  es semidefinida positiva, es decir, si  $\mathbf{v}$  es una vector no nulo de dimensión  $D_{\mathbf{v}}$ , entonces  $\mathbf{v}^T \mathbb{L} \mathbf{v} \geq 0$ .
2. Los eigenvalores de  $\mathbb{L}$  son números reales mayores o iguales a cero.
3.  $\mathbb{L}$  es diagonalizable.

La demostración de esta proposición es fácil puesto que es un caso particular de un teorema más general que afirma que *toda matriz simétrica con entradas en un campo  $\mathbb{F}$  es congruente a una matriz diagonal* y del **Teorema de Descomposición Espectral**, ambos resultados se pueden encontrar en [13].

Por esta razón la presente sección lleva el nombre de *Teoría Espectral de Gráficas*, pues lo que se pretende hallar es el espectro de la matriz  $\mathbb{L}$ , pues como se pudo desarrollar en el capítulo anterior, dicho espectro contienen información importante del sistema.

En la sección 2.2 del capítulo anterior se realizó un análisis matricial de la cadena lineal como se acostumbra a hacer en *Mecánica Clásica*, véase [14], sin embargo, con las definiciones mostradas en este capítulo se puede caer en cuenta que la cadena lineal se puede abordar desde la perspectiva de la redes.

Para puntualizar lo antes mencionado considérese la cadena lineal cristalina con condiciones periódicas (anillo), debe ser claro que al representar dicho sistema como una red regular cíclica  $\mathcal{C}_{N_T}$ , donde  $N_T$  es el número de partículas que la constituyen, entonces la matriz  $\mathbb{L}$  en (2.43), coincide con la matriz laplaciana  $\mathbb{L}_{\mathcal{C}_{N_T}}$ . Con esto se ha encontrado un red equivalente al sistema de osciladores equivalentes y con la misma matriz dinámica por lo que la información que se obtenga en la red se verá reflejada en el sistema.

Es importante mencionar que las raíces cuadradas de los eigenvalores de la matriz laplaciana siempre se ordenan de menor a mayor, esto no afecta en nada la dinámi-

ca del sistema pues éstos valores son invariantes ante cambios de filas y renglones [13].

## 3.2. Redes complejas

Siguiendo esta línea de pensamiento entonces se pueden introducir las **redes complejas** para un estudio similar al de la cadena lineal.

Si bien es cierto que hoy en día no hay una definición universal de lo que es un **sistema complejo**, esto no es una limitante para tratar con ellos, para proceder se tendrán que caracterizar los sistemas complejos: 1) poseen varios componentes o constituyentes, 2) exhiben colectividad (alta correlación) es decir, que si alguno de los constituyentes se modifica en al menos alguna de sus características, entonces el comportamiento colectivo de todo el sistema cambia notoriamente, 3) son distinguidos por la presencia de fenómenos emergentes, esto quiere decir que aún conociendo todas las variables relevantes de sus componentes la información no es suficiente para poder describirlo de manera completa [33].

Particularmente, muchos sistemas complejos pueden abordarse desde la perspectiva de redes, en estos casos las redes se llaman **redes complejas**, que presentan características diferentes en su estructura topológica respecto a las redes regulares, por el momento solo basta decir que el término **topología de red** hace referencia a la manera en que se distribuyen los enlaces entre los nodos de una red, pero esto se abordará con mayor detalle más adelante.

Una red posee en general ciertos elementos que le dan una estructura básica tales como lo son los nodos, la conectividad, etcétera, sin embargo, las redes complejas no se pueden describir completamente solo con estos parámetros, habrá que introducir conceptos nuevos.

**Definición 3.22** [17] *El coeficiente de agrupamiento local está dado por*

$$C_i = \begin{cases} \frac{2L_i}{k_i(k_i - 1)} & \text{si } k_i \geq 2, \\ 0 & \text{si } k_i < 2, \end{cases} \quad (3.13)$$

donde  $k_i$  es el grado del  $i$ -ésimo nodo y  $L_i$  es el número de enlaces que hay entre los elementos de la vecindad de  $i$ -ésimo nodo.

En palabras, este coeficiente proporciona una medida de qué tan conectados están entre sí los vecinos de un nodo, de aquí que se defina como una medida local.

**Definición 3.23** [17] *El coeficiente de agrupamiento promedio o coeficiente de agrupamiento de red es simplemente el promedio aritmético de los coeficientes de agrupamiento local, es decir,*

$$\langle C \rangle = \frac{1}{N} \sum_j C_j. \quad (3.14)$$

**Observación:** En ciencia de redes el diámetro de una red se acostumbra a llamar **longitud de red**.

**Definición 3.24** [17] *La distribución de grado  $\mathcal{P}_k$  proporciona la probabilidad de que un nodo seleccionado al azar tenga grado  $k$ .*

Puesto que  $\mathcal{P}_k$  es una probabilidad, entonces debe estar normalizada, es decir,

$$\sum_k \mathcal{P}_k = 1, \quad (3.15)$$

considerando que además las redes poseen un número finito  $N$  de nodos, entonces es inmediato que

$$\mathcal{P}_k = \frac{N_k}{N}, \quad (3.16)$$

donde  $N_k$  es el número de nodos con grado  $k$ . Es así que conocer la distribución de grado de una red va a ser de suma importancia, puesto que es ésta la que nos indicará la estructura que posea dicha red, el tipo distribución de grado que posea una red define su topología.

De probabilidad se sabe que si se conoce la distribución de probabilidad, entonces se puede conocer el  $n$ -ésimo momento de una cantidad, en particular el primer momento, que para este caso, el grado promedio de la red se puede obtener vía

$$\langle k \rangle = \sum_k k \mathcal{P}_k. \quad (3.17)$$

Si bien existen otras propiedades importantes en el estudio de las redes, abordarlas en este trabajo significaría ampliar en demasía el presente escrito y realmente no sería de utilidad para los propósitos contemplados, por esta razón no se presentarán más resultados de teoría de redes en general. Como siguiente paso, lo que se llevará a cabo es un análisis de las redes empleadas en este trabajo.

### 3.3. Redes de mundo pequeño: Modelo de Watts-Strogatz

Watts y Strogatz vinieron a revolucionar la manera de concebir las redes con su artículo “*Collective dynamics of ‘small world’ networks*” [25], pues si bien ya se habían estudiado con anterioridad redes regulares y redes completamente aleatorias, como las **redes Ęrdos-Renyi**, también era cierto que estos dos tipos de redes no eran adecuadas para modelar sistemas reales, sin importar cual fuese su naturaleza, ya que cada una de éstas presenta características muy diferentes que en ocasiones no describían de manera correcta el fenómeno de interés.

Es entonces que se presenta la idea de describir fenómenos de tal manera que las redes asociadas no fueran regulares ni aleatorias. En pocas palabras, una **red de mundo pequeño** es aquella en la que la longitud de red es pequeña, esto tiene como consecuencias que todos los nodos están “separados” por distancias pequeñas, coloquialmente, por unos cuantos saltos.

Sea  $\mathbf{K}_i(d)$  el número de nodos a distancia  $d$  del  $i$ -ésimo nodo, entonces  $\mathbf{K}_i(1) \approx \langle k \rangle$  pues cada nodo tiene en promedio  $\langle k \rangle$  enlaces, así  $\mathbf{K}_i(2) \approx \langle k \rangle^2$  ya que cada nodo conectado al  $i$ -ésimo tiene en promedio  $\langle k \rangle$  aristas, así en general para el  $i$ -ésimo nodo

$$\mathbf{K}_i(d) = \langle k \rangle^d. \quad (3.18)$$

Si ahora se define  $\mathcal{N}_i(d)$  como el número de nodos que distan, a lo más,  $d$  del nodo  $i$ , entonces

$$\mathcal{N}_i(d) = \sum_{j=0}^d \langle k \rangle^j, \quad (3.19)$$

note que  $j$  comienza en cero puesto que solo hay un nodo a distancia cero del  $i$ -ésimo nodo, y es él mismo. Puesto que  $d$  es finito, la ecuación anterior puede reescribirse como

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_i(d) &= 1 + \langle k \rangle + \langle k \rangle^2 + \cdots + \langle k \rangle^d, \\ \langle k \rangle \mathcal{N}_i(d) &= \langle k \rangle + \langle k \rangle^2 + \langle k \rangle^3 + \cdots + \langle k \rangle^d + \langle k \rangle^{d+1}, \\ \langle k \rangle \mathcal{N}_i(d) &= 1 + \langle k \rangle + \langle k \rangle^2 + \cdots + \langle k \rangle^d + \langle k \rangle^{d+1} - 1, \\ \langle k \rangle \mathcal{N}_i(d) &= \mathcal{N}_i(d) + \langle k \rangle^{d+1} - 1, \end{aligned}$$

por lo tanto el número de nodos hasta la distancia  $d$  en estas redes, está dado por

$$\mathcal{N}_i(d) = \frac{\langle k \rangle^{d+1} - 1}{\langle k \rangle - 1}. \quad (3.20)$$

Sea  $d_{\text{máx}}$  la distancia máxima a la que puede estar un nodo del  $i$ -ésimo nodo, entonces  $d_{\text{máx}} = \mathcal{D}(G_{SW})$ , donde  $G_{SW}$  es una red de mundo pequeño, y considerando que una de las características principales de redes de mundo pequeño es que todos los nodos están conectados por distancias cortas y suponiendo que  $\langle k \rangle \gg 1$  para redes “grandes”, entonces  $\langle k \rangle - 1 \approx \langle k \rangle$ , así

$$\mathcal{N}_i(d_{\text{máx}}) = \langle k \rangle^{d_{\text{máx}}},$$

puesto que se ha definido a  $\mathcal{N}_i(d)$  como el número de nodos a distancia a lo más  $d$ ; cuando la distancia es máxima entonces se han contado todos los nodos de la red, es decir,

$$\mathcal{N}_i(d_{\text{máx}}) = N,$$

donde  $N$  es el número total de nodos, así se debe satisfacer que

$$\langle k \rangle^{d_{\text{máx}}} = N,$$

o equivalentemente

$$\mathcal{D}(G_{SW}) = \frac{\ln(N)}{\ln(\langle k \rangle)}, \quad (3.21)$$

concluyendo que el diámetro de una red de mundo pequeño satisface que

$$\mathcal{D}(G_{SW}) \sim \ln(N). \quad (3.22)$$

Debe hacerse énfasis que, dado el espectro (conjunto de eigenvalores de la matriz Laplaciana), entonces dicho espectro no necesariamente tiene una representación matricial única ya que, como se mencionó anteriormente, el espectro es invariante ante cambios de renglones, por lo que en principio no podría hallarse una única gráfica que corresponda al espectro.

### 3.3.1. Redes WS

Al inicio de esta sección se abordó el fenómeno de mundo pequeño en redes, ahora habrá que puntualizar como es que se construirán las redes que se emplearán en el presente trabajo, primero se tendrá que generalizar el concepto de anillo.

**Definición 3.25** [34] Sea  $C_N$  un anillo y  $v \in V$ , con  $V$  el conjunto de nodos. Los  $\ell$ -vecinos más cercanos de  $v$  es un conjunto de nodos tales que

$$N_v(\ell) = \{u \in V | d(v, u) \leq \ell\}. \quad (3.23)$$

Nótese que los valores de  $\ell$  están acotados por  $1 \leq \ell \leq \frac{N}{2}$ , si  $N$  es par y  $1 \leq \ell \leq \frac{N-1}{2}$ , si  $N$  es impar.

**Definición 3.26** [34] Sea  $C_N$  un anillo y  $k = |N_v(\ell)|$ . Si para cada nodo de  $C_N$  se añade un enlace con sus primeros  $\ell$ -vecinos, entonces la red generada se llama  $k$ -anillo y se denota por  $C_N(k)$

De la definición anterior se pueden señalar varias cosas, puesto que las redes consideradas son simples y no dirigidas,  $k = |N_v(\ell)|$  proporciona el grado de cada nodo en un  $k$ -anillo, en adición  $k$  siempre es par, salvo en el caso en el que  $\ell = \frac{N}{2}$ , para  $N$  par, en este caso  $k = N - 1$ , además  $C_N(k)$  es una red  $k$ -regular conexa.

**Algoritmo 3.1** Sea  $C_N(k)$  un  $k$ -anillo de  $N$  nodos y sea  $v_1$  un nodo arbitrario pero fijo en la red, entonces, este primer nodo tiene probabilidad  $P$  de que uno de sus enlaces, elegido al azar, sea **reconectado** a un nodo con el que no este conectado, elegido aleatoriamente, este proceso continua hasta que se haya completado un **barrido** en toda la red, es decir una vez por cada nodo.

**Definición 3.27** Una red generada con el algoritmo 3.1 se llama **red de Watts-Strogatz tipo WS** y se denota por  $G_{WS}(N, k, P)$ .

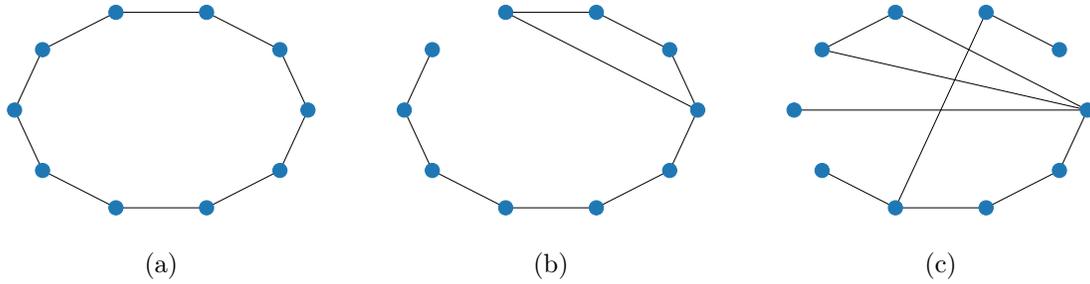


Figura 3.4: Ejemplos de redes  $G_{WS}(10, 2, P)$  con distintas probabilidades. a)  $P = 0$ , b)  $P = 0.1$ , c)  $P = 0.5$ .

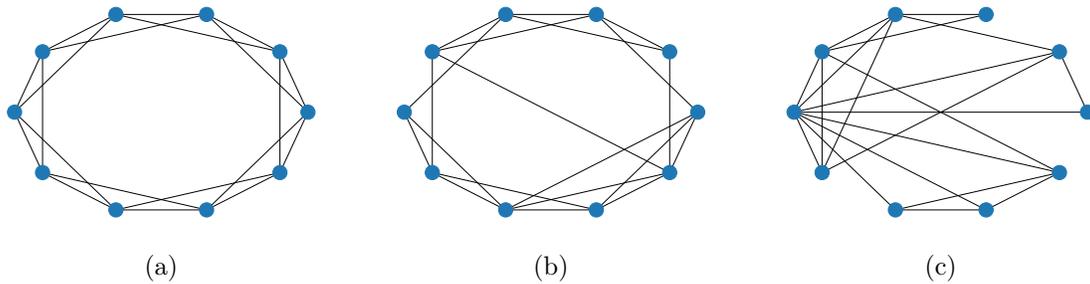


Figura 3.5: Ejemplos de redes  $G_{WS}(10, 4, P)$  con distintas probabilidades. a)  $P = 0$ , b)  $P = 0.1$ , c)  $P = 0.5$ .

| Probabilidad | $\langle C \rangle_{prom}$ | $\delta_C$  | $\mathcal{D}_{prom}$ | $\delta_{\mathcal{D}}$ |
|--------------|----------------------------|-------------|----------------------|------------------------|
| 0            | 0.5                        | 0           | 500                  | 0                      |
| 0.0001       | 0.4998660                  | 0.000237690 | 495.725              | 19.02602               |
| 0.001        | 0.4985577                  | 0.000792246 | 361.335              | 89.48952               |
| 0.01         | 0.4861667                  | 0.002345165 | 86.925               | 14.13501               |
| 0.1          | 0.3725044                  | 0.006395815 | 19.598               | 1.100730               |
| 0.5          | 0.0682638                  | 0.004854140 | 10.44                | 0.497633               |
| 0.9          | 0.0020596                  | 0.000779593 | 9.85                 | 0.357967               |
| 1            | 0.0015716                  | 0.000681028 | 9.74                 | 0.439734               |

Tabla 3.1: Cantidades promedio con su respectiva desviación estándar de redes  $G_{WS}(1000, 4, P)$  para diferentes valores de probabilidad. Coeficiente de agrupamiento promedio de una red  $\langle C \rangle$ , promedio de sobre mil realizaciones, y de la longitud de red  $\mathcal{D}$ , promedio de sobre doscientas realizaciones.

En la tabla 3.1 se muestran algunos valores de los coeficientes de agrupamiento de red y de la longitud de red para redes  $G_{WS}(2000, 4, P)$ . Como se puede ver en dicha tabla, tanto  $\langle C \rangle$  como  $\mathcal{D}$  son cantidades que disminuyen a medida que la probabilidad  $P$  crece, esto quiere decir a mayor probabilidad los nodos están localmente menos conectados pero a nivel global es más “fácil” llegar de un nodo a otro. Este

comportamiento se replica al esperado mostrado en [19].

Es necesario señalar que los mismos cálculos que se muestran en la tabla 3.1 se realizaron para redes  $G_{WS}(2000, 2, P)$  sin embargo, en estos casos el coeficiente de red para estas redes estaban muy cercanos a cero, el más alto fue de  $\langle C \rangle_{prom} \approx 10^{-4}$ , además de que  $\langle C \rangle_{prom}$  crecía conforme lo hacía  $P$ , por lo que en este particular, aunque la longitud de red disminuyó como se esperaba, el coeficiente de red no tiene un comportamiento de mundo pequeño por lo que el régimen para que se presente este fenómeno es con un valor de  $k > 2$ .

Nótese que  $G_{WS}(N, 2, 0)$  recupera el caso de la cadena lineal monoatómica de  $N$  átomos, por lo que, aún sabiendo que  $G_{WS}(N, 2, P)$  no es exactamente una red de mundo pequeño, por el comportamiento anómalo en el coeficiente de red, también se incluirán estas redes en el entendido de que su análisis se puede pensar como una generalización de la cadena lineal.

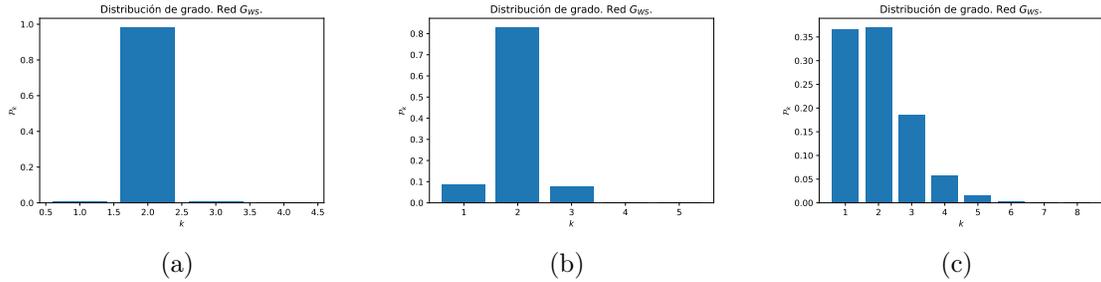


Figura 3.6: Distribuciones de grado para redes  $G_{WS}(2000, 2, P)$  (a) Probabilidad de reconexión  $P = 0.01$ . (b) Probabilidad de reconexión  $P = 0.1$ . (c) Probabilidad de reconexión  $P = 0.9$ .

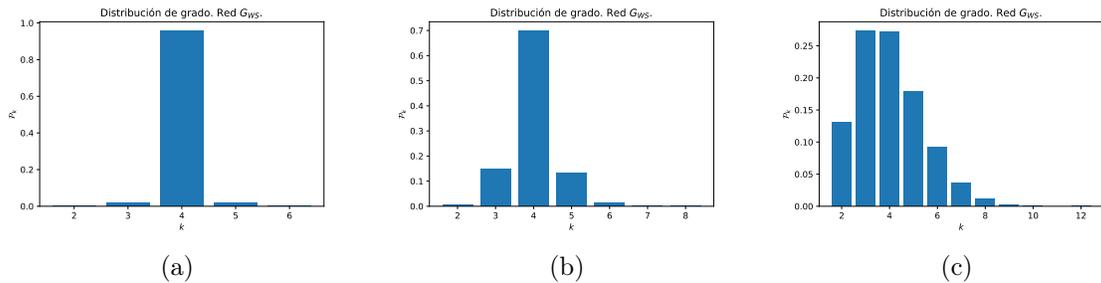


Figura 3.7: Distribuciones de grado para redes  $G_{WS}(2000, 4, P)$  (a) Probabilidad de reconexión  $P = 0.01$ . (b) Probabilidad de reconexión  $P = 0.1$ . (c) Probabilidad de reconexión  $P = 0.9$ .

Para concluir con las redes  $G_{WS}$  simplemente se mostrarán de manera gráfica algunas distribuciones de grado para diferentes valores de  $P$ , tanto para redes  $G_{WS}(N, 2, P)$  como para redes  $G_{WS}(N, 4, P)$  con el fin de mostrar que en estas redes la distribución se puede aproximar muy bien por una **distribución de Poisson** y

hacer notar que es la distribución la que le proporciona las características a una red compleja.

### 3.3.2. Redes NWS

Ahora se presentarán otro tipo de redes de mundo pequeño, que son una variante de las redes **WS**.

**Algoritmo 3.2** Sea  $C_N(k)$  un  $k$ -anillo de  $N$  nodos y sea  $v_1$  un nodo arbitrario pero fijo en la red, entonces, este primer nodo tiene probabilidad  $P$  de **generar** un enlace con un nodo con el que no este conectado, elegido aleatoriamente, este proceso continua hasta que se haya completado un barrido en toda la red, es decir una vez por cada nodo.

**Definición 3.28** Una red generada con el algoritmo 3.2 se llama **red de Newman-Watts-Strogatz** o **red de Watts-Strogatz tipo NWS** y se denota por  $G_{NWS}(N, k, P)$ .

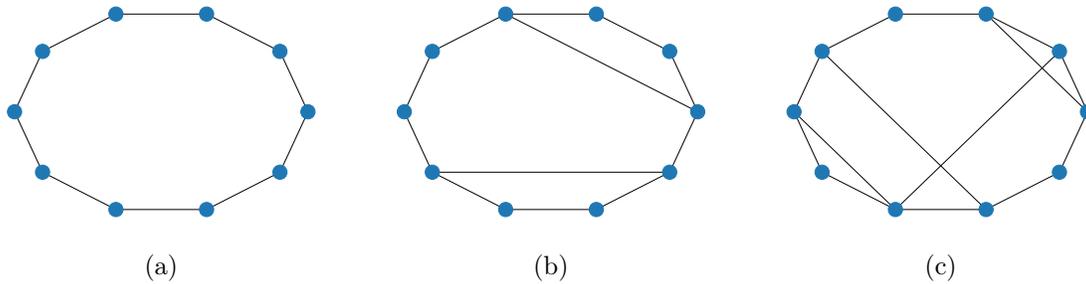


Figura 3.8: Ejemplos de redes  $G_{NWS}(10, 2, P)$  con distintas probabilidades. a)  $P = 0$ , b)  $P = 0.1$ , c)  $P = 0.5$ .

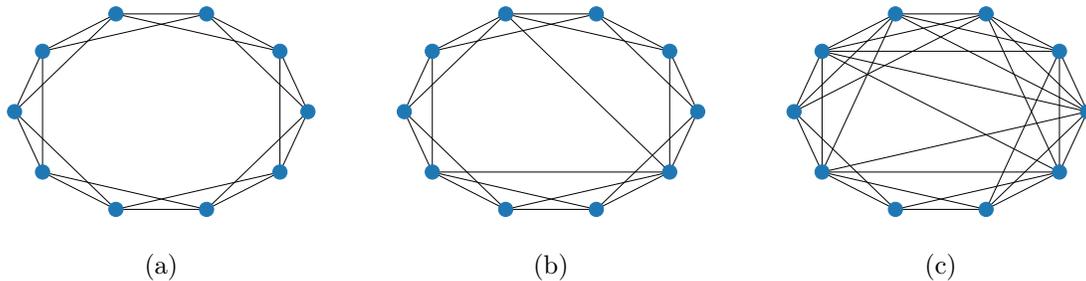


Figura 3.9: Ejemplos de redes  $G_{NWS}(10, 4, P)$  con distintas probabilidades. a)  $P = 0$ , b)  $P = 0.1$ , c)  $P = 0.5$ .

En la tabla 3.2 se muestran algunos valores de los coeficientes de agrupamiento de red y de la longitud de red para redes  $G_{NWS}(2000, 4, P)$ .

| Probabilidad | $\langle C \rangle$ | $\delta_C$ | $\langle \mathcal{D} \rangle$ | $\delta_{\mathcal{D}}$ |
|--------------|---------------------|------------|-------------------------------|------------------------|
| 0            | 0.5                 | 0.0        | 500                           | 0.0                    |
| 0.0001       | 0.49992473          | 0.0001246  | 495.550                       | 20.98689               |
| 0.001        | 0.4992011           | 0.0003782  | 358.745                       | 81.52411               |
| 0.01         | 0.4921000           | 0.0012092  | 86.565                        | 13.48238               |
| 0.1          | 0.4270360           | 0.0031694  | 18.715                        | 1.170738               |
| 0.5          | 0.2337641           | 0.0028768  | 8.090                         | 0.286900               |
| 0.9          | 0.1365623           | 0.0010436  | 6.240                         | 0.428155               |
| 1            | 0.1208708           | 0.0004809  | 6.00                          | 0.00                   |

Tabla 3.2: Cantidades promedio, con su respectiva desviación estándar, de redes  $G_{NWS}(N, 4, P)$  para diferentes valores de probabilidad. Coeficiente de agrupamiento promedio de una red  $\langle C \rangle$ , promedio de sobre mil realizaciones, y de la longitud de red  $\mathcal{D}$ , promedio de sobre doscientas realizaciones.

Finalmente, se mostrarán de manera gráfica algunas distribuciones de grado para diferentes valores de  $P$ , tanto para redes  $G_{NWS}(N, 2, P)$  como para redes  $G_{NWS}(N, 4, P)$ .

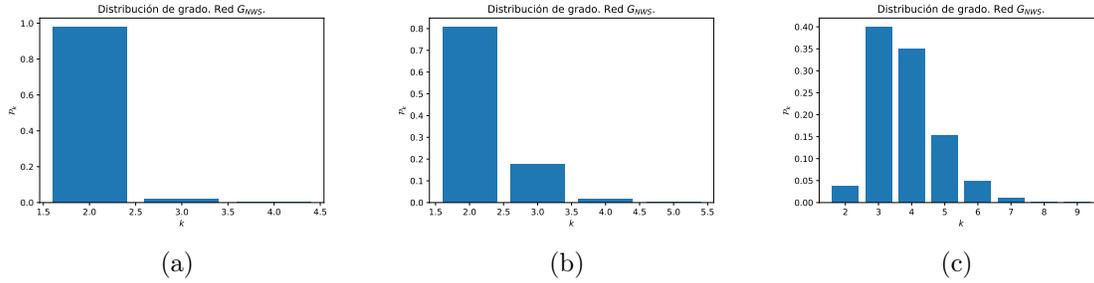


Figura 3.10: Distribuciones de grado para redes  $G_{NWS}(2000, 2, P)$  (a) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.01$ . (b) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.1$ . (c) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.9$ .

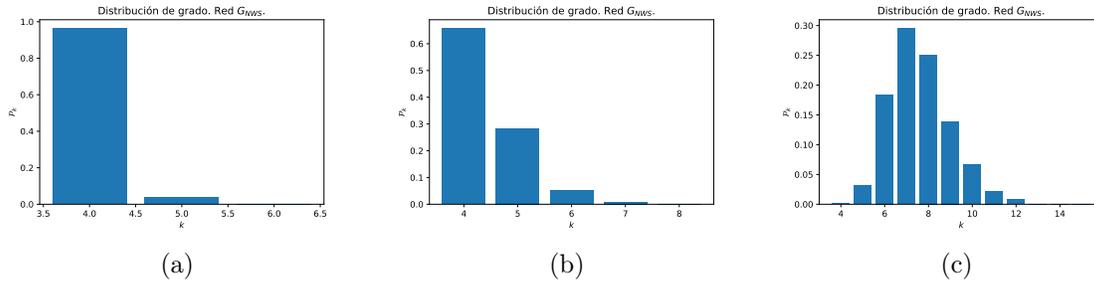


Figura 3.11: Distribuciones de grado para redes  $G_{NWS}(2000, 4, P)$  (a) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.01$ . (b) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.1$ . (c) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.9$ .

De acuerdo a las figuras 3.6, 3.7, 3.10 y 3.11 las distribuciones de grado de las redes **WS** y **NWS** pueden aproximarse por una distribución de Poisson.

### 3.4. Árboles de Cayley complejos

Para introducir los árboles de Cayley complejos primero habrá que entender que es un árbol, por lo que se introducirán algunas definiciones previas a la de árbol de Cayley complejo.

**Definición 3.29** [18] Sea  $G(V, E)$  una gráfica. Se dice que  $G'$  es **subgráfica** de  $G$  si se cumple que

$$V' \subseteq V, \quad (3.24a)$$

$$E' \subseteq E, \quad (3.24b)$$

donde  $V'$  y  $E'$  son el conjunto de nodos y de enlaces, respectivamente, de  $G'$ .

**Definición 3.30** [18] Un árbol es una red conexa en la cual no existe ninguna subgráfica que sea un ciclo.

**Definición 3.31** [15] Un **árbol de Cayley** de  $c$  capas y número de ramificación  $k - 1$ ,  $S(c, k)$ , es un árbol simétrico construido a partir de un nodo central de grado  $k$ , cada nodo a distancia  $d$  del nodo central tiene grado  $k$  salvo los nodos a distancia  $c$ , los cuales tienen grado uno y son llamados **nodos libres**.

Como en la sección anterior, se usará  $\mathbf{K}(d)$  como el número de nodos a distancia  $d$  y  $\mathcal{N}(d)$  como el número de nodos hasta la distancia  $d$ . Sea  $\mathbf{K}_{nc}(d)$  el número de nodos a distancia  $d$  del nodo central, es inmediato de su definición que  $\mathbf{K}_{nc}(1) = k$ , mientras que para  $d = 2$  se tiene  $\mathbf{K}_{nc}(2) = k(k - 1)$  ya que cada nodo de la primera capa está conectado con  $k - 1$  nodos, análogamente  $\mathbf{K}_{nc}(3) = k(k - 1)(k - 1)$ , así, de manera general se tiene que

$$\mathbf{K}_{nc}(d) = k(k - 1)^{d-1}, \quad 1 \leq d \leq c, \quad (3.25)$$

usando la ecuación anterior, es fácil ver que

$$\mathcal{N}_{nc}(d) = 1 + \sum_{j=1}^d k(k - 1)^{j-1}, \quad (3.26)$$

donde se ha contado al nodo central. La suma en (3.26) puede compactarse en una expresión, haciendo un proceso similar al que se realizó para la ecuación (3.20), hallando que

$$\mathcal{N}_{nc}(d) = \frac{k(k - 1)^d - 2}{k - 2}. \quad (3.27)$$

Sea  $d_{\text{máx}}$  la distancia máxima a la que pueden estar los nodos del nodo central, además se cumple que  $\mathcal{N}_{nc}(d_{\text{máx}}) = N$ , con  $N$  el número total de nodos, entonces

$$N = \frac{k(k - 1)^{d_{\text{máx}}} - 2}{k - 2},$$

resolviendo para  $d_{\text{máx}}$  se obtiene

$$\begin{aligned} N(k-2) + 2 &= k(k-1)^{d_{\text{máx}}}, \\ \ln(N[k-2] + 2) &= \ln(k) + d_{\text{máx}} \ln(k-1), \\ d_{\text{máx}} \ln(k-1) &= \ln(N[k-2] + 2) - \ln(k), \\ d_{\text{máx}} &= \frac{\ln(N[k-2] + 2) - \ln(k)}{\ln(k-1)}, \end{aligned}$$

nótese que si  $N \gg 1$  (redes grandes), entonces  $N(k-2) + 2 \approx N(k-2)$  en cuyo caso  $k \geq 3$ , en esta situación

$$\frac{\ln(k)}{\ln(k-1)} \approx 1,$$

con todas estas aproximaciones, el diámetro de un árbol de Cayley es

$$d_{\text{máx}} = \frac{\ln(N)}{\ln(k-1)}, \quad (3.28)$$

es decir,

$$d_{\text{máx}} \sim \ln(N). \quad (3.29)$$

En este sentido, se puede decir que un árbol de Cayley es una red de tipo mundo pequeño, sin embargo como se podrá ver a continuación, estos efectos desaparecen cuando se añaden enlaces con cierta probabilidad  $P$ . Así, se puede introducir una variante de estas redes.

**Algoritmo 3.3** Sea  $S_C(c, k, P)$  una red de árbol de Cayley, sean  $N$  el número total de nodos y  $u$  un nodo arbitrario en la red, pero fijo, cada enlace  $\{u, v\}$ ,  $v \in V$  tiene probabilidad  $P$  de ser añadido al conjunto de enlaces  $E$ , este proceso se repite para cada nodo en la red. El proceso anterior termina cuando se ha realizado una vez por cada nodo.

**Definición 3.32** Una red generada con el algoritmo 3.3 se llama **red de árbol Cayley complejo** y se denota por  $S_C(c, k, P)$ .

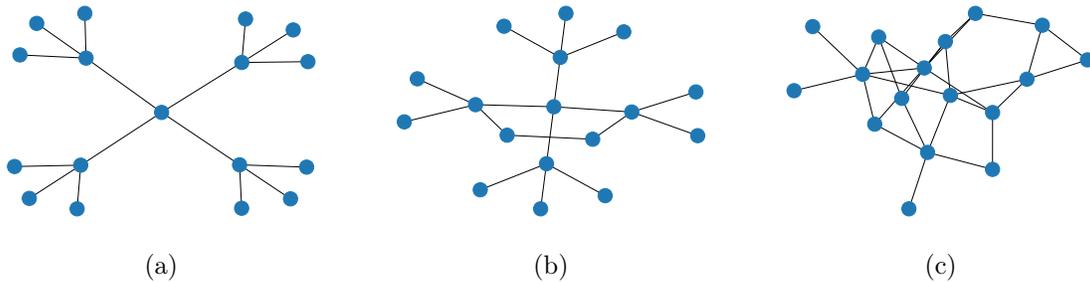


Figura 3.12: Ejemplos de redes  $S_C(2, 4, P)$  con distintas probabilidades. a)  $P = 0$ , b)  $P = 0.01$ , c)  $P = 0.1$ .

En la tabla 3.3 se muestran algunos valores de los coeficientes de agrupamiento de red y de la longitud de red para redes  $S_C(5, 5, P)$ .

| Probabilidad | $\langle C \rangle$ | $\delta_C$  | $\langle \mathcal{D} \rangle$ | $\delta_{\mathcal{D}}$ |
|--------------|---------------------|-------------|-------------------------------|------------------------|
| 0            | 0.0                 | 0.0         | 10.0                          | 0.0                    |
| 0.00001      | 0.000040            | 0.00020335  | 10.0                          | 0.0                    |
| 0.0001       | 0.0003212           | 0.000555223 | 10.0                          | 0.0                    |
| 0.001        | 0.0022251           | 0.0009677   | 9.985                         | 0.1218575              |
| 0.01         | 0.0112152           | 0.0003347   | 4.005                         | 0.0707106              |
| 0.1          | 0.1010620           | 0.0002550   | 2.04                          | 0.19645092             |
| 0.5          | 0.5008295           | 0.0004045   | 2.0                           | 0.0                    |
| 0.9          | 0.9000637           | 0.0001890   | 2.0                           | 0.0                    |
| 1            | 1.0                 | 0.0         | 1.00                          | 0.00                   |

Tabla 3.3: Cantidades promedio, con su respectiva desviación estándar, de redes  $S_C(5, 5, P)$  para diferentes valores de probabilidad. Coeficiente de agrupamiento promedio de una red  $\langle C \rangle$ , promedio de sobre cien realizaciones, y de la longitud de red  $\mathcal{D}$ , promedio de sobre doscientas realizaciones.

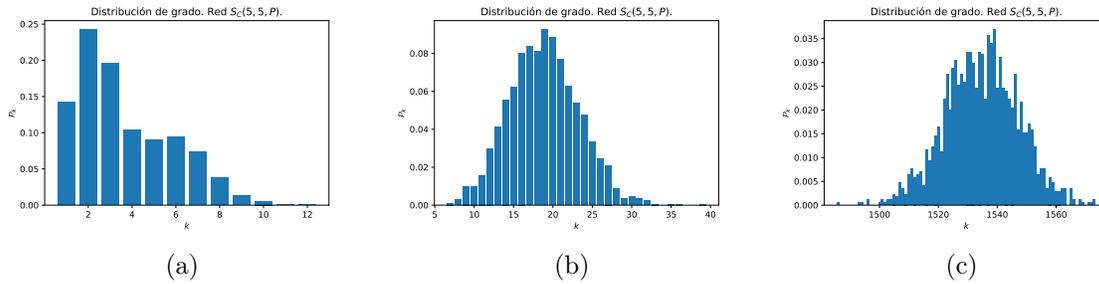


Figura 3.13: Distribuciones de grado para redes  $S_C(5, 5, P)$  (a) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.001$ . (b) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.01$ . (c) Probabilidad de generar un nuevo enlace de  $P = 0.9$ .

De acuerdo a las figuras 3.12 las distribuciones de grado de las  $S_C$  pueden aproximarse por una distribución de Gaussiana.

### 3.5. Redes libres de escala: Modelo de Barabási-Albert

Quizás la redes más interesantes de este análisis sean las redes generadas con el modelo de Barabási-Albert, puesto que son redes que evolucionan en el tiempo y que además tienen **conexión preferencial**, es decir, que los nodos con un mayor número de enlaces iniciales tendrán al final, un número mayor de conexiones que con los que iniciaron.

**Definición 3.33** [15] Sea  $G$  una red, y sea  $P_i$  la **probabilidad asociada a  $i$ -ésimo nodo** dada por

$$P_i = \frac{k_i}{\sum_j k_j}, \quad (3.30)$$

donde  $k_i$  es el grado del nodo  $i$  y el subíndice  $j$  corre sobre todos los nodos, entonces se dice que una red  $G$  tiene **conexión preferencial** si al añadir a  $G$  un nuevo nodo  $u_r$  con  $r$  nuevos enlaces, la probabilidad de que alguno de los  $r$  nuevos enlaces se conecte con un nodo de la red  $G$  está dada por (3.30).

Entonces es claro que una red con mayor cantidad de enlaces tiene una mayor probabilidad de que tenga un nuevo enlace, al añadir  $u_r$ , de la que tiene un nodo con menor cantidad de enlaces, además, si un nodo en  $G$  es aislado entonces este nodo permanecerá aislado al añadir el nuevo nodo.

**Algoritmo 3.4** [15] Sea  $G_0 = (V_0, E_0)$  una red conexa, la cual posee  $m_0$  enlaces conectados arbitrariamente, de tal manera que la red  $G_0$  siga siendo simple; sea  $t$  el número de pasos. En el primer paso se se añade un nuevo nodo con  $m \leq m_0$  enlaces que se conectan con  $m$  nodos distintos que ya existen en la red inicial  $G_0$ , con una conexión preferencial, generando una nueva red  $G_1$ , luego se repite el proceso del primer paso pero para la red  $G_1$ , este proceso se itera  $t$  veces. Nótese que la red final posee  $m_0 + t$  nodos y  $|E_0| + m t$  enlaces.

**Definición 3.34** Una red generada por el algoritmo 3.4 se le llama red de **Barabási-Albert** y se denota por  $G_{BA}(G_0, m, t)$ .

Debe aclararse que la definición 3.34 deja una ambigüedad para construir redes de *Barabási-Albert* ya que en principio la red inicial puede ser cualquiera que cumpla que con las condiciones establecidas en el algoritmo 3.4. Por esta razón y para evitar extender más allá de lo necesario el estudio de estas redes se optó por fijar como red inicial a una red estrella, más adelante se explicará el por qué de esta elección.

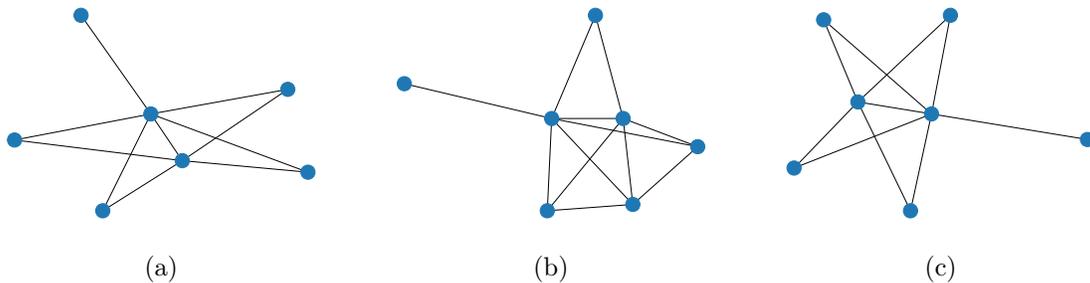


Figura 3.14: Ejemplos de redes  $G_{BA}$ . a)  $G_{BA}(\mathcal{S}_3, 2, 4)$ , b)  $G_{BA}(\mathcal{S}_5, 4, 2)$  y c)  $G_{BA}(\mathcal{S}_6, 5, 1)$ .

| $m_0$ | $\langle C \rangle$ | $\delta_C$ | $\langle \mathcal{D} \rangle$ | $\delta_{\mathcal{D}}$ |
|-------|---------------------|------------|-------------------------------|------------------------|
| 10    | 0.03719028          | 0.00153504 | 3.0                           | 0.0                    |
| 50    | 0.10898050          | 0.00131818 | 3.0                           | 0.0                    |
| 100   | 0.17239332          | 0.00047404 | 3.0                           | 0.0                    |
| 200   | 0.27026603          | 0.00053719 | 2.0                           | 0.0                    |
| 500   | 0.48067550          | 0.00068093 | 2.0                           | 0.0                    |
| 700   | 0.58962542          | 0.00055766 | 2.0                           | 0.0                    |
| 1000  | 0.72389189          | 0.00011529 | 2.0                           | 0.0                    |
| 1500  | 0.85478714          | 0.00006909 | 2.0                           | 0.0                    |
| 1900  | 0.95482608          | 0.00000004 | 2.0                           | 0.0                    |
| 1950  | 0.97621061          | 0.00000001 | 2.0                           | 0.0                    |
| 1999  | 0.0                 | 0.0        | 1.0                           | 0.0                    |

Tabla 3.4: Cantidades promedio, con su respectiva desviación estándar, de redes  $G_{BA}(N, m_0)$  para diferentes valores de probabilidad. Coeficiente de agrupamiento promedio de una red  $\langle C \rangle$ , promedio de sobre cien realizaciones, y de la longitud de red  $\mathcal{D}$ , promedio de sobre doscientas realizaciones.

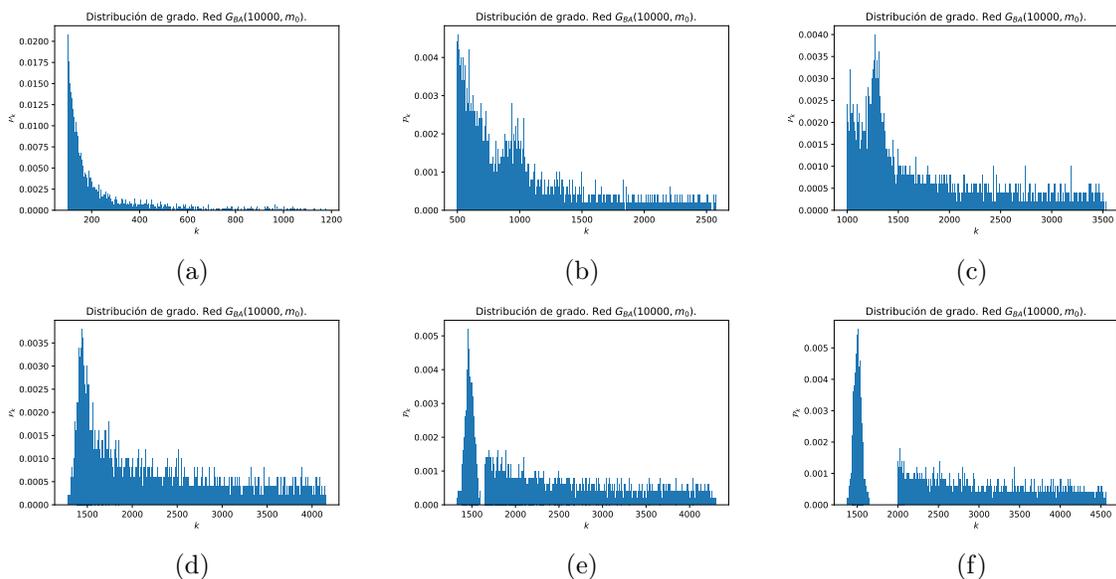


Figura 3.15: Distribuciones de grado de grado para redes BA.

Es fácil ver de las gráficas 3.15 que las distribuciones de grado de las redes de Barabási-Albert se pueden ajustar muy bien con una distribución de ley de potencia, sin embargo hay que hacer notar que cuando el numero de enlaces que se agregan se aproxima a

$$m \approx 0.30N, \quad (3.31)$$

entonces se genera una brecha, es decir que no hay, o son muy pocos nodos con un número de enlaces intermedio.

## 4 Efectos de la estructura de redes complejas en la termodinámica de osciladores lineales acoplados.

Hasta este punto se han introducido conceptos generales tanto de la física estadística como de la teoría de redes, como anteriormente se ha dicho, estas “poderosas” herramientas permiten abordar el estudio de diferentes tipos de fenómenos en ámbitos tan distintos como la física, la biología, ciencias sociales, etcétera. Sin embargo, estudiar dichos fenómenos podría resultar en estudios mucho más complicados quedando fuera del alcance de este trabajo, por esta razón y partiendo, a manera de motivación, de la cadena lineal monoatómica, es que se estudiarán sistemas de osciladores armónicos acoplados, sin interacciones disipativas, con la novedad de que la forma en que interactúan (como se conectan) dichos osciladores está determinada por una red compleja. En lo sucesivo se emplearán los términos oscilador o nodo de manera indistinta; además, a un conjunto de osciladores armónicos acoplados dispuestos en redes complejas serán llamados simplemente redes, mientras que las representaciones visuales de los datos obtenidos serán llamadas, como de costumbre, gráficas.

Es necesario mencionar una diferencia sutil en los sistemas aquí presentados respecto a la cadena lineal, la cadena lineal es un sistema físico que corresponde a un sólido cristalino unidimensional, por otra parte, las configuraciones de osciladores considerados aquí no tienen porque ser el modelo de un sistema real, al menos no en principio, en este sentido las características termodinámicas que se estudiarán más adelante no corresponderán necesariamente a un sólido cristalino. Cabe mencionar que si bien, estos sistemas son una abstracción de un sistema conocido, también es cierto que se pueden recuperar las propiedades termodinámicas de la cadena lineal para configuraciones muy particulares de algunos tipos de redes.

Supóngase que se tiene un conjunto de osciladores lineales que están acoplados en una configuración arbitraria, puesto que se tratan de interacciones armónicas, dados cualesquiera dos osciladores que estén interactuando, entonces, descrito en sus coordenadas generalizadas, el movimiento armónico ocurre en una sola dimensión desde el punto de equilibrio de cada oscilador, por esta razón y de la *Mecánica Clásica*

la energía potencial de dicho par de osciladores será

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \mathcal{K}_{ij} (x_i - x_j)^2, \quad (4.1)$$

donde  $V_{ij}$  es la energía potencial del par de osciladores con etiquetas  $i$  y  $j$ ,  $x_i - x_j$  es la posición relativas entre los osciladores  $i$  y  $j$ ,  $\mathcal{K}_{ij}$  es la constante que corresponde a la intensidad de una fuerza restitutiva entre los osciladores  $i$  y  $j$ ; el factor de un medio aparece debido a la simetría  $\mathcal{K}_{ij} = \mathcal{K}_{ji}$  ya que la intensidad de la interacción entre los osciladores  $i$  y  $j$  es la misma que hay entre los osciladores  $j$  e  $i$ . De esta manera, la energía potencial total del sistema es

$$V = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\mathcal{K}_{ij}}{2} (x_i - x_j)^2, \quad (4.2)$$

donde los índices consideran las parejas de osciladores acopladas, el otro factor de un medio corrige la duplicidad debido a la suma; si ahora se deriva el potencial respecto al desplazamiento de una partícula arbitraria  $x_l$ , entonces

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial x_l} &= \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\mathcal{K}_{ij}}{2} (x_i - x_j)^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \frac{\mathcal{K}_{ij}}{2} \frac{\partial}{\partial x_l} (x_i - x_j)^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \mathcal{K}_{ij} (x_i - x_j) \frac{\partial}{\partial x_l} (x_i - x_j) \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \mathcal{K}_{ij} (x_i - x_j) (\delta_{li} - \delta_{lj}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_j \mathcal{K}_{lj} (x_l - x_j) - \frac{1}{2} \sum_i \mathcal{K}_{il} (x_i - x_l) \\ &= \frac{1}{2} \sum_j \mathcal{K}_{lj} x_l - \frac{1}{2} \sum_j \mathcal{K}_{lj} x_j - \frac{1}{2} \sum_i \mathcal{K}_{il} x_i + \frac{1}{2} \sum_i \mathcal{K}_{il} x_l \\ &= x_l \sum_j \mathcal{K}_{lj} - \sum_j \mathcal{K}_{lj} x_j, \end{aligned}$$

donde  $\delta_{li}$  y  $\delta_{lj}$  son **deltas de Kronecker** y la última igualdad se ha obtenido por la simetría de  $\mathcal{K}_{ij}$ ; entonces se obtiene que

$$\frac{\partial V}{\partial x_l} = \sum_j \mathcal{K}_{lj} (x_l - x_j). \quad (4.3)$$

En adelante, el número de osciladores acoplados será denotado por  $N_T$  y cada sistema estará conectado de acuerdo a un tipo de red dada. Considerando que los osciladores poseen misma masa  $m$  e intensidad de interacción restitutiva  $\mathcal{K}$ , entonces la ecuación dinámica que rige el comportamiento de los osciladores es

$$\ddot{x}_i = \sum_{j \in \Omega_i} \omega_0^2 (x_j - x_i), \quad i = 1, \dots, N_T, \quad (4.4)$$

donde  $\ddot{x}_i$  es la segunda derivada respecto al tiempo de la posición del  $i$ -ésimo oscilador,  $\omega_0 = \sqrt{\mathcal{K}/m}$  es la **frecuencia fundamental** de oscilación y  $\Omega_i$  es un conjunto que contiene los índices de los osciladores con los cuales interactúa el  $i$ -ésimo oscilador.

Nótese que (4.4) forma un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias para la  $N_T$  osciladores el cual puede escribirse como

$$\ddot{x}_i = \omega_0^2 \left( \sum_{j \in \Omega_i} C_{ij} x_j - I_{ii} x_i \right); \quad I_{ii} = \sum_{j \in \Omega_i} 1,$$

en estas condiciones se puede replicar el mismo método empleado en la sección 2.2 para obtener la representación matricial de dicho sistema

$$\frac{d^2}{dt^2} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N_T-1} \\ x_{N_T} \end{pmatrix} = \omega_0^2 \begin{pmatrix} -I_{11} & C_{12} & C_{13} & \cdots & C_{1N_T} \\ C_{21} & -I_{22} & C_{23} & \cdots & C_{2N_T} \\ C_{31} & C_{32} & -I_{33} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & C_{N_T-1 N_T} \\ C_{N_T 1} & C_{N_T 2} & \cdots & C_{N_T N_T-1} & -I_{N_T N_T} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N_T-1} \\ x_{N_T} \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

es decir,  $I_{ii}$  es el número de veces que aparece  $x_i$  en la suma dada por (4.4), es decir, es el número de interacciones que posee el  $i$ -ésimo oscilador,  $C_{ij}$  es una variable que puede poseer el valor cero si el  $i$ -ésimo oscilador no interactúa con el  $j$ -ésimo oscilador o el valor uno si el  $i$ -ésimo oscilador está interactuando con el  $j$ -ésimo oscilador. Se debe notar que la representación matricial está en función de como se etiqueten los osciladores, sin embargo, reetiquetar los osciladores es equivalente a intercambiar columnas en la matriz (4.5) lo cual deja invariante los eigenvalores.

Si ahora se factoriza el signo negativo a la matriz en (4.5), entonces

$$\mathbb{L} = \begin{pmatrix} I_{11} & -C_{12} & -C_{13} & \cdots & -C_{1N_T} \\ -C_{21} & I_{22} & -C_{23} & \cdots & -C_{2N_T} \\ -C_{31} & -C_{32} & I_{33} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -C_{N_T-1 N_T} \\ -C_{N_T 1} & -C_{N_T 2} & \cdots & -C_{N_T N_T-1} & I_{N_T N_T} \end{pmatrix},$$

coincide con la matriz laplaciana asociada a la red del sistema de osciladores armónicos. Es así que la matriz laplaciana permite una generalización directa y simple para una configuración arbitraria de osciladores, sin la necesidad de obtener las ecuaciones de movimiento, es decir, sin la necesidad de obtener de manera explícita el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas ya que esta información estará contenida en la matriz laplaciana.

## 4.1. Espectros de frecuencias

Para obtener los espectros de frecuencias correspondientes a las diferentes configuraciones de redes, cuyas gráficas se mostrarán en la presente sección, se usó el lenguaje de programación *Python* en conjunto con librerías especializadas *matplotlib*, *numpy*, *statistics* y la de mayor importancia para este trabajo, *networkx* que es una librería específicamente para ciencia de redes [35]. En particular, se emplearon algunos de los generadores de redes de *networkx* ya que estos algoritmos resultaron más eficaces que los códigos creados por mí.

Una observación importante que se debe hacer, previo a mostrar los espectros de frecuencias obtenidos, es que las redes aquí presentadas son sistemas que dependen de probabilidades, ya sea para generar nuevos enlaces, reconectar enlaces ya existentes o bien para conectar nuevos enlaces (como en el caso de redes de *Barabási-Albert*), por esta razón las redes que se generan con los mismos parámetros iniciales no son necesariamente iguales, no obstante, en promedio los sistemas tienden al mismo comportamiento colectivo para condiciones iniciales iguales.

Tal como se vio en la sección 2.4, conocer el espectro de frecuencias de una red permite calcular sus propiedades macroscópicas, así, el comportamiento termodinámico de las redes se podrá modelar con las ecuaciones (2.67), (2.68) y (2.71) correspondientes a las variables macroscópicas de energía interna, entropía y capacidad calorífica, respectivamente.

Para determinar los espectros de frecuencias promedio, se llevaron a cabo un número de realizaciones, en cada tipo de red se indicará cuantas repeticiones se efectuaron para obtener el promedio, luego se reordenaron, de manera creciente, las eigenfrecuencias para cada realización obteniendo distintos conjuntos de eigenfrecuencias<sup>1</sup>, posteriormente y dado que todos los conjuntos tienen el mismo número de eigenfrecuencias, se computaron los promedios sobre la  $n$ -ésima entrada de cada conjunto. En adelante se omitirá el adjetivo promedio para referirse a los espectros de frecuencias.

En la figuras 4.1a y 4.1b se presentan los espectros de frecuencias obtenidos a partir de redes  $G_{WS}(2000, 2, P)$  y  $G_{WS}(2000, 4, P)$ , respectivamente; en éstas, el parámetro que define cada espectro es la probabilidad de reconexión  $P$ . De acuerdo a las gráficas en 4.1, los efectos de la topología de red se hacen más notorios a medida que crece la probabilidad, de hecho, un comportamiento similar se puede apreciar en las figuras 4.2 y 4.3 que corresponden a los espectros de frecuencias de las redes  $G_{NWS}$  y  $S_C$ .

Se debe recordar que las redes complejas de mundo pequeño, es decir, tanto las redes  $G_{WS}$  y  $G_{NWS}$  corresponden al modelo de *Watts-Strogatz*, por lo que, en prin-

---

<sup>1</sup>El número de conjuntos es igual al número de repeticiones.

cipio, cabría esperar un comportamiento similar en los espectros de frecuencias, no obstante, la gráfica de 4.1a, que exhibe los espectros correspondientes a las redes  $G_{WS}(2000, 2, P)$ , difiere notoriamente respecto a los resultados mostrados en 4.1b, 4.2a y 4.2b, ya que se muestra una meseta para los números de modo intermedios cuando la probabilidad aumenta, esto puede atribuirse a que dichas redes son un caso anómalo de redes de mundo pequeño tal como se hizo notar en la sección 3.3.1.

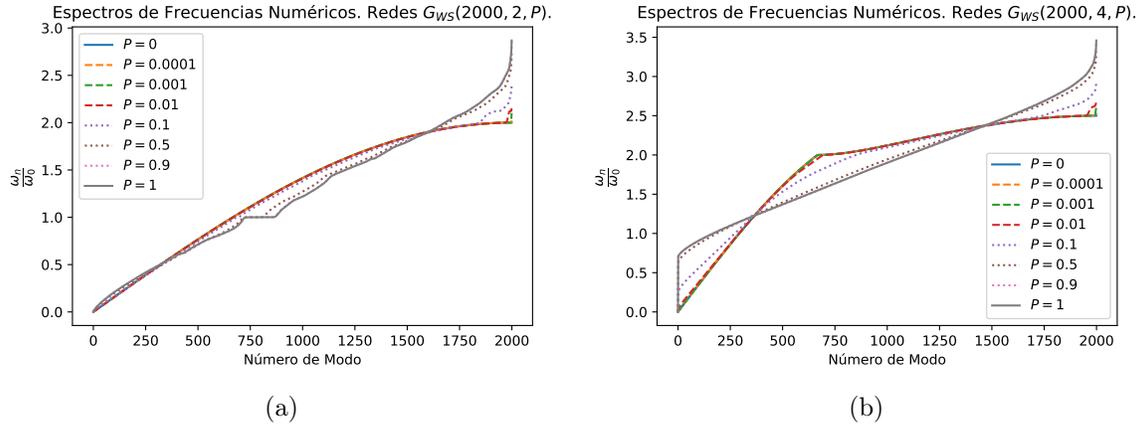


Figura 4.1: Espectros de frecuencias promedio como función del número de modo para mil realizaciones del modelo de Watts-Strogatz para redes  $G_{WS}(2000, k, P)$  con diferentes valores de probabilidad de reconexión. (a)  $k = 2$ , es decir, interacciones iniciales a primeros vecinos. (b)  $k = 4$ , es decir, interacciones iniciales a segundos vecinos.

Aunque ya se especificó en el capítulo tres el tipo de redes utilizadas en el presente trabajo, se hará énfasis en que todas las redes empleadas son redes conexas, es decir, no existen nodos aislados, así, a manera de comentario, dentro de las redes  $G_{WS}$  también se pueden considerar aquellas que no necesariamente son conexas, en este caso también se generan brechas pero de distinta manera, ya que en estos casos también existe una saturación en la frecuencia  $\omega = 0$  que es igual al número de nodos aislados menos uno, esto ya que físicamente, los nodos aislados representarían nodos que no están interactuando y que por lo tanto no están contribuyendo ni a la dinámica del sistema ni a la termodinámica, razón por la cual este modelo no se tomó en cuenta para el análisis.

Los espectros de frecuencias que se presentan en las figuras 4.2a y 4.2b son los correspondientes a las redes  $G_{NWS}$ ; en ambas gráficas se puede observar que cuando  $P \rightarrow 1$  los espectros tienden a comportamientos aparentemente similares, no obstante, por el momento no se abordará más sobre la forma funcional de los espectros en cuanto a similitudes refiere.

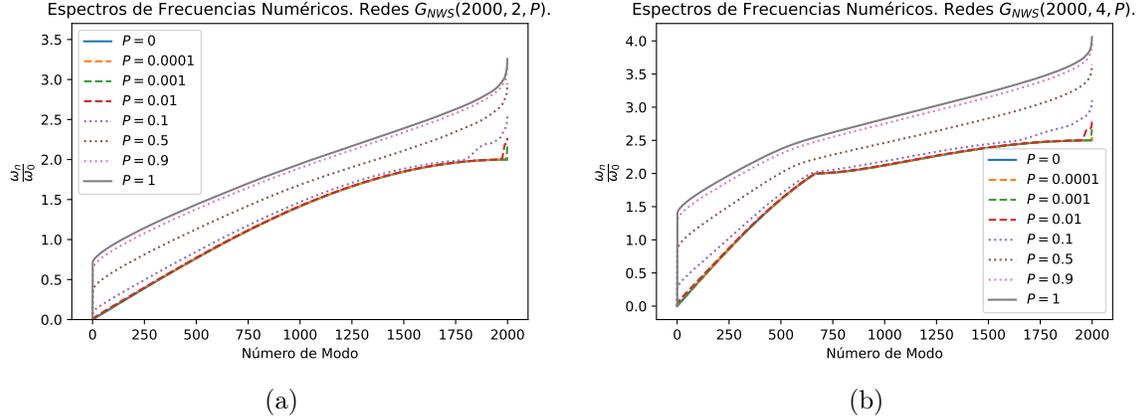


Figura 4.2: Espectros de frecuencias promedio como función del número de modo para mil realizaciones del modelo de Watts-Strogatz para redes  $G_{NWS}(2000, k, P)$  con diferentes valores de probabilidad para generar nuevos enlaces. (a)  $k = 2$ , es decir, interacciones iniciales a primeros vecinos. (b)  $k = 4$ , es decir, interacciones iniciales a segundos vecinos.

En los casos en que  $P = 0$  para redes  $G_{WS}$ ,  $G_{NWS}$  y  $S_C$  serán llamados **casos base**, así, para redes  $G_{WS}(N_T, 2, P)$  como para las redes  $G_{NWS}(N_T, 2, P)$  lo que se recupera es la cadena lineal monoatómica de  $N_T$  átomos, por lo que de manera inmediata la derivada del espectro de frecuencias puede hacerse corresponder a la velocidad de grupo<sup>2</sup>, así, uno de los primeros efectos en los espectros de redes de Watts-Strogatz es que para, números de modo grandes, la velocidad de grupo es distinta de cero, a diferencia del caso de red regular cuya velocidad de grupo tiende a cero en los extremos de  $k$ ; más aún, este comportamiento sugiere que los modos normales más altos aportan en mayor medida al movimiento oscilatorio del sistema.

El hecho de que la velocidad de grupo de redes de *Watts-Strogatz* se vea modificada puede atribuirse a la ruptura de la simetría espacial de todos los nodos presente en la cadena lineal con condiciones de *von Karman*, esto es claro de ver si se consultan las figuras 4.1a y 4.2a. En la representación de la cadena lineal dada por 2.1 se muestra dicha simetría, sin embargo, en las gráficas 4.1a y 4.2a se tiene que a probabilidades pequeñas como lo son  $P = 0.0001$ , y considerando el número de nodos, se hacen presentes diferencias en la velocidad de grupo, esto ya que, en promedio, al menos se ha agregado (o en su caso, reconectado) un enlace, rompiendo así, la simetría antes mencionada. En pocas palabras, al romperse la simetría las ondas dejan de ser estacionarias en  $ka = \pm\pi$  provocando que la la velocidad de grupo no se anule para modos grandes.

<sup>2</sup>No es trivial obtener la velocidad de grupo en estas redes puesto que, como se precisó en el capítulo dos, la variable natural con la cual se describen los espectros es el número de modo  $n$  y no el número de onda  $k$ , aunque en esencia representan lo mismo el número de onda lo hace en el continuo, mientras que el número de modo lo hace de manera discreta. Por tal motivo no se pretende hallar en este trabajo la forma analítica, en caso de que se pudiera, de los espectros ya que sólo basta saber el valor de sus eigenfrecuencias para los propósitos del presente texto.

A manera de anotación, debe aclararse que para probabilidades pequeñas el cambio en la velocidad de grupo se manifiesta de una manera muy abrupta, es decir, el espectro de frecuencias presenta una especie de “**transición de fase**” ya que pareciera que se pierde la diferenciabilidad para valores del número de modo grandes, pero a medida que crece  $P$  el espectro se vuelve más suave.

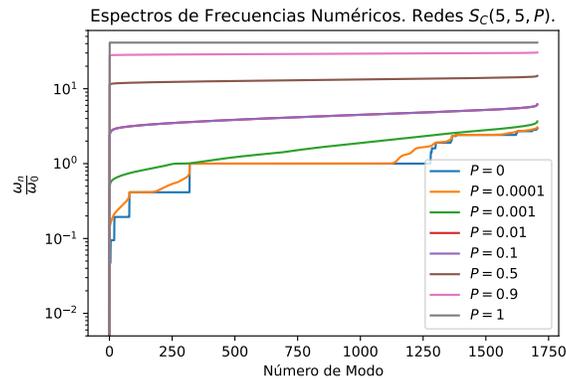


Figura 4.3: Espectros de frecuencias promedio como función del número de modo para quinientas realizaciones de árboles de Cayley complejos  $S_C(5, 5, P)$  con diferentes valores de probabilidad para generar nuevos enlaces.

Continuando con otras estructuras, ahora se presentan los espectros de frecuencias de redes de árboles de Cayley, en la figura 4.3 puede observarse los espectros corresponden a árboles de cinco capas y número de ramificación cuatro. Note que los espectros a probabilidades de enlaces adicionales pequeñas se pueden aproximar por funciones escalón, sin embargo, a medida que crece  $P$ , el caso límite al que tienden estas redes es lo que se conoce como una red completa, es decir, los espectros tienden a una recta horizontal por lo que la frecuencias se han saturado a un solo valor de frecuencia (esto tiene una correspondencia con el modelo de Einstein); esto tiene sentido ya que si se considera que todos los osciladores tienen la misma intensidad de interacción dada por  $\mathcal{K}$  y que a su vez todos los osciladores tiene el mismo número de vecinos entonces se obtiene dicho comportamiento.

Nótese en el caso base de árboles de Cayley, por definición, existe una simetría, pero dicha simetría es únicamente respecto al nodo central por lo que en principio la velocidad de grupo no tendría que ser nula, hecho que se puede comprobar dada la figura 4.3, sin embargo, cuando dichas redes tienden al caso límite  $P \rightarrow 1$  la velocidad de grupo sí tiende a cero para todos los modos, reafirmando que una velocidad de grupo nula corresponde a una simetría espacial, pues en el caso límite se obtiene una red completa, o lo que es lo mismo, todos los nodos oscilan a una misma frecuencia (un único modo normal).

En este punto se puede hacer un comentario, sin profundizar demasiado, sobre como es que convergen los espectros a probabilidades pequeñas en relación a los espectros con probabilidades cercanas al valor uno. Para llevar a cabo esta situación

es necesario mencionar que las redes  $G_{NWS}$ , por su definición, solo llevan a cabo un barrido, es decir, que el proceso de generar enlaces se realiza una vez por cada nodo, sin embargo, si se quita esta restricción y se permite un número arbitrario de barridos, entonces se debe caer en cuenta que existe un número de barridos<sup>3</sup> tal que la red obtenida es una red completa, en este caso, el espectro se satura en una sola frecuencia y entonces se obtiene el mismo comportamiento límite que en un árbol de Cayley, sin embargo, las estructuras topológicas de las redes tipo árbol y de las redes  $G_{NWS}$  son distintas, por lo que sus espectros no convergen de la misma manera al caso límite (red completa), es así como la topología de cada red influye también en el comportamiento límite aunque en ambos casos se generen los mismos tipos de redes cuando  $P \rightarrow 1$ .

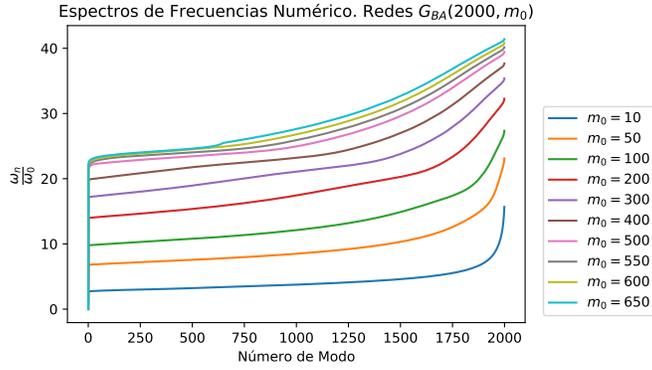
De acuerdo a la definición 3.34 los parámetros iniciales para generar una red de Barabási-Albert son una red inicial  $G_0$ , el número de enlaces  $m$  que genera un nuevo nodo en cada paso y el número de pasos  $t$ , sin embargo, los espectros de frecuencias mostrados en las figuras 4.4 corresponden a diferentes redes de Barabási-Albert donde cada espectro está caracterizado únicamente por número total de nodos  $N_T$  que se desea tener en la red final y el número de enlaces que se desea que tenga cada nuevo nodo  $m = m_0$ , donde  $m_0$  es el número inicial de enlaces, esto es así debido a que se usó el generador de redes `barabasi_albert_graph( $N_T, m_0$ )` de la paquetería `networkx`; este generador, por defecto, crea una red  $G_{BA}$  a partir de una red estrella de  $m_0 + 1$  nodos de la cual se genera un red final de *Barabási-Albert*. Cabe mencionar que este generador permite elegir la red inicial, no obstante, existe una gran variedad de redes de las cuales se puede partir y hacer un análisis para más de un tipo de red inicial haría que este trabajo fuese más extenso, por esta razón se optó por no modificar la red inicial a la que viene por defecto en el generador `barabasi_albert_graph`.

Algo que debe entenderse es que la distribución de grado y los espectros de frecuencias están estrechamente ligados y pueden pensarse, de manera coloquial, como “distintas caras de la misma moneda”, no obstante, hasta este punto no es clara como debe ser esta relación y, a consideración mía, no competen estos temas para la realización de esta tesis, sin embargo, el comentario anterior tenía que hacerse debido a que en el las redes del modelo de *Barabási-Albert* el espectro presenta dos comportamientos muy diferentes por lo que se ha dividido en dos partes.

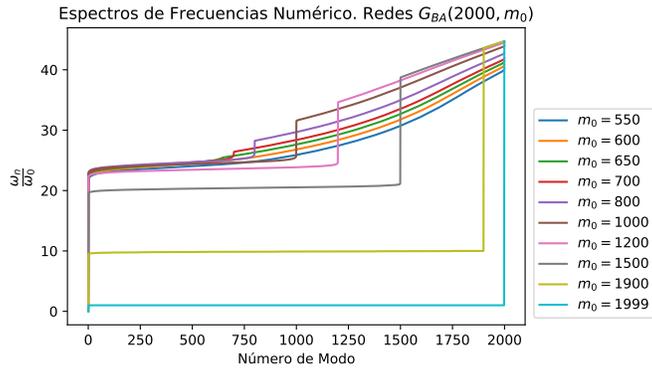
En la gráficas 4.4a y 4.4b se muestran los espectros de frecuencias para redes  $G_{BA}(2000, m_0)$ , como ya se mencionó, estas redes presentan particularidades en sus espectros al igual que su distribución de grado, esta observación ya se había hecho anteriormente en la sección 3.5, ya que a partir de cierta proporción entre  $N_T$  y  $m_0$ , presumiblemente  $0.3N_T \approx m_0$ , los comportamientos se ven modificado drásticamente.

---

<sup>3</sup>Este número de barridos pueden cambiar de acuerdo al número de vecinos iniciales, la probabilidad y el número de nodos.



(a)



(b)

Figura 4.4: Espectros de frecuencias promedio como función del número de modo para quinientas realizaciones del modelo de Barabási-Albert para redes  $G_{BA}(2000, m_0)$  con diferentes valores de  $m_0$ , es decir, número de enlaces nuevos en cada paso.

Es importante mencionar que los espectros, y por ende las propiedades termodinámicas, que se muestran en el presente trabajo se han llevado a cabo para casos muy particulares de redes, en el sentido de que se han elegido un número fijo osciladores, en todos los casos el número de nodos es del orden de  $10^3$ . Para mostrar un panorama un poco más general sobre el comportamiento de los espectros de frecuencias cuando el número de osciladores se modifica, en las gráficas 4.5-4.8 puede observarse que dependiendo del modelo, habrá casos en los que el espectro no cambia sustancialmente y habrá otros en donde el comportamiento cambia notoriamente.

Como se puede ver en las figura 4.5 y 4.6 para el modelo de *Watts-Strogatz* cuando la variable del eje horizontal se normaliza a uno, los espectros mantienen su forma funcional, esto quiere decir que para redes  $G_{WS}$  y  $G_{NWS}$  el número de nodos no afecta en las frecuencias colectivas, por lo que podría esperarse un comportamiento termodinámico similar ya sea para una red de cincuenta nodos y hasta diez mil nodos, pero esto se retomará más adelante. Debe aclararse que en las gráficas antes mencionadas pueden apreciarse fluctuaciones notorias en los espectros promedio, mayormente en las redes con un número pequeño de nodos, sin embargo, también se debe hacer mención que solamente se consideraron quince realizaciones para cada curva ya que para

redes con cinco mil o más nodos el tiempo de cada simulación aumentaba considerablemente y llevar a cabo más realizaciones resultó poco práctico y no contribuían más de lo que lo hacen las gráficas mostradas.

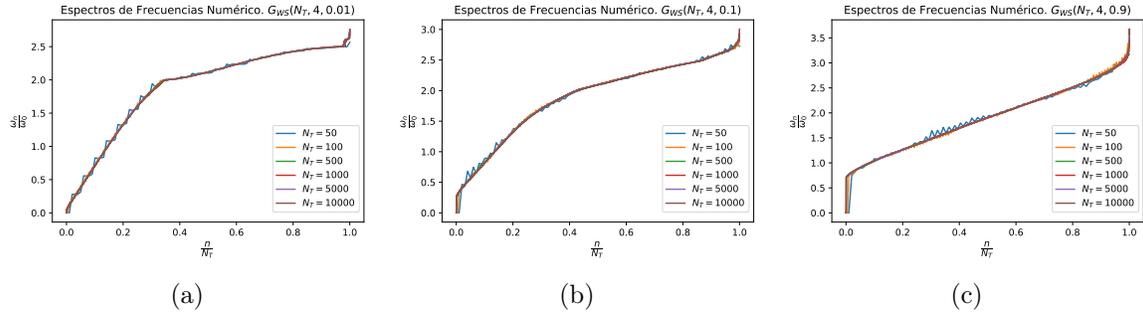


Figura 4.5: Espectros de frecuencias promedio normalizados como función de  $\frac{n}{N_T}$  para quince realizaciones del modelo de *Watts-Strogatz*. Redes  $G_{WS}(N_T, 4, P)$  con diferentes valores de probabilidad de reconexión. (a)  $P = 0.01$ , (b)  $P = 0.1$ , (c)  $P = 0.9$

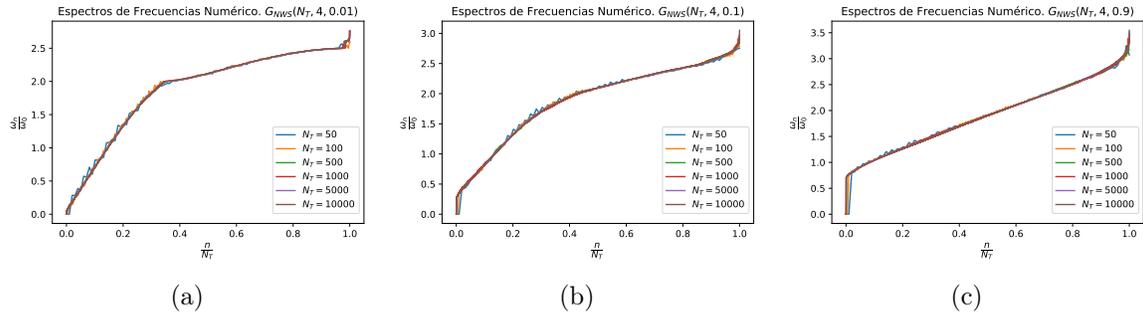


Figura 4.6: Espectros de frecuencias promedio normalizados como función de  $\frac{n}{N_T}$  para quince realizaciones del modelo de *Watts-Strogatz*. Redes  $G_{NWS}(N_T, 4, P)$  con diferentes valores de probabilidad para generar nuevos enlaces. (a)  $P = 0.01$ , (b)  $P = 0.1$ , (c)  $P = 0.9$

En contraste con las redes de mundo pequeño, las redes de árbol de Cayley y las redes con el modelo de *Barabási-Albert* si ven ven afectadas cuando el número de osciladores se modifica. Particularmente en los espectros de los árboles de Cayley son los que en mayor medida difieren cuando se modifica  $N_T$ . Para la redes  $G_{BA}$  el comportamiento colectivo de las eigenfrecuencias difiere o se modifica en mayor medida para los modos normales grandes. Por el momento no se puede decir *a priori* cómo afectarán estas diferencias en los parámetros macroscópicos, por lo que más adelante se realizarán puntualmente estas diferencias reflejadas en la termodinámica del sistema.

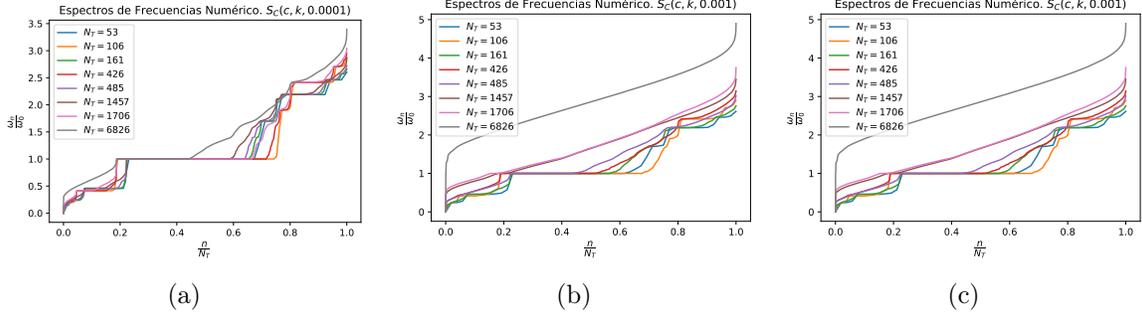


Figura 4.7: Espectros de frecuencias promedio normalizados como función  $\frac{n}{N_T}$  para quince realizaciones del modelo de *Barabási-Albert*. Redes  $G_{BA}(N_T, m_0)$  con diferente cantidad de nodos iniciales. (a)  $m_0 = 50$ , (a)  $m_0 = 100$ , (a)  $m_0 = 1000$

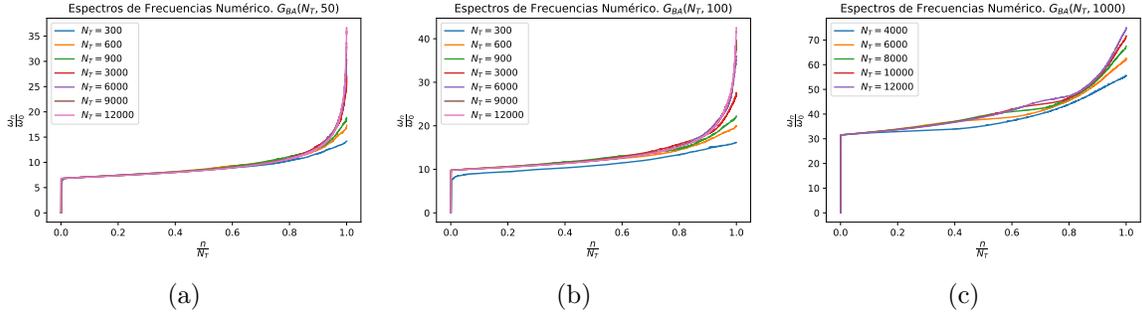


Figura 4.8: Espectros de frecuencias promedio normalizados como función  $\frac{n}{N_T}$  para quince realizaciones del modelo de *Barabási-Albert*. Redes  $G_{BA}(N_T, m_0)$  con diferente cantidad de nodos iniciales. (a)  $m_0 = 50$ , (a)  $m_0 = 100$ , (a)  $m_0 = 1000$

Para concluir esta sección, hay que mencionar un hecho que no se puede soslayar y que tomará relevancia para realizar los cálculos que se expondrán adelante. Sin importar el tipo de red compleja que sea utilizada siempre existe al menos un eigenvalor, de la matriz laplaciana asociada, igual a cero. En el caso de una red conexa, entonces solo hay un único eigenvalor nulo<sup>4</sup>. Físicamente que existan estas eigenfrecuencias  $\omega_1 = 0$ , como se pueden ver en todos los espectros presentados, lo que generan son brechas (*gaps*) que son interpretadas como la energía mínima requerida para poder ser excitados [24] los modos normales, en la sección siguiente se abordará esta cuestión.

## 4.2. Energía interna de osciladores dispuestos en redes

Debe aclararse que para encontrar los modos normales de un sistema de osciladores acoplados basta con la *Mecánica Clásica* y haciendo uso de la *Termodinámica*

<sup>4</sup>El modo en el cual  $\omega_1 = 0$  puede hacerse corresponder a un oscilador que representa el centro de masa del sistema

*Estadística* se puede conocer el comportamiento termodinámico sin emplear herramientas propias de la *Teoría de redes*, sin embargo, lo que se pretende hacer en este trabajo es encontrar una relación de las propiedades topológicas de una red reflejadas en la colectividad (eigenfrecuencias) del sistema así como en su comportamiento termodinámico, relaciones que no se pueden obtener de manera trivial a partir de la *Física Estadística* ni de la *Mecánica Clásica* ya que estas propiedades surgen de manera natural empleando la *Teoría de Redes*.

Como ya se mencionó, en las redes antes presentadas existe un único eigenvalor igual a cero, el cuál desde el punto de vista de la termodinámica no está contribuyendo en las cantidades macroscópicas, por está razón el número de cuasipartículas que sí están contribuyendo a los parámetros termodinámicos es

$$N \equiv N_T - 1, \quad (4.6)$$

esto no quiere decir que dicha eigenfrecuencia no sea parte de la colectividad, sino que simplemente ésta no contribuye a la termodinámica del sistema.

A manera de preámbulo, previo a mostrar los resultados obtenidos, se debe resaltar que la energía interna, en todos los casos presentados, se ve modificada cuando se introducen las estructuras de red compleja por lo que para tener una mejor noción del comportamiento que se esperaría para los regímenes de bajas y altas temperaturas, se realizará un breve análisis, con el fin de dejar lo más claro posible, la forma en que se ve afectado este parámetro termodinámico cuando se introducen los efectos de red compleja.

Primeramente, se partirá de la ecuación (2.67), para la energía interna,

$$U = \sum_{n=1}^N \frac{\hbar\omega_n}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1}; \quad \beta = \frac{1}{K_B T},$$

$$U = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \frac{x_n}{e^{x_n} - 1}; \quad x_n = \hbar\omega_n\beta, \quad (4.7)$$

note que si  $T \ll T_0$  entonces cada  $x_n \rightarrow \infty$ , en este caso se tiene que  $e^{x_n} - 1 \approx e^{x_n}$  por lo que la energía resulta en

$$U = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N x_n e^{-x_n}$$

$$= K_B T \sum_{n=1}^N x_n e^{-x_n},$$

donde  $e^{-x_n}$  converge mucho más rápido a cero de lo que lo hace  $x_n$  por lo que la suma converge a cero, es decir, domina el comportamiento exponencial. Este comportamiento difiere fuertemente respecto a la teoría de Debye ya que en ésta el comportamiento

a bajas temperaturas es lineal, podría pensarse que esta discrepancia es debida a la relación de dispersión  $\omega(k)$ , sin embargo, no se mencionó nada acerca de la forma que debían tener las  $\omega_n$  por lo que la razón de esta discrepancia es debido al elemento finito, pues en el modelo de Debye lo que se supone es un continuo a diferencia de las redes aquí planteadas.

Partiendo nuevamente de la ecuación (4.7),

$$U = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \frac{x_n}{e^{x_n} - 1}, \quad x_n = \hbar\omega_n\beta,$$

pero ahora considerando el régimen de altas temperaturas, es decir,  $T \gg T_0$ , entonces cada  $x_n \rightarrow 0$ , en este caso se tiene que  $e^{x_n} - 1 \approx x_n$  por lo que la energía resulta en

$$U = \frac{1}{\beta} \sum_{n=1}^N \frac{x_n}{x_n},$$

es decir, se recupera el comportamiento clásico dictado por la **ley de Dulong-Petit**

$$U = NK_B T. \tag{4.8}$$

Debe indicarse que los casos en los cuales la probabilidad de reconexión o de agregar un enlace es  $P = 1$ , únicamente son contemplados como referencia pues estas redes ya son completamente aleatorias para redes de Watts-Strogatz y regulares para redes de árbol de Cayley, y como tal no tienen cabida en este estudio, pero como ya se dijo es solo una referencia y no son contempladas en el análisis para probabilidades intermedias, es decir,  $0 < P < 1$ .

En las gráficas 4.9a y 4.9b se presenta la energía interna para distintas redes  $G_{WS}$ , debe notarse que dicha energía, dada por (2.67), está calculada usando únicamente las frecuencias de los espectros promedios. Como puede verse para los casos  $G_{WS}(2000, 2, P)$  esta cantidad macroscópica exhibe un comportamiento muy similar al caso base, es decir, muy similar a la cadena lineal de  $N_T$  átomos. Por otra parte, para las redes  $G_{WS}(2000, 4, P)$  se tiene que a medida que crece  $P$  la energía interna se separa del caso base para bajas temperaturas, aunque en ambos casos predomina el comportamiento exponencial también es claro de dichas gráficas, que a medida que crece  $P$ , se requiere una temperatura mayor para alcanzar un mismo valor de la energía.

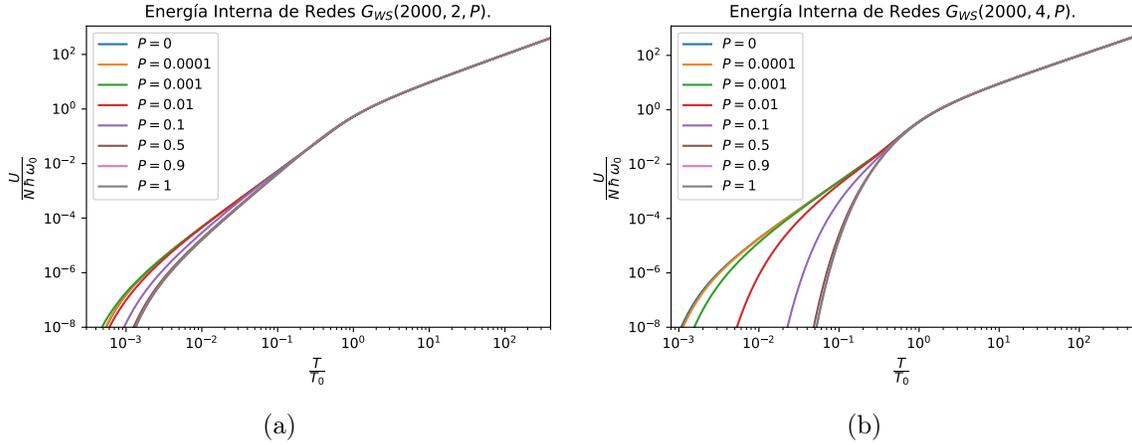


Figura 4.9: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura para redes  $G_{WS}$  para diferentes valores de probabilidad de reconexión  $P$ . (a)  $k = 2$ . (b)  $k = 4$ .

La energía interna para redes  $G_{NWS}$  se presentan en las gráficas 4.10a y 4.10b en ambos casos la curva asociada a la energía interna se separa más del caso base en el régimen de bajas temperaturas a medida que  $P$  tiende a uno.

Como se puede notar, en estas redes  $G_{NWS}$  el comportamiento en la energía interna es bastante más similar, pese a que son redes con parámetros distintos en 4.10a es una red inicial a primeros vecinos ( $k = 2$ ), mientras que 4.10b es una red inicial a segundos vecinos ( $k = 4$ ).

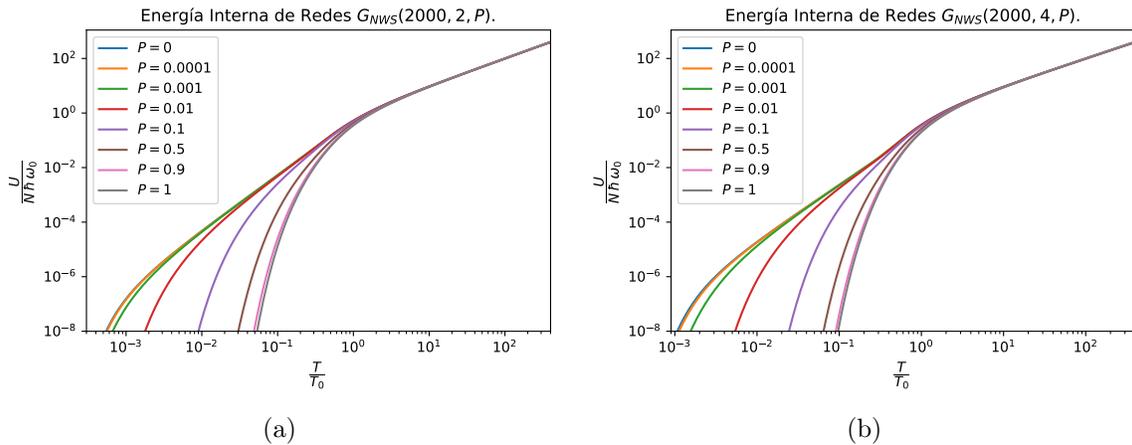


Figura 4.10: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura para redes  $G_{NWS}$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. (a)  $k = 2$ . (b)  $k = 4$ .

En la gráfica 4.11 se puede observar la dependencia con la temperatura de la energía interna para redes de árboles de Cayley, donde cada curva está caracterizada por la probabilidad  $P$  de generar nuevos enlaces, en contraste con las redes de mundo pequeño, la energía interna tiende a un comportamiento exponencial mucho más prominente desde probabilidades pequeñas.

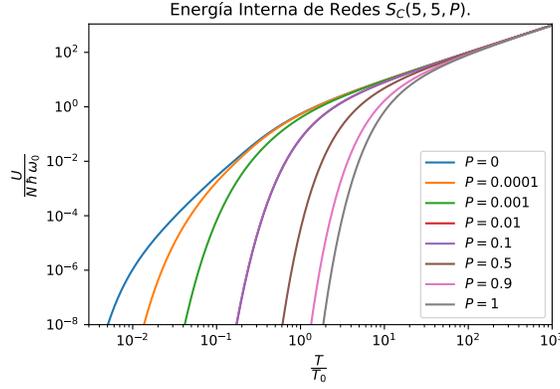


Figura 4.11: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura para redes  $S_C(5, 5, P)$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. (a)  $k = 2$ . (b)  $k = 4$ .

Para el caso de las redes  $G_{BA}$  se harán las mismas consideraciones que en los casos anteriores a pesar de que en estas redes “crecen” ya que este proceso sirve únicamente para construir la red pero no es importante en las propiedades termodinámicas, es decir, se estudia la red “final”, quizás esta evolución de la red sea una característica útil en otras circunstancias, pero por el momento basta únicamente conocer el espectro de la red generada.

Las redes de *Barabási-Albert* muestran, nuevamente, particularidades que no se presentaban en los resultados de las redes de Watts-Strogatz y en árboles de Cayley en relación a la energía interna. Si bien se esperaba que aparecieran peculiaridades en la energía interna, puesto que ya habían emergido en la distribución de grado y de los espectros de frecuencias, no es trivial saber cómo es que se presentarían en la energía interna.

Como se puede ver en las gráfica 4.12a la energía interna decrece, a temperatura fija, a medida que  $m_0$  se acerca al valor 700 y mientras que la energía interna mostrada en 4.12b crece, a temperatura fija, a medida que  $700 < m_0$  se acerca al valor 2000.

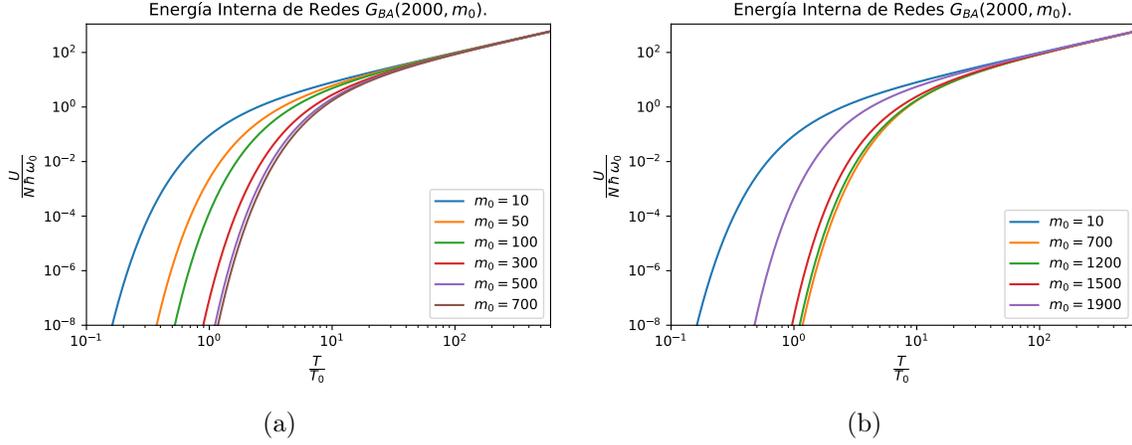


Figura 4.12: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de BA.

Para concluir esta sección, se puede ver que en todos los casos los comportamientos tanto para bajas como para altas temperaturas fue el esperado de acuerdo al breve análisis que se realizó previo a mostrar las gráficas de energía interna de cada red, sin embargo para temperaturas intermedias las redes de Watts-Strogatz presentan reminiscencias del modelo de Debye para probabilidades pequeñas y del modelo de Einstein para probabilidades cercanas a uno<sup>5</sup>, véase apéndice A. Por otro la energía interna de redes de árbol de Cayley y de redes de Barabási-Albert tienen un comportamiento similar al modelo de Einstein para bajas, medias y altas temperaturas.

### 4.3. Entropía de osciladores dispuestos en redes.

Tal como se realizó en la sección anterior, antes de presentar los resultados para la entropía se llevará a cabo un corto análisis del comportamiento de esta para bajas y altas temperaturas. Partiendo de la ecuación (2.68) para la entropía,

$$S = K_B \sum_{n=1}^N \left[ \frac{\hbar\omega_n\beta}{e^{\hbar\omega_n\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega_n\beta}) \right]; \quad \beta = \frac{1}{K_B T}$$

entonces se puede proceder de manera análoga a como se hizo con la energía interna,

$$S = K_B \sum_{n=1}^N \left[ \frac{x_n}{e^{x_n} - 1} - \ln(1 - e^{-x_n}) \right]; \quad x_n = \hbar\omega_n\beta, \quad (4.9)$$

<sup>5</sup>Salvo en el caso de redes  $G_{WS}(2000, 2, P)$  donde las curvas que describían la energía interna estaban muy cercanas al caso base y en consecuencia las reminiscencias del modelo de Debye resultó para todas las probabilidades consideradas.

si  $T \ll T_0$  entonces  $x \rightarrow \infty$ , en este supuesto se puede aproximar  $e^x - 1 \approx e^x$  y  $1 - e^{-x} \approx 1$  por lo que

$$S = K_B \sum_{n=1}^N \left[ \frac{x_n}{e^{x_n}} - \ln(1) \right],$$

dado que  $\ln(1) = 0$ , entonces para bajas temperaturas la entropía se puede aproximar por

$$S = K_B \sum_{n=1}^N x_n e^{-x_n}, \quad (4.10)$$

por lo que el comportamiento exponencial domina a bajas temperaturas, es decir, la entropía tiende a cero conforme la temperatura va a cero, en concordancia con la tercera ley de la termodinámica.

Partiendo de la ecuación (4.9) con variable adimensional,

$$S = K_B \sum_{n=1}^N \left[ \frac{x_n}{e^{x_n} - 1} - \ln(1 - e^{-x_n}) \right],$$

si  $T \gg T_0$  entonces  $x_n \rightarrow 0$ , en este supuesto se puede aproximar  $e^{x_n} - 1 \approx x_n$  y  $1 - e^{-x_n} \approx x_n$  por lo que

$$\begin{aligned} S &= K_B \sum_{n=1}^N \left[ \frac{x_n}{x_n} - \ln(x_n) \right] \\ &= K_B \sum_{n=1}^N [1 - \ln(x_n)] \\ &= K_B \left[ N - \sum_{n=1}^N \ln(x_n) \right], \end{aligned}$$

si ahora se definen

$$x_{\text{máx}} = \hbar\omega_{\text{máx}}/\beta, \quad (4.11a)$$

$$x_{\text{mín}} = \hbar\omega_{\text{mín}}/\beta, \quad (4.11b)$$

y considerando que las eigenfrecuencias están ordenadas ascendentemente, entonces, para  $T$  fija, se tiene que

$$x_{\text{mín}} \leq x_n \leq x_{\text{máx}}.$$

Puesto que el logaritmo es una función monótonamente creciente, se tiene que

$$\ln(x_{\text{mín}}) \leq \ln(x_n) \leq \ln(x_{\text{máx}}),$$

dado que las desigualdades anteriores se cumplen para cualquier  $n$ , entonces

$$-\sum_{n=1}^N \ln(x_{\text{mín}}) \geq -\sum_{n=1}^N \ln(x_n) \geq -\sum_{n=1}^N \ln(x_{\text{máx}}),$$

sumando  $N$  a todas las desigualdades

$$N - N \ln(x_{\min}) \geq N - \sum_{n=1}^N \ln(x_n) \geq N - N \ln(x_{\max}),$$

puesto que  $K_B$  es una constante positiva, entonces

$$NK_B [1 - \ln(x_{\min})] \geq K_B \left[ N - \sum_{n=1}^N \ln(x_n) \right] \geq NK_B [1 - \ln(x_{\max})],$$

utilizando que  $x_n = \frac{\hbar\omega_n}{K_B T}$  para reescribir en términos de la temperatura

$$NK_B \left[ 1 - \ln \left( \sqrt{\Lambda_{\min}} \frac{T_0}{T} \right) \right] \geq S \geq NK_B \left[ 1 - \ln \left( \sqrt{\Lambda_{\max}} \frac{T_0}{T} \right) \right],$$

usando las propiedades de los logaritmos

$$NK_B \left[ 1 - \ln \left( \sqrt{\Lambda_{\min}} \right) - \ln \left( \frac{T_0}{T} \right) \right] \geq S \geq NK_B \left[ 1 - \ln \left( \sqrt{\Lambda_{\max}} \right) - \ln \left( \frac{T_0}{T} \right) \right],$$

Si ahora se definen las constantes

$$\begin{aligned} S_{0,\min} &= NK_B \left[ 1 - \ln \left( \sqrt{\Lambda_{\min}} \right) \right] \\ S_{0,\max} &= NK_B \left[ 1 - \ln \left( \sqrt{\Lambda_{\max}} \right) \right] \end{aligned}$$

se obtiene la desigualdad

$$NK_B \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) + S_{0,\max} \leq S \leq NK_B \ln \left( \frac{T}{T_0} \right) + S_{0,\min} \quad (4.12)$$

puesto que  $T \gg T_0$ , entonces el logaritmo está bien definido y es siempre mayor a cero, más aún, la entropía siempre aumenta. Con esta última expresión se ha mostrado que no importa como sean las frecuencias de una red, la entropía siempre está acotada, superior e inferiormente, por la desigualdad (4.12).

Las gráficas correspondientes a la entropía de redes  $G_{WS}$  se muestran en las gráficas 4.13a y 4.13b para primeros vecinos y segundos vecinos, respectivamente.

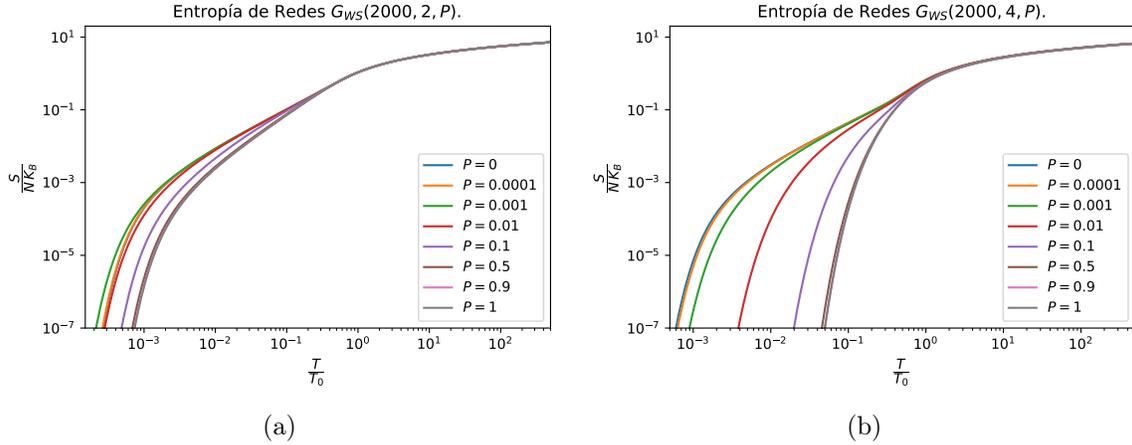


Figura 4.13: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de  $G_{WS}$ .

Al igual que con la energía interna, comparativamente la entropía para cada caso difieren en su comportamiento para probabilidades iguales, pero nuevamente esto es debido a que  $G_{WS}(2000, 2, P)$  no es propiamente una red de mundo pequeño, *cf.* sección 3.3.

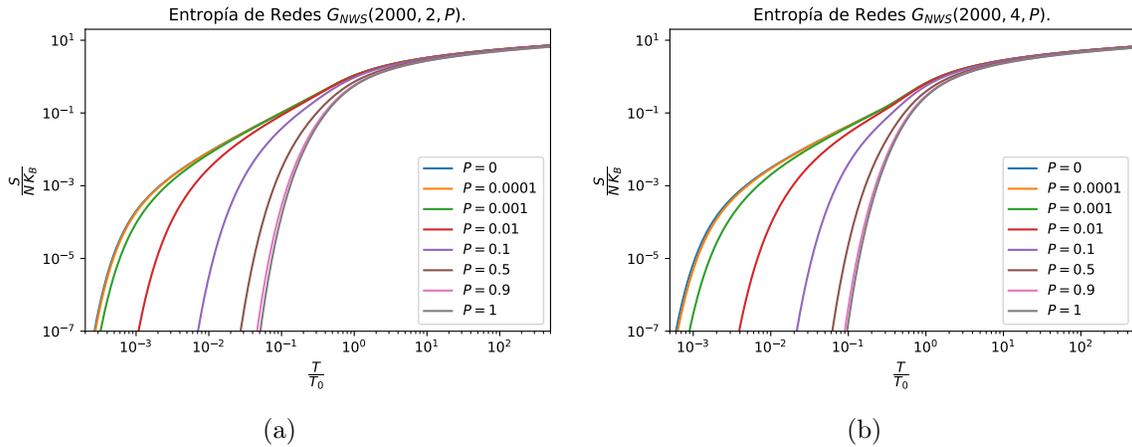


Figura 4.14: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de  $G_{NWS}$ .

La entropía de redes  $G_{NWS}$  se presentan en las gráficas 4.14a y 4.14b, como se puede apreciar estas redes presentan similitudes en la forma funcional de su comportamiento termodinámico, por lo que se puede plantear que, en efecto, lo que define mayormente el comportamiento de los parámetros termodinámicos es la topología de red. Consultando el apéndice A, se pueden observar reminiscencias del modelo de Debye en temperaturas intermedias y a probabilidades pequeñas.

En la gráfica 4.15 se puede observar el comportamiento de la entropía para redes de árboles de Cayley donde  $P$  es la probabilidad de generar nuevos enlaces, en contraste

con las redes de mundo pequeño, la energía interna tiende a un comportamiento exponencial mucho más prominente desde probabilidades pequeñas.

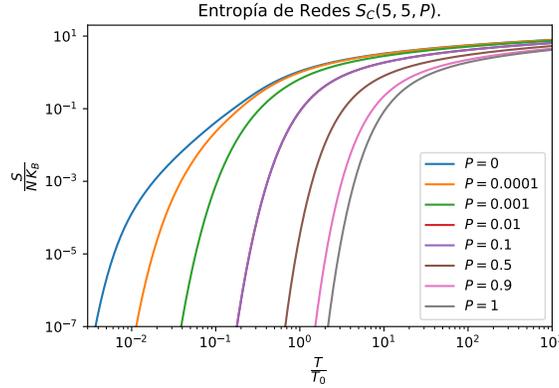


Figura 4.15: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de un red de  $N = 1706$  nodos con el modelo de árbol de Cayley complejo.

En relación a la entropía las redes de *Barabási-Albert* muestran, nuevamente, particularidades que no se presentaban en los resultados de las redes de Watts-Strogatz y en árboles de Cayley. Como se puede observar en las gráfica 4.16a la entropía decrece, a temperatura fija, a medida que  $m_0$  se acerca al valor 700 y mientras que la entropía mostrada en 4.16b crece, a temperatura fija, a medida que  $700 < m_0$  se acerca al valor 2000.

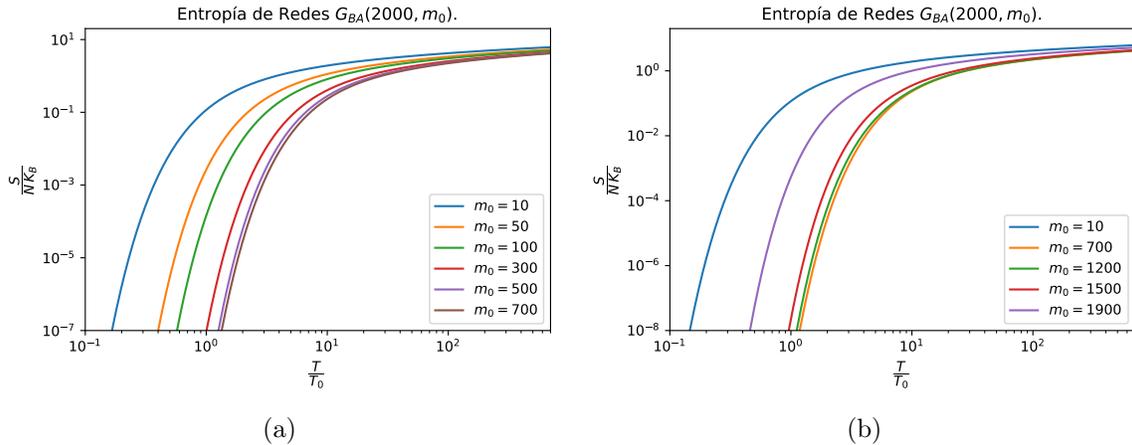


Figura 4.16: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de  $G_{BA}$ .

Como puede verse en las gráficas 4.13-4.15, la entropía disminuye, a temperatura fija, a medida que la probabilidad  $P$  de reconexión o de generar enlaces aumenta, esto puede asociarse a la existe de una “entropía” asociada a la estructura de cada red<sup>6</sup>,

<sup>6</sup>y no directamente al crecimiento en el número de enlaces, de ser así las redes  $G_{WS}(2000, 4, P)$  no presentarían un comportamiento similar al de las redes  $G_{NWS}$

que disminuye a la entropía termodinámica

$$S_{TOT} = S_O - S_N \quad (4.13)$$

donde  $S_{TOT}$  es la entropía termodinámica total,  $S_O$  es la entropía asociada al sistema mecánico de osciladores armónicos del caso base y  $S_N$  es la entropía asociada a la estructura de red.

Otra posible interpretación al hecho de que la entropía decrezca, para una temperatura fija, a medida que  $P$  aumenta es que la cantidad de configuraciones de redes diferentes aumenta, por ejemplo, en redes  $G_{NWS}(8, 2, P)$ , como las de las figuras 4.26, entonces para un enlaces solo hay cinco configuraciones que brindan la misma red, salvo por el reetiquetado de los nodos, sin embargo cuando hay dos enlaces entonces hay 25 configuraciones que arrojan la misma red por lo que ha aumentado considerablemente en número de configuraciones “compatibles”.

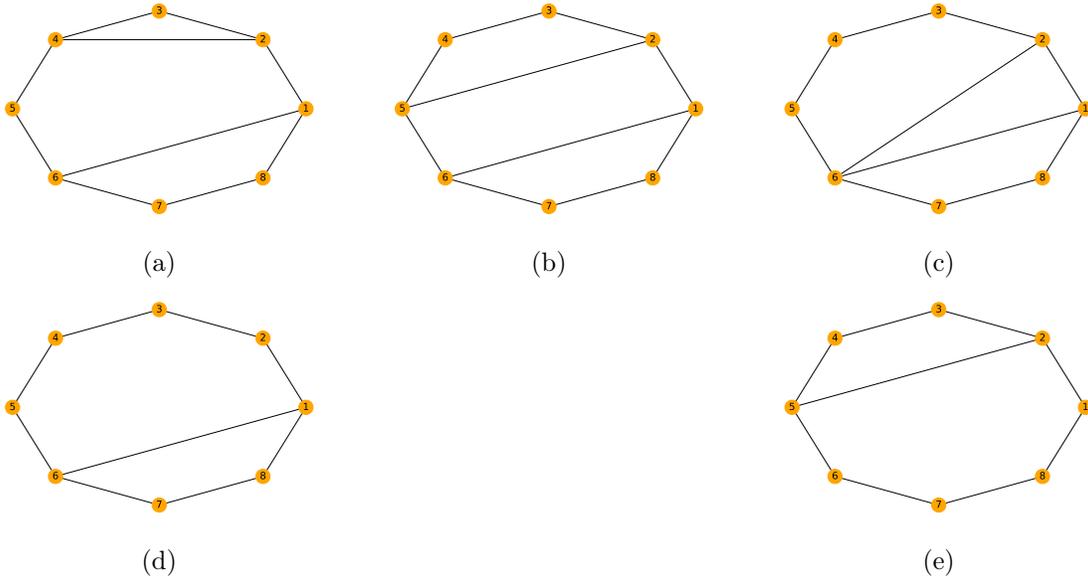


Figura 4.17: Distintas configuraciones de una red  $G_{NWS}$  pequeña.

Finalizando este apartado, se puede decir que en todos los casos se cumple la tercera ley de la termodinámica, por lo que estos sistemas son compatibles con las leyes de la *Termodinámica*.

## 4.4. Capacidad calorífica de osciladores dispuestos en redes

La capacidad calorífica es uno de los parámetros más relevantes en termodinámica pues permite conocer que tan susceptible es un sistema para cambiar su temperatura al suministrar energía en forma de calor; tal como se explicó en el capítulo tres,

existen distintas capacidades caloríficas dependiendo de las condiciones particulares en las que se suministre calor al sistema. Por otro lado, las variables que describen a un conjunto de osciladores acoplados como parámetros termodinámicos naturales son la temperatura, el número de osciladores y, en la cadena lineal, la longitud  $L$ , no obstante, este parámetro no es relevante para configuraciones arbitrarias de osciladores ya que si bien, matemáticamente se puede definir la distancia en redes, no tiene sentido preguntarse por la distancia “material” del sistema, por está razón se puede suponer que la **distancia media** de una red, dada una probabilidad, es constante, es así que tiene sentido definir el calor específico a longitud constante  $C_L$ .

De manera análoga a las dos secciones anteriores, primeramente se comenzará por analizar el comportamiento de este parámetro termodinámico para bajas y altas temperaturas. Para calcular la capacidad calorífica (2.71) se obtuvieron unas expresiones previas, cf. 2.4.3, así, la expresión de la cual se partirá es

$$C_L = K_B \sum_{n=1}^N \frac{(\hbar\omega_n\beta)^2}{(e^{\hbar\omega_n\beta} - 1)^2} e^{\hbar\omega_n\beta}; \quad \beta = \frac{1}{K_B T}, \quad (4.14)$$

o bien,

$$C_L = K_B \sum_{n=1}^N \frac{x_n^2}{(e^{x_n} - 1)^2} e^{x_n}; \quad x = \hbar\omega_n\beta, \quad (4.15)$$

a bajas temperaturas se tiene que  $T \ll T_0$  entonces,  $x_n \rightarrow \infty$ , en este caso se tiene que  $e^{x_n} - 1 \approx e^{x_n}$  por lo tanto

$$\begin{aligned} C_L &= K_B \sum_{n=1}^N \frac{x_n^2}{e^{2x_n}} e^{x_n}, \\ C_L &= K_B \sum_{n=1}^N x_n^2 e^{-x_n}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

así,  $e^{-x_n}$  converge mucho más rápido a cero de lo que lo hace que  $x_n^2$ , por lo que no se replica el comportamiento lineal visto en la aproximación de Debye para bajas temperaturas, véase A; el hecho de que a bajas temperaturas la capacidad calorífica no sea lineal es debido a que los espectros con los cuales se calculan los parámetros termodinámicos son de elemento finito a diferencia del modelo de Debye que hace la aproximación en el continuo.

Partiendo de (4.15),

$$C_L = K_B \sum_{n=1}^N \frac{x_n^2}{(e^{x_n} - 1)^2} e^{x_n},$$

pero ahora considerando altas temperaturas, es decir,  $T \gg T_0$  entonces  $x_n \rightarrow 0$ , en

este caso se tiene que  $e^{x_n} - 1 \approx x_n$  por lo tanto

$$\begin{aligned} C_L &= K_B \sum_{n=1}^N \frac{x_n^2}{x_n} \\ &= K_B \sum_{n=1}^N 1, \end{aligned}$$

sin embargo ya se ha dicho que en esta situación  $x_n \rightarrow 0$  por lo que la suma se puede aproximar por  $N$  obteniendo así que

$$C_L = NK_B, \quad (4.17)$$

es decir, se recupera el comportamiento clásico de *Dulong-Petite*.

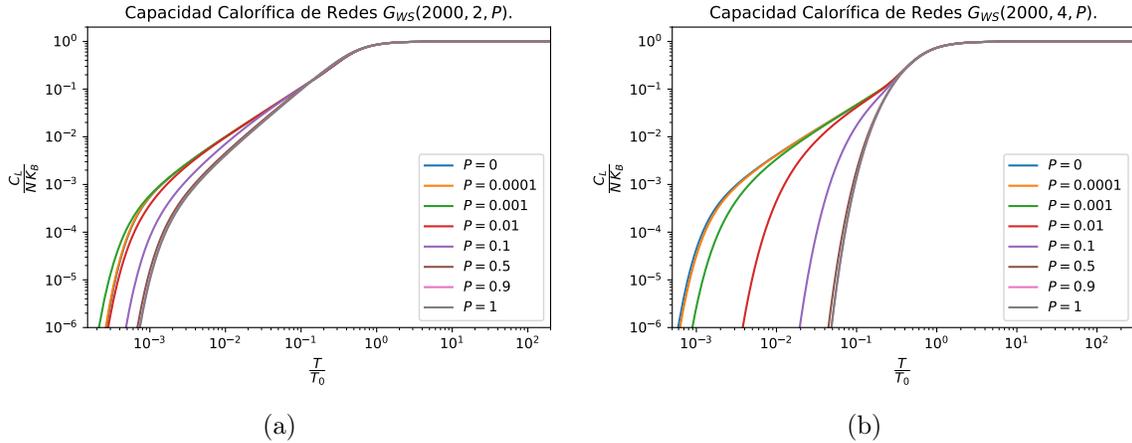


Figura 4.18: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de  $G_{WS}$ .

Las capacidades caloríficas calculadas para redes  $G_{WS}$  se muestran en las figuras 4.18 las cuales muestran que a temperatura fija la capacidad calorífica  $C_L$  disminuye a medida que la probabilidad  $P$  de reconexión aumenta; en particular la gráfica 4.1a muestra que las curvas no se alejan significativamente, en comparación a la gráfica 4.1b, del caso base al igual que sucedió en la energía interna y la entropía de redes  $G_{WS}(2000, 2, P)$ .

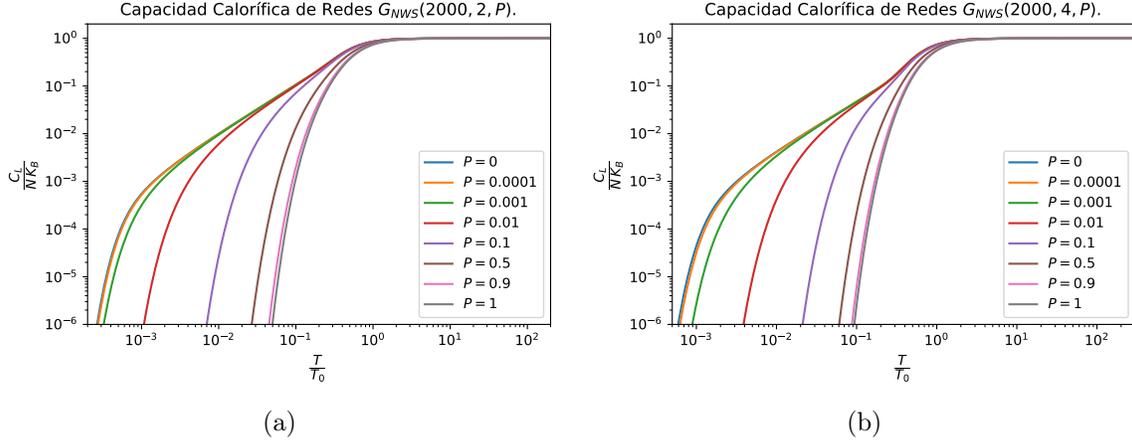


Figura 4.19: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de  $G_{NWS}$ .

Por otro lado, los resultados de la capacidad calorífica  $C_L$  de redes  $G_{NWS}$  se muestran en las gráficas 4.19a y 4.19b, donde las similitudes entre ambas gráficas es notoriamente mayor que en el caso de las redes  $G_{WS}$ . No obstante, debe mencionarse que 4.18b, 4.19a, y 4.19b en conjunto sí presentan comportamientos semejantes, debido a que se tratan de redes con el mismo tipo de distribución de grado.

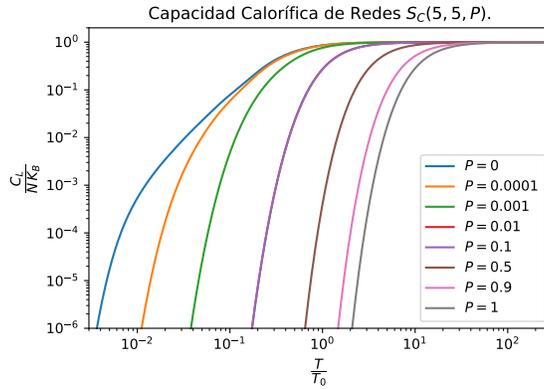


Figura 4.20: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de un red de  $N = 1706$  nodos con el modelo de  $S_C$ .

En la gráficas 4.20 se muestra el comportamiento de la capacidad calorífica de redes de tipo árbol de Cayley, donde cada curva está caracterizada por una probabilidad  $P$  de generar enlaces, como era de esperarse, en concordancia con las gráficas de energía interna y de entropía de estas mismas redes, a medida que  $P$  tiende a uno este parámetro termodinámico tiende a un comportamiento exponencial no solo para bajas temperaturas sino que también a temperaturas intermedias.

La última estructura, cuyos resultados de su capacidad calorífica se muestran en las gráficas 4.21, es la de redes de *Barabási-Albert*, donde, una vez más, se han

separado en dos graficas ya que el comportamiento en 4.21a la capacidad calorífica aumenta a medida que  $m_0 \rightarrow 700$

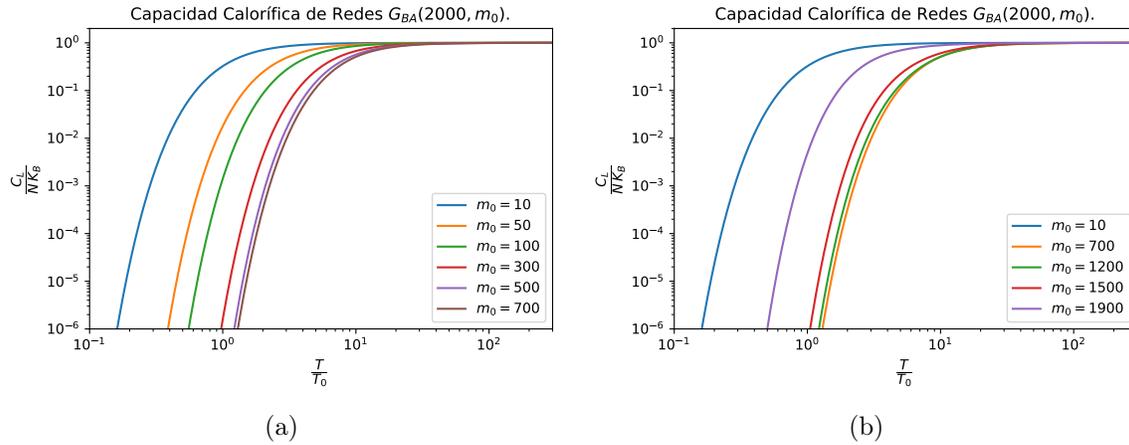


Figura 4.21: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de un red de  $N = 2000$  nodos con el modelo de  $G_{BA}$ .

En el caso del ensamble gran canónico, se tiene que la energía interna es el promedio de las energías del ensamble, entonces existen **fluctuaciones** asociadas a dicho promedio que no es otra cosa que la varianza de esta medida. Un resultado conocido, consúltese [20, 3], referente a lo antes mencionado es

$$\overline{E^2} - \bar{E}^2 = K_B T^2 C_V, \quad (4.18)$$

es decir, las fluctuaciones de la energía interna son proporcionales a la capacidad calorífica por lo que nuevamente se puede la estrecha relación entre los constituyentes con su comportamiento macroscópico.

Recordando que en estos sistemas  $C_V \rightarrow C_L$ , entonces se tiene que medida que crece la probabilidad de reconexión en redes  $G_{WS}$  y de generar enlaces en redes  $G_{NWS}$  y  $S_C$ , entonces las fluctuaciones en la energía disminuyen, a temperatura fija, a medida que la probabilidad tiende a uno por lo que las energías de los constituyentes están mejor distribuidas en torno al valor promedio  $U$  de lo que lo están a probabilidades inferiores.

De manera similar sucede en redes de *Barabási-Albert* siempre que  $m_0 < 700$ , sin embargo si  $m_0 > 700$  entonces las fluctuaciones aumentan.

## 4.5. Parámetros termodinámicos en redes con distinto número de nodos

Para concluir con este capítulo cuatro se presentarán los comportamientos de los parámetros termodinámicos cuando son caracterizados por el número de nodos que

constituyen la red, a probabilidad fija.

Siguiendo el mismo orden de las secciones 4.2- 4.4, primero se mostrarán los parámetros termodinámicos relacionados a las redes de *Watts-Strogatz* tipo  $G_{WS}$ .

En el caso de la energía interna cuando la probabilidad de reconexión es  $P = 0.01$ , en el régimen de bajas temperaturas y a medida que en número de nodos crece se tiene que la energía interna aumenta, a temperatura fija, más aún las curvas se superponen de tal manera que los cambios en la energía interna entre cada curva cuando el número de nodos quinientos o más, es despreciable. Por otro lado a temperaturas intermedias y altas la energía interna es la misma sin importar el número de nodos, ver figura 4.22a; cuando la probabilidad de reconexión es  $P = 0.1$  entonces se puede ver en 4.22b que sucede un comportamiento similar al caso de  $P = 0.01$ ; finalmente, cuando  $P = 0.9$  las curvas son básicamente indistinguibles ya que se han superpuesto todas. Así a medida que  $P \rightarrow 1$  y  $N$  se hace grande entonces el comportamiento de la energía interna de las redes es exactamente el mismo.

Un comportamiento similar al reportado en la energía interna del párrafo anterior se hace presente tanto para la entropía, ver gráficas 4.23, como para la capacidad calorífica, ver gráficas 4.24.

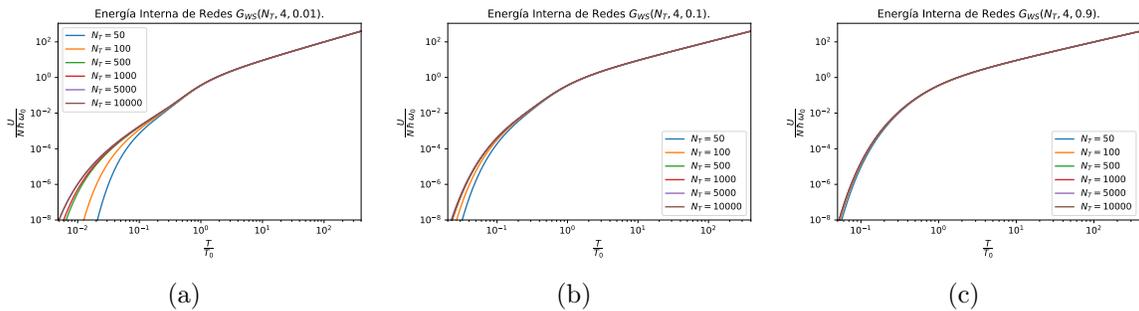


Figura 4.22: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura de redes  $G_{WS}$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.01$  (b)  $P = 0.1$  (c)  $P = 0.9$ .

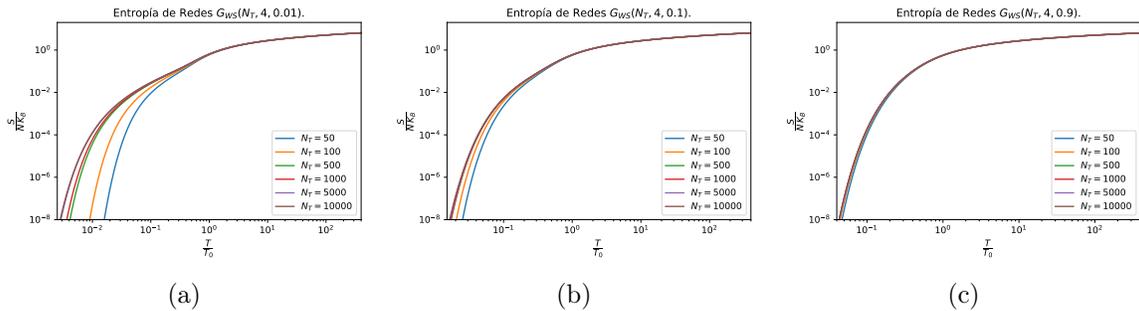


Figura 4.23: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de redes  $G_{WS}$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.01$  (b)  $P = 0.1$  (c)  $P = 0.9$ .

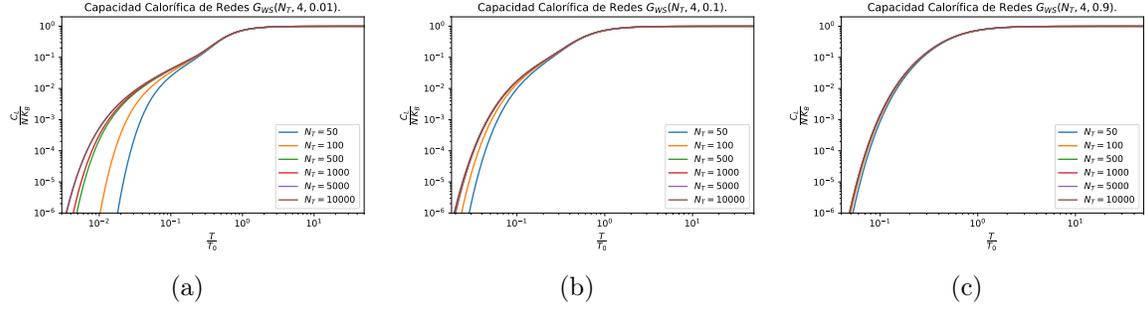


Figura 4.24: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de redes  $G_{WS}$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.01$  (b)  $P = 0.1$  (c)  $P = 0.9$ .

Ahora se presentan los resultados de los parámetros termodinámicos asociados a las redes  $G_{NWS}$ , las gráficas 4.25 corresponden a la energía interna, mientras que las gráficas 4.26 y 4.27 corresponden a la entropía y la capacidad calorífica, respectivamente.

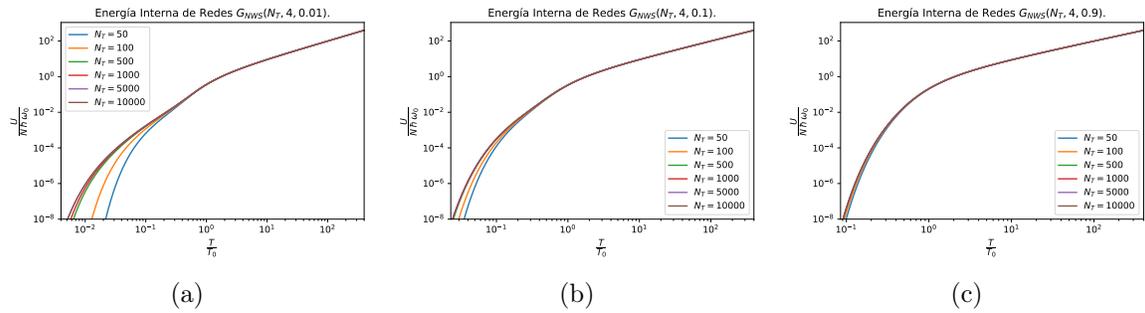


Figura 4.25: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura de redes  $G_{NWS}$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.01$  (b)  $P = 0.1$  (c)  $P = 0.9$ .

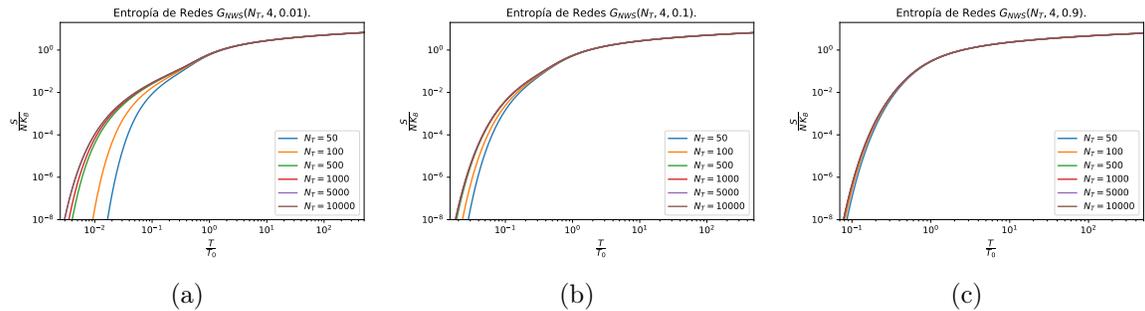


Figura 4.26: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de redes  $G_{NWS}$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.01$  (b)  $P = 0.1$  (c)  $P = 0.9$ .

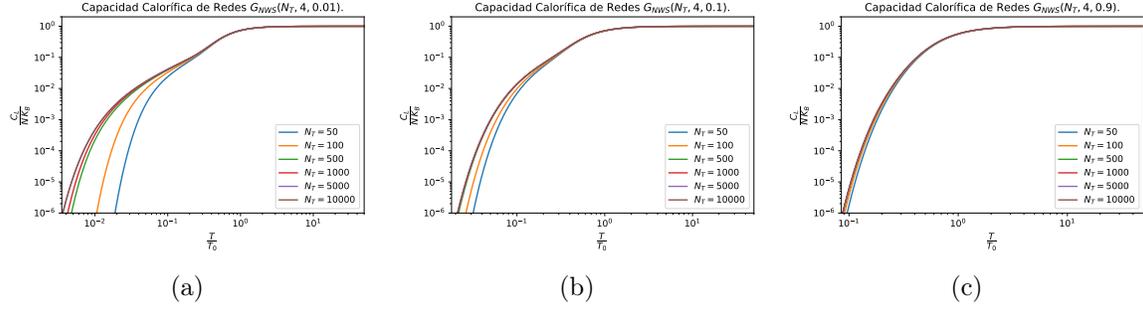


Figura 4.27: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de redes  $G_{NWS}$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.01$  (b)  $P = 0.1$  (c)  $P = 0.9$ .

Nótese que en general los parámetros termodinámicos de redes  $G_{NWS}$  son iguales sin importar el número de nodos a temperaturas intermedias y altas. Por otra parte, a bajas temperaturas, cuando la probabilidad de generar enlaces es  $P = 0.01$ , a medida que el número de nodos crece las tres cantidades termodinámicas aumentan, a temperatura fija; cuando la probabilidad de generar enlaces es  $P = 0.1$  se replica el comportamiento explicado para la probabilidad de generar enlaces  $P = 0.01$ ; cuando  $P = 0.9$ , entonces las curvas se han superpuesto todas, por lo que igual que en las redes  $G_{WS}$ , a medida que  $P \rightarrow 1$  y  $N$  se hace grande entonces el comportamiento entre redes es exactamente el mismo.

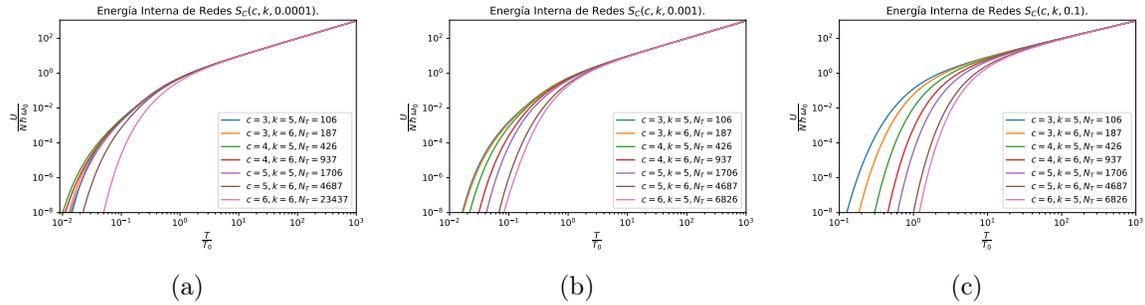


Figura 4.28: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura de redes  $S_C$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.0001$  (b)  $P = 0.001$  (c)  $P = 0.1$ .

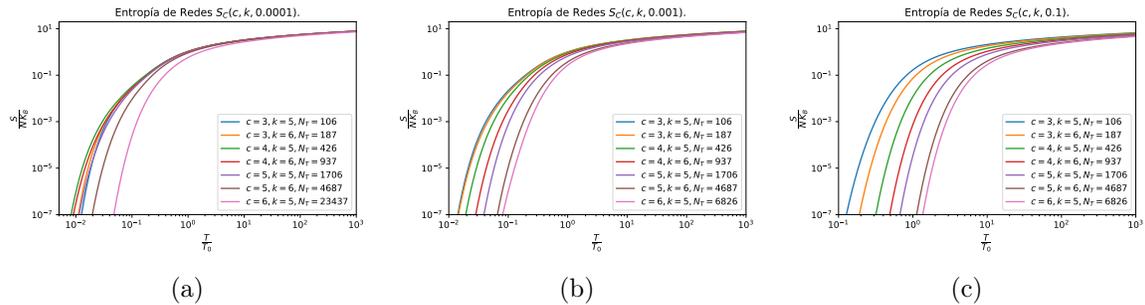


Figura 4.29: Comportamiento de la entropía interna en función de la temperatura de redes  $S_C$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.0001$  (b)  $P = 0.001$  (c)  $P = 0.1$ .

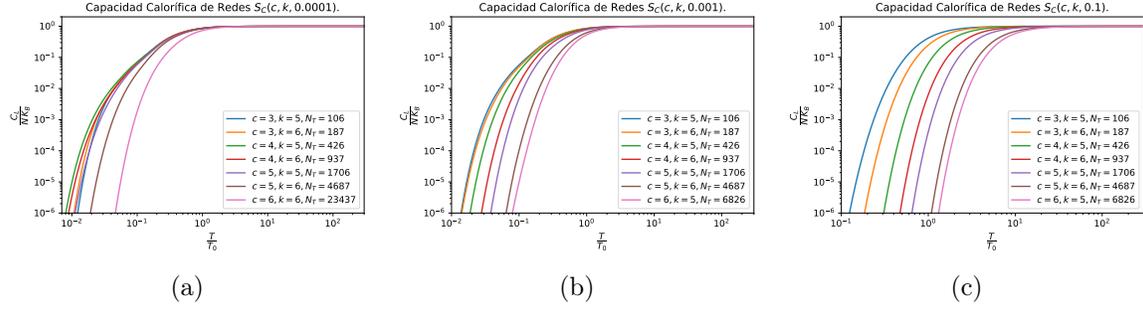


Figura 4.30: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de redes  $S_C$  a probabilidad  $P$  fija (a)  $P = 0.0001$  (b)  $P = 0.001$  (c)  $P = 0.1$ .

Los parámetros termodinámicos redes de árbol de Cayley cuando el número de nodos es variable se presentan en las figuras 4.28-4.30.

Primero se analizará la energía interna, de acuerdo a la gráfica 4.28a para temperaturas intermedias y altas el comportamiento de la energía interna es el mismo sin importar el número de nodos, ahora bien, en el régimen de bajas temperaturas y para una probabilidad de generar enlaces  $P = 0.0001$  no se tiene un comportamiento bien definido como en el caso de las redes de *Watts-Strogatz* ya que en como se puede ver en 4.28a para redes con 187, 426, 937 y 1706 nodos aumenta la energía interna respecto a la red de 106 nodos, mientras que para las redes de 4687 y 23437 nodos la energía interna disminuye, a temperatura fija, no obstante, esto puede atribuirse a que, como se menciona en la sección 4.3 los casos base de árbol de Cayley son redes con una distribución de grado de red de mundo pequeño pero a medida que la probabilidad  $P$  de generar enlaces crece se tiene que la distribución de grado tiende a una distribución normal.

Si ahora se consulta la gráfica 4.28b donde la probabilidad de generar enlaces es  $P = 0.001$ , puede observarse que para temperaturas altas el comportamiento de la energía interna es, nuevamente, el mismo sin importar el número de nodos. En el régimen de bajas e intermedias temperaturas a medida que crece el número de nodos la energía interna disminuye, a temperatura fija, sin que las curvas se superpongan entre ellas, por lo que *a priori* no es posible saber si existe un número de nodos en el cual exista un comportamiento asintótico, como en redes de *Watts-Strogatz*, al cual tienda la energía interna cuando se tratan redes más grandes a la presentadas aquí.

Si ahora se considera una probabilidad de reconexión  $P = 0.1$ , ver gráfica 4.28c, a temperaturas altas el comportamiento de la energía interna es el mismo sin importar el número de nodos. En el régimen de bajas e intermedias temperaturas a medida que crece el número de nodos la energía interna disminuye, a temperatura fija, sin que las curvas se superpongan, por lo que en este caso tampoco es posible extrapolar un comportamiento asintótico. Nótese que en este caso la energía disminuye en mayor medida en comparación con el caso en el que la probabilidad de reconexión es  $P = 0.001$ .

En relación a los parámetros de entropía, ver 4.29, y de capacidad calorífica, ver 4.30, se presentan similitudes al comportamientos de la energía interna con probabilidades de generar enlaces iguales.

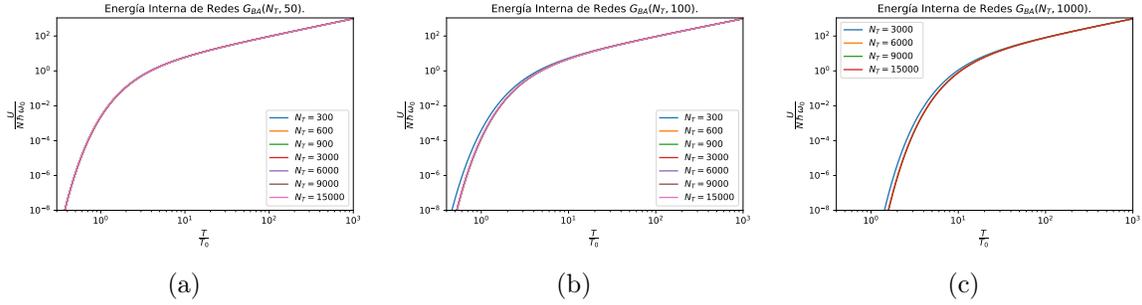


Figura 4.31: Comportamiento de la energía interna en función de la temperatura de redes  $G_{BA}$  con número de nodos inicial  $m_0$  fijo (a)  $m_0 = 50$  (b)  $m_0 = 100$  (c)  $m_0 = 1000$ .

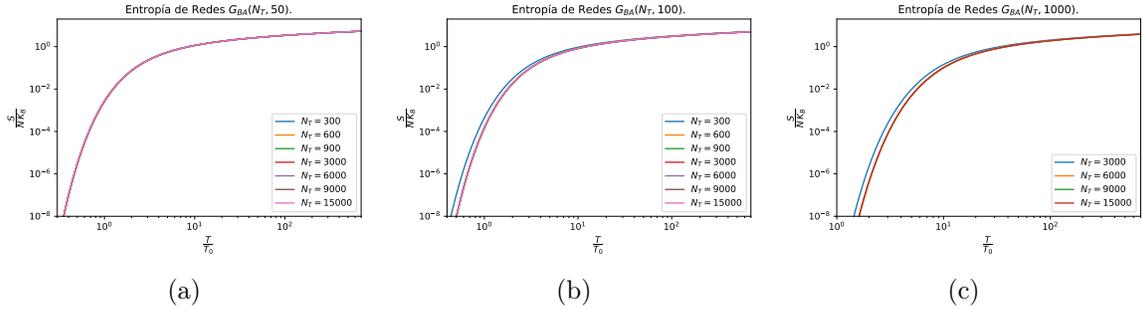


Figura 4.32: Comportamiento de la entropía en función de la temperatura de redes  $G_{BA}$  con número de nodos inicial  $m_0$  fijo (a)  $m_0 = 50$  (b)  $m_0 = 100$  (c)  $m_0 = 1000$ .

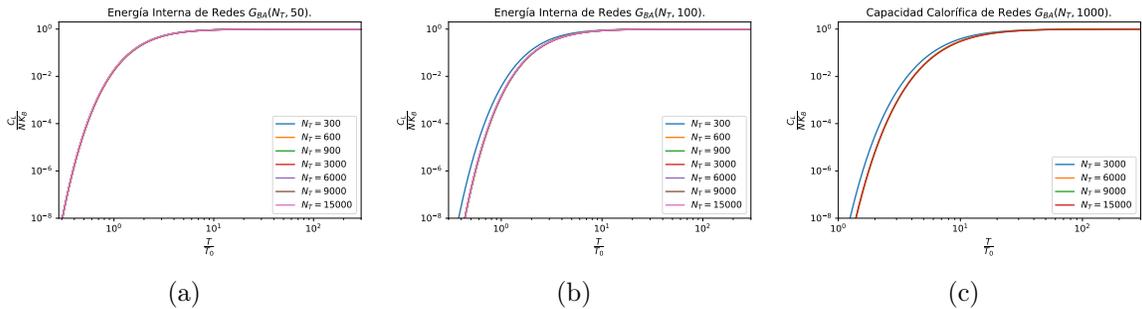


Figura 4.33: Comportamiento de la capacidad calorífica en función de la temperatura de redes  $G_{BA}$  con número de nodos inicial  $m_0$  fijo (a)  $m_0 = 50$  (b)  $m_0 = 100$  (c)  $m_0 = 1000$ .

Finalmente, se presentan los parámetros termodinámicos asociados a redes de *Barabási-Albert*, como se puede ver en las figuras 4.31-4.33 estas redes son las menos afectadas, en comparación a la redes de *Watts-Strogatz* y de árboles de Cayley, cuando el número de nodos cambia, en particular cuando  $m_0 = 50$  la energía interna, la

entropía y la capacidad calorífica no se ven afectadas por el número de nodos en la red, en todos los regímenes de temperaturas. Por otro lado cuando  $m_0 = 100$  se puede observar que los parámetros termodinámicos disminuyen, a temperatura fija, pero únicamente lo hacen respecto al caso de la red de  $N_T = 50$  nodos ya que el resto de las curvas se superponen para  $N_T > 50$ . Como último caso considerado se tomó el valor  $m_0 = 1000$  puede observarse que los parámetros termodinámicos disminuyen, a temperatura fija, pero únicamente lo hacen respecto al caso de la red de  $N_T = 3000$  nodos ya que el resto de las curvas se superponen para  $N_T > 3000$ . Debe notarse que en los resultados mostrados en 4.31-4.33 siempre se cumple que  $m_0 \leq 0.3N_T$ .



## 5 Conclusiones

Uno de los sistemas más simples y con un uso recurrente dentro de la física es el oscilador armónico ya que ha permitido desarrollar y entender aspectos fundamentales en diversas teorías, como lo son la mecánica cuántica, la teoría cuántica de campos, la mecánica clásica, etcétera, es así que para motivar e incentivar al estudio de redes complejas en sistemas físicos se trataron osciladores lineales acoplados desde la perspectiva de la **Teoría de Redes**.

Es menester mencionar que todos los tipos de redes empleadas en el presente trabajo son caracterizados por un conjunto de valores llamados **parámetros de red**, por otra parte también es necesario destacar que dichas redes dependen de probabilidades en algún sentido; en redes de *Watts-Strogatz* se trataron probabilidades de reconexión o bien para generar enlaces; en redes de árboles de Cayley se usaron probabilidades para generar enlaces y en redes de *Barabási-Albert* la probabilidad venía de la conexión preferencial, no obstante, esta aleatoriedad no se exhibe en el comportamiento de los espectros de frecuencias promedio, dado un conjunto de parámetros de red fijos. En pocas palabras cada espectro de frecuencias promedio queda determinado por los parámetros de red.

En cuanto a la termodinámica, básicamente se pudieron encontrar dos tipos de comportamientos dependiendo del régimen de temperaturas en el que se trate al sistema. Se pudo determinar que en el régimen de altas temperaturas se recuperaban los comportamientos “clásicos” de los parámetros macroscópicos sin importar el tipo de red, es decir, los efectos de la estructura de red compleja no se manifiestan en la descripción termodinámica.

Complementando el párrafo anterior, en el régimen de bajas temperaturas fue donde los efectos de red compleja cobraron relevancia pues es en este régimen se pudo observar que, en efecto, lo que define el comportamiento termodinámico es la topología de red, para dejar en claro este hecho, considérense las dos variantes de redes de *Watts-Strogatz*, es decir, las redes  $G_{WS}$  y las redes  $G_{NWS}$ , ambos casos se construyen a partir de un  $k$ -anillo  $C_{N_T}(k)$ , sin embargo, las redes resultantes son distintas, en el caso de redes  $G_{WS}$  el número de enlaces permanece constante mientras en las redes  $G_{NWS}$  el número de enlaces aumenta, no obstante, en ambos casos las distribuciones de grado se pudieron aproximar por distribuciones de Poisson por lo que dichas redes caen en la categoría de redes de mundo pequeño, y tal como se mostró en el capítulo

cuatro los comportamientos son muy semejantes tanto en los espectros de frecuencias como en los parámetros termodinámicos, es así que hay indicios de que lo que determina la termodinámica, a bajas temperaturas, de un conjunto de osciladores es la topología de red asociada. Más aún los otros dos modelos de redes, es decir de árbol de Cayley y de *Barabási-Albert* no exhibieron similitudes representativas, en el régimen de bajas temperaturas, por lo que, presumiblemente, topologías de red diferentes también implica comportamientos termodinámicos diferentes.

Otro aspecto importante en las redes de *Watts-Strogatz* es que para probabilidades pequeñas, ya sea de reconexión o para generar enlaces, y a temperaturas intermedias se hallaron remanentes del modelo de Debye, es decir, se pudo observar un comportamiento lineal en la capacidad calorífica así como en las variables termodinámicas  $U$  y  $S$ , tal como se muestra en el apéndice A. Por otro lado, en redes de árbol de Cayley, en este mismo régimen, los parámetros termodinámicos tendían a comportarse como un cristal con el modelo de Einstein a medida que la probabilidad de generar enlaces crecía mientras que para redes de *Barabási-Albert* todas las curvas tenían un comportamiento exponencial para bajas e intermedias temperaturas.

En pocas palabras la topología de red no solo define la estructura de la red *per se* sino que también se refleja en su comportamiento colectivo (espectros de frecuencias) y termodinámico (variables termodinámicas) dando paso a una categorización a los sistemas de osciladores acoplados desde la *Teoría de Redes*.

Finalmente, en reiteradas ocasiones se mencionó que las redes empleadas en el presente trabajo fueron simples y conexas, pues de esta manera se facilitó el análisis, sin embargo, el concepto de gráfica puede extenderse aún más, si, por ejemplo, se consideran las hipergráficas, es decir gráficas con lazos o enlaces paralelos se pueden incluso considerar autointeracciones, o bien si se consideran redes con peso entonces también se pueden modular las interacciones por lo que este trabajo solo es una pequeña muestra de lo diverso que puede ser el uso de redes.

# A Comparativa con lo modelos de Debye y Einstein

En la sección 2.5 se hallaron las expresiones analíticas para la energía interna, entropía y capacidad calorífica con el modelo de Einstein, estas expresiones son, respectivamente:

$$U = \frac{N\hbar\omega_0}{e^{\hbar\omega_0\beta} - 1}, \quad (\text{A.1})$$

$$S = NK_B \left[ \frac{\hbar\omega_0\beta}{e^{\hbar\omega_0\beta} - 1} - \ln(1 - e^{-\hbar\omega_0\beta}) \right], \quad (\text{A.2})$$

$$C_L = NK_B \frac{(\hbar\omega_0\beta)^2 e^{\hbar\omega_0\beta}}{(e^{\hbar\omega_0\beta} - 1)^2}. \quad (\text{A.3})$$

Nótese que estos parámetros termodinámicos están caracterizados por el valor de  $\omega_0$  que es la frecuencia de oscilación fundamental. Sin embargo, para comparar los sistemas y ponerlo todo en términos de la frecuencia  $\omega_0$  se define la razón entre la frecuencia a la que oscilarían todos los nodos en el modelo de Einstein y la frecuencia fundamental

$$r = \frac{\tilde{\omega}_0}{\omega_0}. \quad (\text{A.4})$$

Por otro lado, los parámetros termodinámicos en el modelo de Debye son

$$U = N\hbar\omega_{\text{máx}}\mathcal{T}^2 \int_0^{1/\mathcal{T}} \frac{x}{e^x - 1} dx, \quad (\text{A.5})$$

$$S = NK_B\mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} \left[ \frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x}) \right] dx, \quad (\text{A.6})$$

$$C_L = NK_B\mathcal{T} \int_0^{1/\mathcal{T}} \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} dx. \quad (\text{A.7})$$

donde,  $\mathcal{T}$  está dado por

$$\mathcal{T} = \frac{\omega_0 T}{\omega_{\text{máx}} T_0}. \quad (\text{A.8})$$

Primero se presenta los resultados referentes a la energía interna, como se puede ver en las gráficas A.1 para redes  $G_{WS}$  y A.2 para redes  $G_{NWS}$  a pequeñas probabilidades de reconexión y de generar enlaces, respectivamente, la curva del modelo

de Debye describe de manera adecuada el comportamiento de la energía interna para temperaturas intermedias y altas, sin embargo a medida que crece la probabilidad se tiene que el comportamiento se asemeja más al modelo de Einstein.

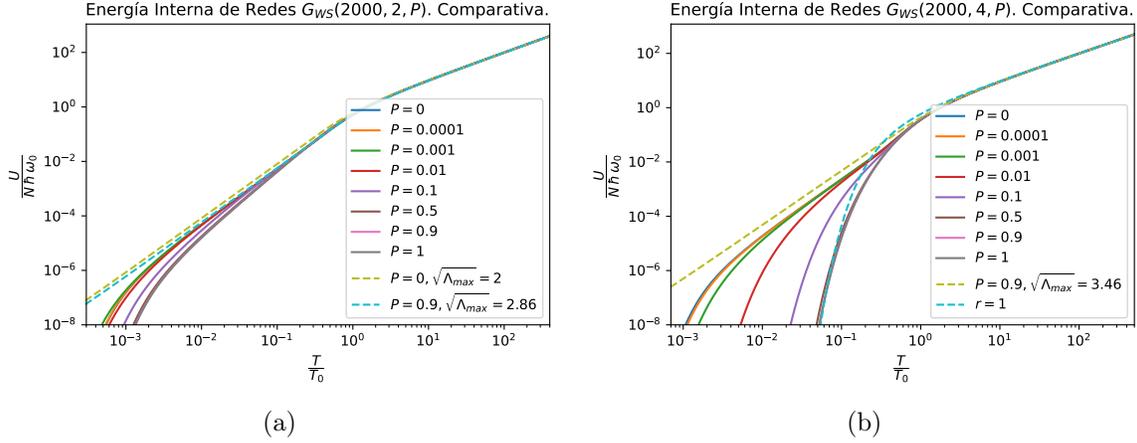


Figura A.1: Comparativa de la energía interna de redes  $G_{WS}$  para diferentes valores de probabilidad de reconexión  $P$ . (a) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 2$  ( $P = 0$ ) mientras que la línea cian corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 2.86$  ( $P = 0.9$ ). (b) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 3.46$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ .

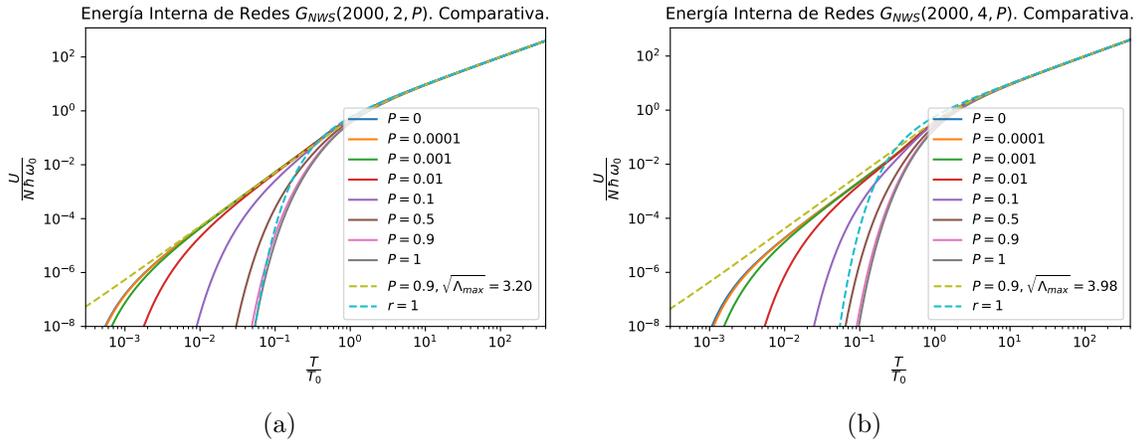


Figura A.2: Comparativa de la energía interna de redes  $G_{NWS}$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. (a) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 3.20$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ . (b) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 3.98$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ .

En el caso de la energía interna de redes de árboles de Cayley el modelo que presenta una mayor similitud con las curvas es el modelo de Einstein el cual se hace

presente desde una probabilidad de reconexión de  $P = 0.001$ , ver gráfica A.3, para probabilidades menores Einstein no ajusta bien debido a que, como bien se dijo en el capítulo tres, el caso base de árbol de Cayley es considerado una red de mundo pequeño por lo que quedan remanentes de ese comportamiento en hasta que se hace presente el cambio en la topología de red. Nótese que para el caso límite  $P \rightarrow 1$  la curva de la red generada y el modelo de Einstein empatan a todas las temperaturas ya que en este caso al tratarse de una red completa, lo que se obtiene es que el espectro de frecuencias se ha saturado en una sola frecuencia.

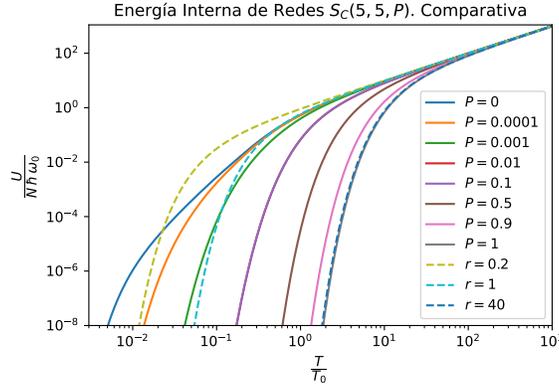


Figura A.3: Comparativa de la energía interna de redes  $S_C$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 0.7$ ; la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ ; la línea azul punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 40$ .

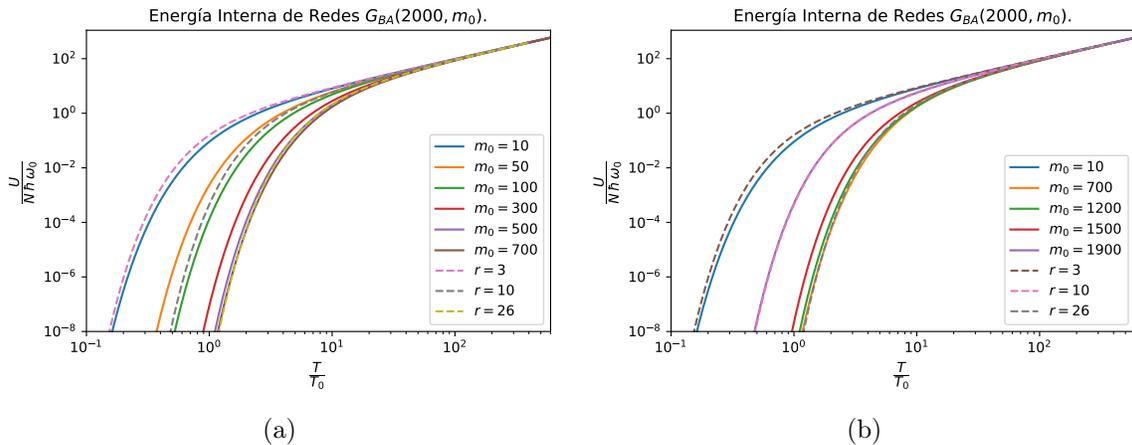


Figura A.4: Comparativa de la energía interna de redes  $G_{BA}$  para diferentes cantidades iniciales de nodos  $m_0$ . (a) La línea rosa punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 3$ ; la línea gris punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 10$ ; la línea amarilla punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 26$ . (b) La línea café punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 3$ ; la línea rosa punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 10$ ; la línea gris punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 26$ .

Las gráficas A.4 contienen la información de la energía interna en función de la temperatura de redes de *Barabási-Albert*, en este caso todas las curvas pueden ser aproximadas por el modelo de Einstein.

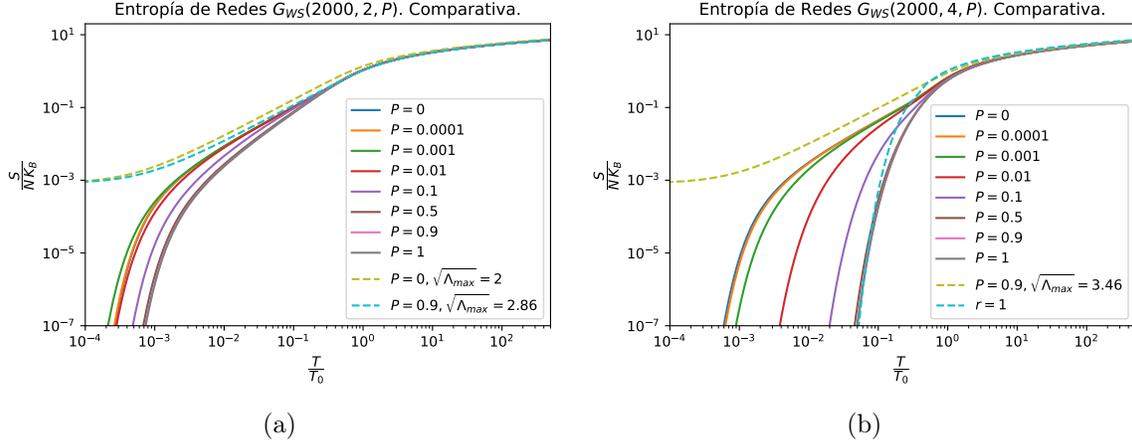


Figura A.5: Comparativa de la entropía de redes  $G_{WS}$  para diferentes valores de probabilidad de reconexión  $P$ . (a) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 2$  ( $P = 0$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 2.86$  ( $P = 0.9$ ). (b) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 3.46$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ .

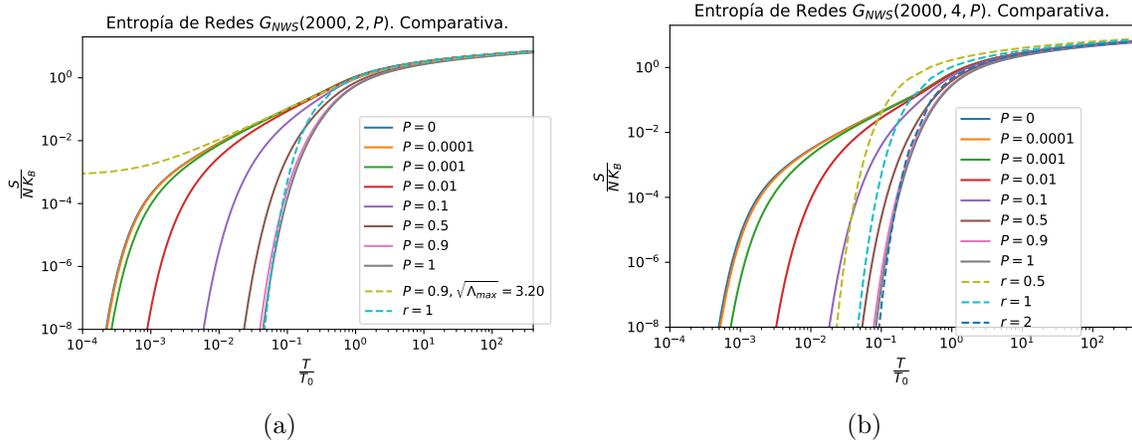


Figura A.6: Comparativa de la entropía de redes  $G_{NWS}$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. (a) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\max}}{\omega_0} = 3.20$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ . (b) La línea amarilla corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 0.5$ , la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ , la línea azul punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 2$ .

Ahora se presenta los resultados referentes a la entropía, las gráficas A.5 y A.6 muestran la entropía de redes  $G_{WS}$  y  $G_{NWS}$  respectivamente, nuevamente, a pequeñas

probabilidades de reconexión (redes  $G_{WS}$ ) y de generar enlaces (redes  $G_{NWS}$ ), la curva del modelo de Debye describe de manera adecuada el comportamiento de la entropía para temperaturas intermedias y altas, sin embargo a medida que crece la probabilidad se tiene que el comportamiento se asemeja más al modelo de Einstein.

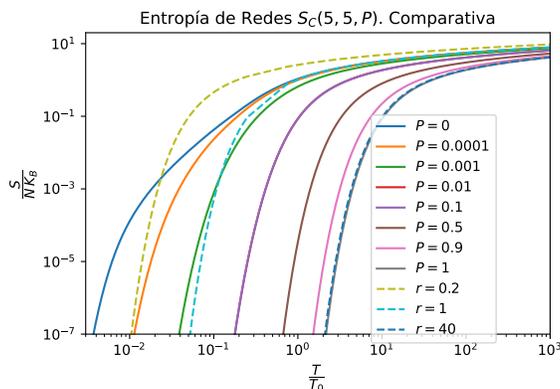


Figura A.7: Comparativa de la entropía de redes  $S_C$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 0.2$ ; la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ ; la línea azul punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 40$ .

Por otro lado en redes de árboles de Cayley el modelo que presenta un comportamiento semejante a las curvas calculadas de la entropía es el de Einstein el cual se hace presente desde una probabilidad de reconexión de  $P = 0.001$ , ver gráfica A.7, nuevamente, para probabilidades menores el modelo de Einstein no ajusta bien ya que el caso base de árbol de Cayley es considerado una red de mundo pequeño por lo que quedan reminiscencias de ese comportamiento en hasta que se hace presente el cambio en la topología de red. Debe observarse que en el caso límite  $P \rightarrow 1$  la curva de la red generada y el modelo de Einstein empatan a todas las temperaturas ya que en este caso al tratarse de una red completa, lo que se obtiene es que el espectro de frecuencias se ha saturado en una sola frecuencia.

Las gráficas A.8 contienen la información de la entropía en función de la temperatura de redes de *Barabási-Albert*, en este caso todas las curvas pueden ser aproximadas por el modelo de Einstein desde valores de  $m_0 = 50$ .

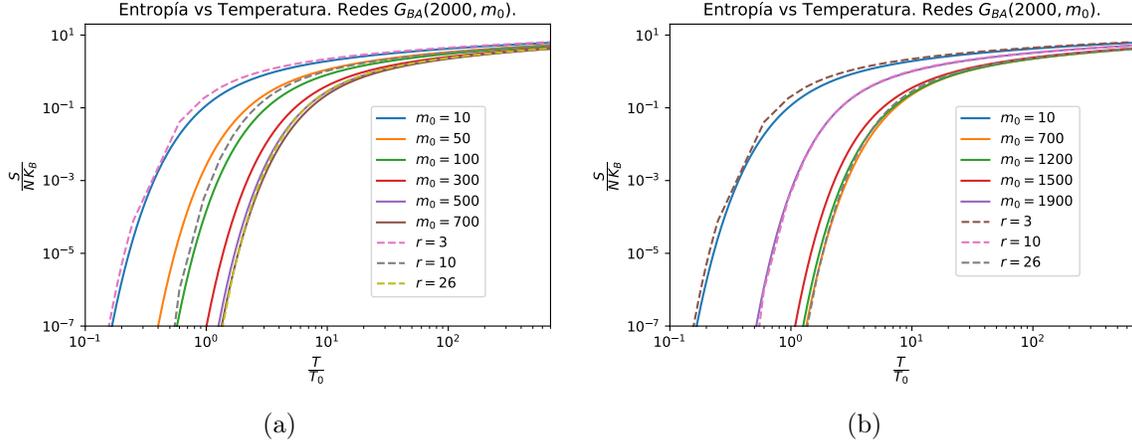


Figura A.8: Comparativa de la entropía de redes  $G_{BA}$  para diferentes cantidades iniciales de nodos  $m_0$ . (a) La línea rosa punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 3$ ; la línea gris punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 10$ ; la línea amarilla punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 26$ . (b) La línea café punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 3$ ; la línea rosa punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 10$ ; la línea gris punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 26$ .

La capacidad calorífica de las redes de *Watts-Strogatz* se muestran en las figuras A.9 y A.10 para pequeñas probabilidades de reconexión y de generar enlaces, respectivamente, la curva del modelo de Debye describe de manera adecuada el comportamiento de la capacidad para temperaturas para temperaturas intermedias y altas, sin embargo a medida que crece la probabilidad se tiene que el comportamiento se asemeja más al modelo de Einstein.

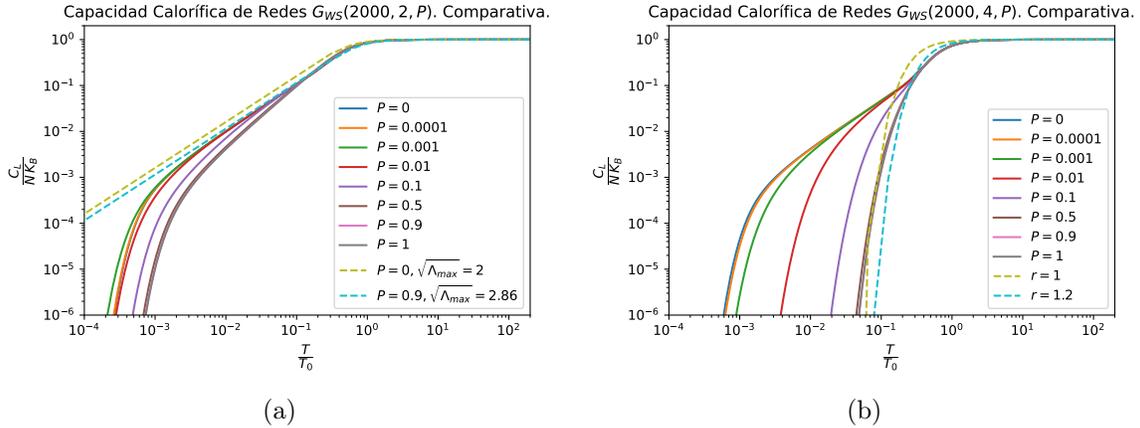


Figura A.9: Comparativa de la capacidad calorífica de redes  $G_{WS}$  para diferentes valores de probabilidad de reconexión  $P$ . (a) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{m\acute{a}x}}{\omega_0} = 2$  ( $P = 0$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{m\acute{a}x}}{\omega_0} = 2.86$  ( $P = 0.9$ ). (b) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{m\acute{a}x}}{\omega_0} = 3.46$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ .

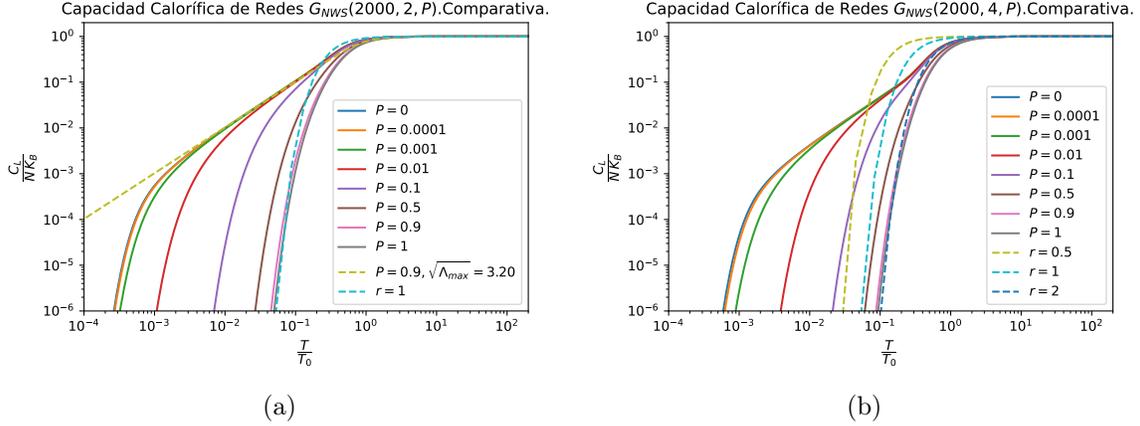


Figura A.10: Comparativa de la capacidad calorífica de redes  $G_{NWS}$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. (a) La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Debye en el cual  $\frac{\omega_{\text{máx}}}{\omega_0} = 3.20$  ( $P = 0.9$ ) mientras que la línea cian corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ . (b) La línea amarilla corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 0.5$ , la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ , la línea azul punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 2$ .

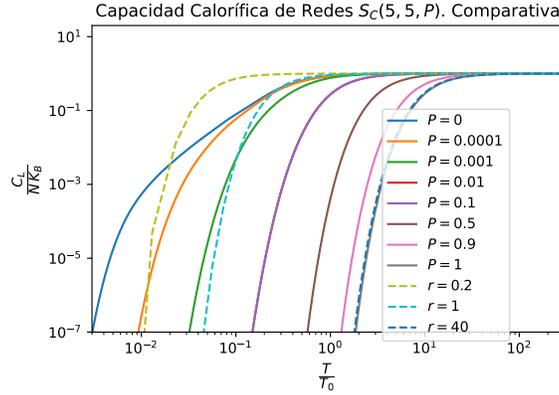


Figura A.11: Comparativa de la capacidad calorífica de redes  $S_C$  para diferentes valores de probabilidad  $P$  de generar enlaces. La línea amarilla punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 0.2$ ; la línea cian punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 1$ ; la línea azul punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 40$ .

Continuando ahora con la capacidad calorífica de redes de árboles de Cayley, se tiene que el modelo que presenta un comportamiento semejante a las curvas calculadas es el de Einstein el cual se hace presente desde una probabilidad de reconexión de  $P = 0.001$ , ver gráfica A.11, nuevamente, para probabilidades menores el modelo de Einstein no ajusta bien ya que el caso base de árbol de Cayley es considerado una red de mundo pequeño por lo que quedan reminiscencias de ese comportamiento en hasta que se hace presente el cambio en la topología de red. Debe observarse que en el caso límite  $P \rightarrow 1$  la curva de la red generada y el modelo de Einstein empatan a todas las temperaturas ya que en este caso al tratarse de una red completa, lo que

se obtiene es que el espectro de frecuencias se ha saturado en una sola frecuencia.

Las gráficas A.12 contienen la información de la capacidad calorífica en función de la temperatura de redes de *Barabási-Albert*, en este caso todas las curvas pueden ser aproximadas por el modelo de Einstein desde valores de  $m_0 = 50$ .

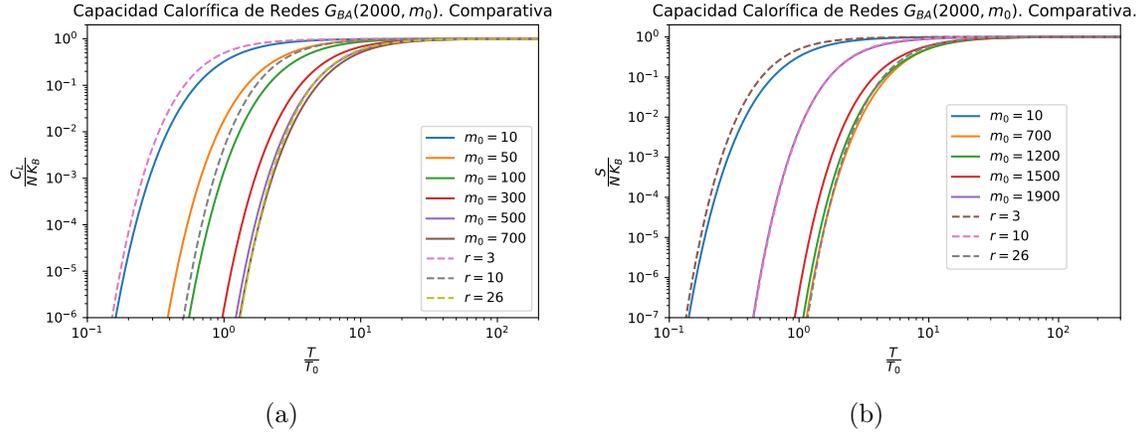


Figura A.12: Comparativa de la capacidad calorífica de redes  $G_{BA}$  para diferentes cantidades iniciales de nodos  $m_0$ . (a) La línea rosa punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 3$ ; la línea gris punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 10$ ; la línea amarilla punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 26$ . (b) La línea café punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 3$ ; la línea rosa punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 10$ ; la línea gris punteada corresponde al modelo de Einstein en el cual  $r = 26$ .

# Bibliografía

## Libros

- [1] Jordi Ortín y José María Sancho. *Curso de Física Estadística*. Universitat de Barcelona, 2001. ISBN: 9788483382790.
- [2] Kerson Huang. *Statistical Mechanics*. Wiley India, 2008. ISBN: 9788126518494.
- [3] Donald McQuarrie. *Statistical Mechanics*. Harper & Row Publishers, 1976. ISBN: 9781891389153.
- [4] Vicente Garzó y Rubén Gómez. *Introducción a la Física Estadística*. Servicio de Publicaciones de la Universidad de Extremadura, 2022. ISBN: 9788491271147.
- [5] Diógenes Campos. *Elementos de Mecánica Estadística*. Academia Colombiana de Ciencias Exactas Físicas y Naturales, 2006. ISBN: 9589205283.
- [6] Gerardo Carmona. *Termodinámica Clásica*. Las Prensas de Ciencias, 2012. ISBN: 9789703244973.
- [7] Leopoldo García-Colín. *Introducción a la Termodinámica Clásica*. Trillas, 1990. ISBN: 9789682438813.
- [8] Mark W. Zemansky y Richard H. Dittman. *Heat and Thermodynamics*. McGraw-Hill College, 1996. ISBN: 9780070170599.
- [9] Enrico Fermi. *Thermodynamics*. Dover Publications, 1956. ISBN: 9780486603612.
- [10] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, 1976. ISBN: 0030839939.
- [11] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004. ISBN: 9780471415268.
- [12] William E. Boyce y Richard C. DiPrima. *Ecuaciones Diferenciales y Problemas con Valores en la Frontera*. Limusa, 2001. ISBN: 9681849744.
- [13] Stephen Friedberg, Arnold Insel y Lawrence Spence. *Linear Algebra*. Prentice Hall, 1997. ISBN: 9780132733274.
- [14] Herbert Goldstein, Charles Poole y John Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 2001. ISBN: 9780321188977.
- [15] Albert Barabási. *Network Science, Márton Pósfai*. Cambridge University Press, 2016. ISBN: 9781107076266.
- [16] Reinhart Diestel. *Graph Theory*. Springer, 2015. ISBN: 9783662536216.

- [17] Ernesto Estrada y Philip A. Knight. *A First Course in Network Theory*. Oxford University Press, 2015. ISBN: 9780198726456.
- [18] Diego Antonio González. *Introducción a la Teoría de la Gráficas*. Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas Universidad Autónoma Metropolitana - Cuajimalpa, 2017. ISBN: 9786072810372. URL: [http://www.cua.uam.mx/pdfs/conoce/libroselec/24Libro\\_Introduccion\\_a\\_la\\_teor%C3%ADa\\_de\\_las\\_gra.pdf](http://www.cua.uam.mx/pdfs/conoce/libroselec/24Libro_Introduccion_a_la_teor%C3%ADa_de_las_gra.pdf).
- [19] Mark Newman. *Networks*. Oxford University Press, 2018. ISBN: 9780198805090.
- [20] Linda E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. WILEY-VCH, 2016. ISBN: 9783527690466.
- [21] Léon Brillouin. *Wave Propagation and Group Velocity*. Academic Press, 1960. ISBN: 9781483253930.
- [22] Léon Brillouin. *Wave Propagation in Periodic Structures*. McGraw-Hill, 1946. ISBN: 9780486600345.
- [23] Ernesto Estrada. *The Structure of Complex Networks: Theory and Applications*. Oxford University Press, 2012.

## Artículos

- [24] Beom Jum Kim, H. Hong y M. Y. Choi. “Netons: vibrations of complex networks”. En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 36 (2003), págs. 6329-6336. DOI: <https://doi.org/10.1038/30918>.
- [25] Duncan J. Watts y Steven H. Strogatz. “Collective dynamics of ‘small world’ networks”. En: *Nature* 393 (1998), págs. 440-442. DOI: <https://doi.org/10.1038/30918>.
- [26] R. Aguilar-Sánchez, J. A. Méndez-Bermúdez, Francisco A. Rodrigues y José M. Sigarreta. “Topological versus spectral properties of random geometric graphs”. En: *Phys. Rev. E* 102 (4 2020), pág. 042306. DOI: [10.1103/PhysRevE.102.042306](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.102.042306). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.102.042306>.
- [27] Albert-László Barabási, Réka Albert y Hawoong Jeong. “Mean-field theory for scale-free random networks”. En: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 272.1 (1999), págs. 173-187. ISSN: 0378-4371. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0378-4371\(99\)00291-5](https://doi.org/10.1016/S0378-4371(99)00291-5). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437199002915>.
- [28] Ernesto Estrada, Naomichi Hatano y Michele Benzi. “The physics of communicability in complex networks”. En: *Physics Reports* 514.3 (2012). The Physics of Communicability in Complex Networks, págs. 89-119. ISSN: 0370-1573. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2012.01.006>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157312000154>.

- [29] Jie Ren y Baowen Li. “Thermodynamic stability of small-world oscillator networks: A case study of proteins”. En: *Phys. Rev. E* 79 (5 2009), pág. 051922. DOI: 10.1103/PhysRevE.79.051922. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.79.051922>.
- [30] G. Torres-Vargas, R. Fossion y J.A. Méndez-Bermúdez. “Normal mode analysis of spectra of random networks”. En: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 545 (2020), pág. 123298. ISSN: 0378-4371. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.123298>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437119318485>.
- [31] J. Wang, C. Xu, J. Feng y et al. “Synchronization of networked harmonic oscillators subject to Markovian jumping coupling strengths”. En: *Nonlinear Dyn* 91 (2018), págs. 2607-2619. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11071-017-4034-8>.
- [32] Zhan M., Liu S. y He Z. “Matching rules for collective behaviors on complex networks: optimal configurations for vibration frequencies of networked harmonic oscillators”. En: *PLoS One* 8 (2013). DOI: [doi:10.1371/journal.pone.0082161](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0082161).

## Otras Referencias

- [33] Maximino Aldana. *Redes Complejas: Estructura, Dinámica y Evolución*. 2011.
- [34] Jiaqi Jiang. *An Introduction to Spectral Graph Theory*. URL: <https://math.uchicago.edu/~may/REU2012/REUPapers/JiangJ.pdf>.
- [35] *NetworkX — NetworkX documentation*. URL: <https://networkx.org/> (visitado 07-04-2023).
- [36] David Tong. *Statistical Physics*. URL: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/statphys/statphys.pdf>.

