

# TECNOLÓGICO NACIONAL DE MÉXICO

## INSTITUTO TECNOLÓGICO DE OAXACA

## DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN

MAESTRÍA EN DESARROLLO REGIONAL Y TECNOLÓGICO

TESIS

Estudio de cuasicristales Fibonacci en una dimensión a partir del modelo de Frenkel-Kontorova

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

Maestro en Ciencias en Desarrollo Regional y Tecnológico

PRESENTA

Víctor Ortiz Zárate

## DIRIGIDA POR

Dr. Andrei Jesús Martínez Mendoza Dr. Josué Ramírez Hernández

## ASESORES

Dr. Javier Francisco Jiménez Jarquín Dr. Fernándo Chiñas Castillo Dr. Luis Miguel Hernández Pérez

Junio 2024





Instituto Tecnológico de Oaxaca División de Estudios de Posgrado e Investigación Maestría en Ciencias en Desarrollo Regional y Tecnológico

Oaxaca de Juárez, Oax., 29/abril/2024

Oficio No. DEPI-276/2024

Asunto: Autorización de impresión de tesis.

#### ING. HUITZILÍ DÍAZ JAIMES JEFA DEL DEPARTAMENTO DE SERVICIOS ESCOLARES. P R E S E N T E

Por este medio, comunico a usted que de acuerdo con las disposiciones establecidas en los Lineamientos para la operación de estudios de Posgrado en el Tecnológico Nacional de México, dependiente de la Secretaría de Educación Pública, el estudiante **Víctor Ortiz Zárate** con número de control M21161683, ha cumplido con todas las recomendaciones que el Comité Revisor hizo respecto a su tesis cuyo título es "Estudio de cuasicristales Fibonacci en una dimensión a partir del modelo de Frenkel-Kontorova", para obtener el grado de Maestro en Ciencias en Desarrollo Regional y Tecnológico.

Por lo anterior, la División a mi cargo le concede la autorización para que proceda el trámite correspondiente y la impresión de la misma.

Excelencia en Educación Tecnológica Tinstituto TECNOLÓGICO DE OAXACA "Tecnología Propia e Independencia Económica" DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN DR. MARCO ANTONIO SÁNCHEZ MEDINA JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE

JEFE DE LA DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO E INVESTIGACIÓN

MASM/RFA/\*cmh



No. Salton 22 States and 25 St

Avenida Ing. Víctor Bravo Ahuja No. 125 Esquina Calzada Tecnológico, C.P. 68030. Tel. (951) 5015016 e-mail: correo@tecnm.mx | www.oaxaca.tecnm.mx







Instituto Tecnológico de Oaxaca División de Estudios de Posgrado e Investigación Maestría en Ciencias en Desarrollo Regional y Tecnológico

Oaxaca de Juárez, Oax., <mark>29/abril/2024</mark> Oficio No. DEPI-223/2023 ASUNTO: Autorización de impresión de tesis.

#### C. VÍCTOR ORTIZ ZÁRATE ESTUDIANTE DEL PROGRAMA DE MAESTRÍA EN CIENCIAS EN DESARROLLO REGIONAL Y TECNOLÓGICO P R E S E N T E.

De acuerdo con las disposiciones para la Operación de Estudios de Posgrado e Investigación del Tecnológico Nacional de México, dependiente de la Secretaría de Educación Pública y habiendo cumplido con todas las indicaciones que la Comisión Revisora le hizo con respecto a su Tesis para obtener el grado de Maestro en Ciencias en Desarrollo Regional y Tecnológico, cuyo título es "Estudio de cuasicristales Fibonacci en una dimensión a partir del modelo de Frenkel-Kontorova", los abajo firmantes, integrantes de la Comisión Revisora le concedemos la autorización para que proceda a la Impresión de la misma.





#### Carta de cesión de derechos

En la Ciudad de Oaxaca de Juárez Oax., el día 23 del mes de mayo del año 2024, el que suscribe Víctor Ortiz Zárate, estudiante del programa de Maestría en Ciencias en Desarrollo Regional y Tecnológico, con número de control M21161683, manifiesta que es autor intelectual del presente trabajo de Tesis, que se desarrolló bajo la dirección del Dr. Andrei Jesús Martínez Mendoza, y cede los derechos del trabajo titulado: Estudio de cuasicristales Fibonacci en una dimensión a partir del modelo de Frenkel-Kontorova, al TecNM/Instituto Tecnológico de Oaxaca para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información del presente trabajo no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido solicitándolo a la siguiente dirección o contacto: amazingmechatronics@gmail.com, o geofrankenstein@gmail.com.

Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Atentamente.

Víctor Ortiz Zárate Nombre y firma

#### Resumen

El propósito de esta tesis es modelar el fenómeno de la fricción en una dimensión desde una perspectiva microscópica, específicamente una cadena de átomos o moléculas unidas por una fuerza elástica en contacto con una superficie, denominada "sustrato". Se propone una función aperiódica para describir la superficie del sustrato, la cuál es un arreglo basado en dos funciones específicas que se distribuyen siguiendo la secuencia Fibonacci. Para lograr este objetivo, se propone un hamiltoniano inspirado en el modelo de Krenkel-Kontorova para describir el sistema. Del hamiltoniano propuesto para un número finito de átomos y se resolvieron con el método de Diferencias Finitas. Nuestro análisis reveló que bajo ciertas condiciones, el sistema se comporta como un modelo continuo y permite la propagación de un solitón, lo que añade una observación de un fenómeno interesante.

#### Abstrac

The purpose of this thesis is to study one-dimensional Fibonacci quasicrystals using the Frenkel-Kontorova model, specifically a chain of atoms or molecules bound by an elastic force in contact with a surface, referred to as the "substrate..<sup>A</sup>n aperiodic function is proposed to describe the substrate surface, which is an arrangement based on two specific functions distributed according to the Fibonacci sequence. To achieve this goal, a Hamiltonian is proposed to describe the system. The proposed Hamiltonian for a finite number of atoms is then solved using the Finite Differences method. Our analysis reveals that under certain conditions, the system behaves like a continuous model and allows for the propagation of a soliton, adding an observation of an interesting phenomenon.

## Dedicatoria

A mi madre Reyna Zárate Rosales por su gran apoyo y porque siempre ha estado conmigo en las buenas y en las malas.

## Agradecimientos

A los doctores Andrei Jesús Martínez Mendoza, Josué Ramírez Hernández, Fernándo Chiñas Castillo, Luis Miguel Hernández Pérez por su apoyo y grandes consejos.

Al Instituto Tecnológico de Oaxaca.

## Lista de figuras

Fig. 1. Un boceto del modelo FK 1	16
Fig. 7.1.1 Cristales con distinta morfología pero iguales ángulos 2	20
Fig. 7.1.2 Octaedros regulares 2	20
Fig. 7.1.3 a) La noción de Haüy (1801) de que los cristales como la halita cúbic (NaCl) están formados por paralelepípedos elementales. b) Una imagen de microsco pio electrónico de barrido moderno del crecimiento en una aleación de europio-telur ilustra el concepto de Haüy	ca D- ro 21
Fig. 7.1.4 a) Un cristal cúbico con átomos que se repiten b) con grupos que se rep ten de diferentes átomos, y c) con una estructura periódica idealizada que represent el cristal mediante una matriz simple de puntos	vi- ta 21
Fig. 7.4.1 Cuando se empuja el bloque o se tira de él sobre una superficie, esta últim ejerce una fuerza de contacto sobre el bloque 2	ıa !4
Fig. 7.4.2 Las fuerzas normal y de fricción surgen de interacciones entre molécula en los puntos elevados de las superficies del bloque y del piso	аs 25
Fig. 7.4.3 a), b), c) Si no hay movimiento relativo, la magnitud de la fuerza d fricción estática $f_s$ es igual o menor que $\mu_s n$ . d) Si hay movimiento relativo, la mag- nitud de la fuerza de fricción cinética $f_k$ es igual a $\mu_k n$ . e) Gráfica de la magnitud de la fuerza de fricción $f$ en función de la magnitud de $T$ de la fuerza aplicada. L fuerza de fricción cinética varía un poco conforme se forman y se rompen los enlace intermoleculares	le g- ıd La 27
Figura 9.1 Representación bidimensional $V(x, y)$ del potencial en una secuencia de Fibonacci	le 42
Figura 10.1 En las dos graficas superiores, los potenciales son todavía periódico mientras que en las dos gráficas inferiores, ya no lo son, por lo que se puede ver que por a poco pierde su periodicidad 4	s, 20 46
Figura 10.2 Ilustración de cómo cambia el periódo en un potencial cuasiperiódic 4	20 17
Figura XII.1. Diagrama de la solución numérica al model Frenkel-Kontorova co $h = 0.05, d = 1, dt = 0.05, c = 0.6, \lambda = 1, Tf = 24, T = 0.6180$ y $\beta = 0.5$ a) para $t = 9.697$ , b) para $t = 19.3939$	on = 52
Figura XII.2. Diagrama de la solución numérica al model FK con $h = 0.05, d = 1$ $dt = 0.05, c = 0.6, \lambda = 1$ y $Tf = 24$ , a) para $t = 4.0404$ , b) para $t = 19.798$	1, 57

## Lista de tablas

Tabla 7.1.	Coefficientes	de fricción	aproximado	s	 
Tabla 9.1.	Generación	de letras de	la sucesión	Fibonacci.	 

## Abreviaturas y simbología

FK:	Frenkel-Kontorova.
SG:	Seno-Gordon.
$a_c$ :	Distancia entre partículas en estado relajado.
$a_b$ :	Periodo del potencial de sustrato.
AFM:	Microscopio de fuerza atómica.
SFA:	Equipo de fuerza superficial.
QCM:	Microbalanza de cristal de cuarzo.
1D:	Unidimensional.
K:	Constante elástica.
$U_0$ :	Amplitud del potencial periódico.
p:	Momento lineal.
$\mu_s$ :	Coeficiente de fricción estática.
$\mu_k$ :	Coeficiente de fricción cinética.
$\vec{f}_k$ :	Fuerza de fricción cinética.
$\vec{n}$ :	Fuerza normal.
$N_L$ :	Cantidad de potenciales base largos. Cantidad de letras ${\cal L}$ en la secuencia Fibonacci.
$N_S$ :	Cantidad de potenciales base cortos. Cantidad de letras ${\cal S}$ en la secuencia Fibonacci.
n:	Número de secuencia.
L:	Es el periodo espacial del potencial largo.
S:	Es el periodo espacial del potencial corto.
$L_i$ :	Causiperiodo de potencial largo.
$S_i$ :	Cuasiperiodo de potencial corto.
$\tau_g$ :	Inverso multiplicativo de la proporción áurea.
h:	Ancho de paso de la variable x.
k:	Ancho de paso de la variable t.
v:	Rapidez de propagación de la onda.

# Índice general

Ι.	Introducción				
II.	Planteamiento del problema 12				
III.	Hipótesis				
IV.	7. Justificación				
v.	Objetivos				
	v.1. General				
	v.2. Específicos				
VI.	Antecedentes				
	VI.1. Estado del arte				
	VI.2. Trabajos previos				
VII.	Marco Teórico				
	VII.1. Cristales				
	VII.2. Cuasicristales				
	VII.3. Fricción				
	VII.4. Teoría de Hamilton				
	VII.5. Díferencias Finitas				
VIII	. Metodología				
IX.	x. Modelo de Estudio				
	IX.1. Secuencias de sustitución 1D				
х.	Desarrollo y Resultados				
	x.1. Solución Numérica al modelo Frenkel-Kontorova con potencial aperiódico 40				
XI.	Conclusiones				
XII.	II. Apéndice				
	XII.1. Solución Numérica al modelo Frenkel-Kontorova con potencial periódico 52				
	XII.2. Modelo Frenkel Kontorova con potencial aperiódico				
	XII.3. Ecuación de sine-Gordon aperiódico				
	XII.4. Solución analítica a la ecuación clásica sine-Gordon				
	XII.5. Solución a la ecuación Sine-Gordon aperiódico				
	XII.6. Código para la solución numérica de la ecuación SG con potencial aperiódico . 6				
XIII	III. Bibliografía				

#### I. Introducción

Hoy en día, es esencial comprender las propiedades físicas de ciertos materiales con aplicaciones tecnológicas, y el estudio de la fricción y los modelos que la describen son de gran interés para tribología, como por ejemplo los cuasicristales, que están adquiriendo una creciente importancia debido a sus propiedades únicas como por ejemplo el bajo coeficiente de fricción. Estos materiales son estructuras que se encuentran comúnmente en aleaciones de metales como cobalto, hierro y níquel. A diferencia de los elementos que los componen, los cuasicristales son malos conductores de electricidad, carecen de propiedades magnéticas notables y muestran una mayor elasticidad en comparación con los metales convencionales a altas temperaturas.

Este trabajo se centra en estudiar la interacción entre una cadena de átomos y un sustrato de tipo cuasicristal aperiódico. Una vez que se ha propuesto el potencial específico para sustratos aperiódicos, se construye el hamiltoniano del sistema que posteriormente se resuelve numéricamente.

#### II. Planteamiento del problema

¿Cómo se ve reflejada la dependencia de la aperiodicidad de cuasicristales Fibonacci en el fenómeno de la fricción?

#### III. Hipótesis

Mediante un análisis numérico se podrá identificar la dependencia de las características aperiódicas de los cuasicristales Fibonacci en cuanto al fenómeno de la fricción.

#### IV. Justificación

Con frecuencia es necesario conocer las características de los materiales, para aprovecharlas en el ámbito tecnológico. Una de ellas es la fricción, debido a la importancia que tiene en los sistemas mecánicos.

#### v. Objetivos

#### v.1. General

Estudiar la dependencia de la aperiodicidad de cuasicristales a partir del modelo de Frenkel-Kontorova.

#### v.2. Específicos

- 1. Revisar bibliografía
- 2. Estudiar el modelo de Frenkel-Kontorova
- 3. Implementar el potencial aperiódico
- 4. Plantear el modelo con un Hamiltoniano
- 5. Implementar de forma numérica el modelo
- 6. Escritura de Tesis
- 7. Entrega y defensa de Tesis

#### vi. Antecedentes

A continuación se mencionan algunos trabajos previos que se han dado, relacionado con el modelo de Frenkel-Kontorova así como también lo relacionado con los cuasicristales.

#### vi.1. Estado del arte

N. Manini *et al*, en el 2016, explican que el tema multidisciplinario de la fricción microscópica para estudiar el proceso de convertir la energía mecánica de manera irreversible en calor, todavía carece de una comprensión fundamental y requiere cada vez más experimentos bien diseñados y simulaciones realizadas en interfaces caracterizadas. La utilización de un microscopio de fuerza atómica (AFM), un aparato de fuerza de superficie (SFA) y un microbalance de quartzo-cristal (QCM) aún brinda datos tribológicos promediados. Las cantidades físicas macroscópicas, como la fricción estática y cinética promedio, la velocidad media y los tiempos de deslizamiento, no permiten abordar fácilmente el problema de relacionar la respuesta de fricción mesoscópica de un sistema accionado con la dinámica microscópica detallada y los reordenamientos estructurales que ocurren en el espacio interfase confinado bajo fuerzas cortantes [8].

Titus Sebastiaan van Erp, en 1999, explica el modelo de Frenkel Kontorova, luego presenta las ecuaciones que describen los potenciales de sustrato de tipo cuasipieriódicos, sentando las bases para la realización de este trabajo [3].

Shivani Sickotra explora las diversas soluciones unidimensionales (1D) de la ecuación Seno de Gordon (SG). Primero se investigan los solitones de torcedura topológica y sus propiedades para el modelo SG, así como el modelo  $\phi$ . También analiza la ecuación de Bogomol'nyi y la importancia de la invariancia de Lorentz. Luego, las soluciones multi-kink de SG, que se encuentran mediante un método de separación de variables. Después explora el modelo de Frenkel-Kontorova, que conduce al modelo discreto de Sine-Gordon y la introducción de breathers discretos [14].

Yalin Dong et al describen la aplicación de los modelos de Prandtl-Tomlinson y sus extensiones para interpretar la fricción seca a escala atómica. Su objetivo es proporcionar una descripción práctica de cómo utilizar estos modelos para estudiar fenómenos de fricción. Comienzan con las ecuaciones fundamentales y las desarrollan paso a paso, desde el modelo cuasiestático simple a partir de una sola masa con un sólo resorte, y predice transiciones entre regímenes de fricción en modelos bidimensionales y multiátomos. La intención es cerrar la brecha entre el análisis teórico, la implementación numérica y los fenómenos físicos previstos [15].

Francis Armando Segovia Chaves estudió dos soluciones que tiene la ecuación SG, como lo son las soluciones tipo solitón kink y soluciones tipo solitón antikink. Presentó la solución analítica de la ecuación SG y presentó gráficamente su evolución espacio temporal [16].

#### vi.2. Trabajos previos

#### El modelo de Frenkel Kontorova

El modelo de Frenkel-Kontorova (FK) estándar consta de una cadena 1D de N partículas clásicas (átomos), que interactúan a través de fuerzas armónicas y se mueven en un potencial sinusoidal, como se muestra en la Fig. 1. El hamiltoniano es

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} K \left( x_{i+1} - x_i - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} U_0 \cos \frac{2\pi x_i}{a_b} \right]$$
(1)

En la Ec. 1, el término  $p_i^2/2m$  representa la energía cinética de las partículas, y el siguiente término describe la energía potencial elástica entre la iésima partícula y vecina próxima, donde K es la constante elástica, y  $a_c$  es la distancia de equilibrio. El término final describe la ondulación física del sustrato, es decir, es el potencial periódico de amplitud  $U_0$  y período  $a_b$ , que experimentan todas las partículas por igual. Para modelar la fricción estática, todos los átomos son impulsados por una fuerza externa F, que aumenta adiabáticamente hasta que comienza el deslizamiento [8].



**Fig. 1.** Un boceto del modelo FK, que muestra las dos longitudes en competencia: el espaciado promedio entre partículas y la periodicidad de la red del sustrato. *Manini* N. et al, (2016). Friction and Nonlinear Dynamics. [Fig. 1]

Podemos sustituir el segundo término de la Ec. 1 por el **potencial de sitio/sustrato**, quedando de la siguiente forma

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} K \left( x_{i+1} - x_i - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} K \left( x_i - x_{i-1} - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} U_0 \cos \frac{2\pi x_i}{a_b} \right]$$
(2)

Se aplican las ecuaciones de movimiento que describen la dinámica de la partícula i-esima al hamiltoniano de red cristalina SG 1D, Ec. 2.

$$\dot{x_i} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} \tag{3}$$

$$\dot{p_i} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}$$

$$\dot{p_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} K \left( x_{i+1} - x_i - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} K \left( x_i - x_{i-1} - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} U_0 \cos \frac{2\pi x_i}{a_b} \right]$$

$$= - \left[ K \left( x_{i+1} - x_i - a_c \right) (-1) + K \left( x_i - x_{i-1} - a_c \right) (+1) + \frac{\pi}{a_b} U_0 \sin \frac{2\pi x_i}{a_b} \right]$$

$$\dot{p_i} = K \left( x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1} \right) - \frac{\pi}{a_b} U_0 \sin \frac{2\pi x_i}{a_b}$$
(4)

Al derivar la Ec. 3

$$\ddot{x_i} = \frac{\dot{p_i}}{m} \tag{5}$$

Al evaluar la Ec. 5 para  $\dot{p}_i$ , e igualarla con la Ec. 4, obtenemos la **Ecuación Seno de** Gordon en su forma discreta Ec. 6.

$$m\ddot{x}_{i} - K\left(x_{i-1} - 2x_{i} + x_{i+1}\right) + \frac{\pi}{a_{b}}U_{0}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_{i}}{a_{b}} = 0$$
(6)

La ecuación Seno de Gordon en su forma discreta (Ec. 6) la podemos encontrar en diversos campos de estudio de la física tales como óptica no lineal, física de estado sólido, superconductividad entre otros.

#### Solución analitica y numérica a la Ecuación Seno de Gordon

Existe una versión continua de la Ec. 6, y se presenta a continuación (su deducción no se presenta en éste trabajo pero es muy conocida en la literatura).

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \operatorname{sen} u = 0 \tag{7}$$

donde d, en ausencia del potencial, es decir, del tercer término de la Ec. 6, representa la velocidad de propagación de la onda.

La Ec. 6a anterior puede resolverse en forma numérica y analítica. La solución numérica puede consultarse en el apéndice XII.1, y la solución analítica es la siguiente, (su deducción de igual manera no se presenta en éste trabajo pero muy conocida en la literatura).

$$u(x,t) = 4 \arctan\left[\exp\left(\pm\frac{x-vt-x_0}{\sqrt{1-v^2}}\right)\right]$$
(8)

#### vii. Marco Teórico

#### vII.1. Cristales

La materia existe en tres estados diferentes; los hay en estado gaseoso, líquido y sólido. En los estados gaseoso y líquido, los átomos o moléculas de la sustancia se mueven de un lugar a otro y no hay una posición fija de los átomos en la sustancia. En los sólidos, las posiciones de los átomos o moléculas son fijas y pueden o no estar presentes periódicamente a intervalos regulares de distancia. Si los átomos o moléculas en un sólido son periódicos a intervalos regulares de distancias en el espacio tridimensional, entonces ese sólido se conoce como sólido cristalino. Si los átomos o moléculas no tienen tal periodicidad en un sólido, entonces ese sólido se conoce como sólido amorfo. Cuando la periodicidad de los átomos o moléculas se extiende por todo el sólido, el sólido se conoce como sólido monocristalino. Si la periodicidad de los átomos o moléculas se extiende hasta pequeñas regiones llamadas cristalitos y si estos son muy grandes en número y de diferentes tamaños en el sólido, dicho material se conoce como sólido policristalino [2].

#### Distinción entre sólidos cristalinos y amorfos Sólidos cristalinos

- 1. Los átomos o moléculas de los sólidos cristalinos son periódicos en el espacio.
- 2. Los sólidos cristalinos tienen puntos de fusión altos.
- 3. Se observan rupturas en la curva de enfriamiento de un sólido cristalino.
- 4. Un cristal se rompe a lo largo de ciertos planos cristalográficos.

#### Sólidos Amorfos

1. Los átomos o moléculas de los sólidos amorfos no son periódicos en el espacio.

2. Los sólidos amorfos son isotrópicos, es decir, la magnitud de las propiedades físicas es la misma en todas las direcciones del sólido.

- 3. Los sólidos amorfos no poseen puntos de fusión altos.
- 4. No se observan roturas en la curva de enfriamiento.

5. Cuando se rompe un sólido amorfo, la superficie rota es irregular porque no tiene planos cristalinos.

Las fuerzas de enlace interatómico determinan la estructura interna de los cristales. Por ejemplo, en el caso de un empaque compacto en un metal, los átomos se repiten periódicamente en tres dimensiones. Una traslación de un átomo por una distancia interatómica lo superpone al siguiente átomo. En las estructuras iónicas y covalentes, la disposición atómica es más complicada y se repiten grupos de iones o moléculas, en lugar de átomos individuales. En el siglo XVIII se propuso una estructura cristalina interna regular, basada en algunas propiedades macroscópicas únicas de los cristales. El concepto de una estructura cristalina periódica se desarrolló a partir de las observaciones de las caras planas que se observan en los cristales de crecimiento libre, los ángulos característicos entre las caras y la escisión regular que se observa en muchos minerales. Sólo mucho más tarde, en el siglo XX, se determinó que esta estructura interna regular y periódica se debía a las fuerzas de enlace regulares entre los átomos. En 1669, Nicolas Steno descubrió que los ángulos entre las caras correspondientes de los cristales de cuarzo son siempre los mismos, independientemente del tamaño real de las caras. En ese momento la ciencia se movía a un ritmo lento. Más de 50 años después, en 1723, Michael A. Cappeller observó que cada especie mineral tiene un conjunto característico de ángulos interfaciales (estos ángulos se pueden medir con un transportador) y propuso una ley de ángulos interfaciales constantes para los minerales en general (Fig 7.1.1). Por ejemplo, un cristal de magnetita puede presentarse como un octaedro perfecto (Fig. 7.1.2a) o como un octaedro distorsionado (Fig. 7.1.2b,c). En cualquier caso, los ángulos entre las caras son idénticos. En 1773 Torbern Bergmann estudió la escisión regular de la calcita. Si se tritura un cristal de calcita, se rompe en pequeños fragmentos que toman la forma de pequeños romboedros. Si uno de estos pequeños romboedros se vuelve a triturar, forma un conjunto de romboedros aún más pequeños de escala microscópica. Se hicieron observaciones similares para la halita, excepto que los pequeños fragmentos no eran romboedros sino cubos. Bergmann supuso que estos pequeños fragmentos podrían ser los componentes básicos de los cristales. Unos años más tarde, en 1784, René J. Haüy ideó una ingeniosa teoría para explicar tanto la morfología del crecimiento como la división regular de los cristales. Propuso que todos los cristales se construyen a partir de paralelepípedos elementales (Fig. 7.1.3a), llenando el espacio sin huecos (un paralelepípedo es un poliedro que consta de tres pares de caras paralelas). Este modelo explica, por ejemplo, la morfología de un dodecaedro como caras que bordean pilas de paralelepípedos cúbicos (Fig. 7.1.3a) y nos recuerda mucho el concepto de Haüy de una imagen SEM moderna del patrón de crecimiento en una aleación de europio-telurio. (Fig. 7.1.3b). Haüy afirmó que todas las caras externas del cristal son planos que bordean la pila de paralelepípedos cúbicos. Este concepto siguió siendo una hipótesis durante más de 100 años, pero hoy sabemos que es básicamente correcto. Los paralelepípedos son unidades idealizadas en la estructura cristalina que llamamos celdas unitarias. Cada celda puede contener un solo átomo (Fig. 7.1.4a), o un grupo de diferentes átomos e iones (Fig 7.1.4b). El cristal macroscópico es entonces un conjunto de celdas elementales, repitiéndose periódicamente en tres dimensiones.



Fig. 7.1.1 Cristales con distinta morfología pero iguales ángulos (de Cappeller, 1723), entre ellos cuarzo y calcita. Wenk H. R., A. Bulakh. (2006). Minerals Their Constitution and Origin [Fig 3.1].



Fig. 7.1.2 Octaedros regulares a) y distorsionados b), c). Todas las caras correspondientes son paralelas, pero sus tamaños varían. Wenk H. R., A. Bulakh. (2006). Minerals Their Constitution and Origin [Fig 3.2].

Para comprender mejor el arreglo de paralelepípedos, es útil abstraer cada celda y su contenido mediante puntos. Luego, el cristal se puede idealizar mediante un arreglo periódico tridimensional de puntos (Fig. 7.1.4c). La ley de los ángulos interfaciales ahora se vuelve obvia: las caras de los cristales son planos discretos que contienen puntos de esta matriz, y los bordes de los cristales son líneas de puntos. Por lo tanto, los ángulos están determinados por la geometría de la matriz y no son arbitrarios. Ludwig August Seeber, en 1824, introdujo el término red para este arreglo regular de puntos. Una red es periódica en tres dimensiones y tiene la propiedad de que el entorno de cada punto es idéntico y tiene la misma orientación. Si pudiera ubicarse en un punto de red y observar todos los puntos vecinos, la perspectiva sería la misma sin importar el punto que elija. En la Fig. 7.1.2 se muestran tres ejemplos de celdas unitarias forma de paralelepido formado por ocho puntos de red.



Fig. 7.1.3 a) La noción de Haüy (1801) de que los cristales como la halita cúbica (NaCl) están formados por paralelepípedos elementales. En esta imagen original, los paralelepípedos son celdas cúbicas que pueden producir un dodecaedro macroscópico. b) Una imagen de microscopio electrónico de barrido moderno del crecimiento en una aleación de europio-teluro ilustra el concepto de Haüy, aunque el patrón de crecimiento es menos regular que en la figura idealizada de Haüy (cortesía de R. Wessicken). El ancho de la imagen es de 0.15 mm. Wenk H. R., A. Bulakh. (2006). Minerals Their Constitution and Origin [Fig 3.3].



Fig. 7.1.4 a) Un cristal cúbico con átomos que se repiten, b) con grupos que se repiten de diferentes átomos, y c) con una estructura periódica idealizada que representa el cristal mediante una matriz simple de puntos. Wenk H. R., A. Bulakh. (2006). Minerals Their Constitution and Origin [Fig 3.4].

Para describir completamente la estructura interna de un cristal, se necesitan dos datos. Primero, se debe caracterizar la geometría de la celda unitaria y por lo tanto de la red. En segundo lugar, se debe identificar el contenido de la celda unitaria, es decir, el tipo y la posición de los átomos o iones. La disposición atómica en la celda unitaria se denomina estructura cristalina. El cristal macroscópico se obtiene luego mediante una repetición periódica de la celda unitaria a través de la traslación [7].

#### vII.2. Cuasicristales

Se sabía antes del descubrimiento de los cuasicristales que existían dos tipos básicos de materiales, los amorfos, y los cristales, y éstos últimos presentan un ordenamiento periódico en sus partículas. Mediante la difracción de rayos X, los materiales amorfos presentan imagenes de círculos difusos y concentricos, pero los cristales presentan puntos de difracción, pero de una manera peridódica. Sin embargo, unos experimentos mostraron, que tenían puntos de difracción como en los cristales, pero no tenían un ordenamiento periódico, presentaban pentágonos, entonces se trataba de un material hasta ese momento desconocido. Conforme fueron avanzando las investigaciones se fue determinando lo que hoy se conoce como cuasicritales.

El 5 de noviembre de 1984 una publicación titulada Metallic phase with long-range orientation order and no translational symmetry de la revista Physical Review Letters, por D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias y J.W. Cahn, anunció el descubrimiento de los cuasicristales. Pero tres días antes, D. Levine y PJ Steinhardt enviaron un artículo a la misma revista con el título Quasicrystals: a new class of ordered structures que ofrecía el modelo estructural de un cristal con red cuasiperiódica, o cuasicristal, para las nuevas aleaciones. Esto significa que, a pesar de que los cuasicristales sorprendieron a los científicos de de materiales en aquella época, muchos de ellos ya habían desarrollado diversas ideas relacionadas con los cuasicristales, después del descubrimiento de los mismos. Todo esto fue de gran ayuda para familiarizarse con nuevas perspectivas, ideas y técnicas relacionadas a estos temas, provocadas por el descubrimento de alieaciones no cristalográficas, es decir, con simetrías de puntos de tipo icosaédrica, dodecagonal, decagonal y octogonal [6].

#### vII.3. Fricción

#### Fuerzas de fricción

En base a la experiencia se puede notar que cuando dos cuerpos interactúan por contacto directo de sus superficies, ésto es, que se tocan, se describe la interacción en términos de *fuerzas de contacto*. La fuerza normal es un ejemplo de una fuerza de contacto; en esta sección, veremos otra fuerza de contacto: la fuerza de fricción.

A la fricción se la puede encontrar en muchos aspectos de la vida cotidiana de gran importancia. Por ejemplo el aceite del motor de un automóvil reduce la fricción de los mecanismos, es decir entre piezas móviles, pero también, sin fricción entre los neumáticos y el asfalto, el automóvil no podría moverse de ninguna manera. El arrastre que provoca el aire, esto es, la fuerza de fricción ejercida por el aire sobre una superficie rugosa, de un cuerpo que se mueve a través de él, reduce el rendimiento del combustible en los automóviles, pero es importante para el funcionamiento de un paracaídas. Igualmente sin fricción, los clavos se desclavarían, las bombillas se desatornillarían sin esfuerzo y el hockey sobre hielo no padría darse.

#### Fricción cinética y estática

Si se intenta dar un empujón a una caja pesada, con el fin de deslizarla por el piso, ésta no se moverá hasta aplicar cierta cantidad de fuerza mínima. Después, si se incrementa la fuerza aplicada, la caja comienza a moverse, y casi siempre se puede mantener éste movimiento con una fuerza menor a la aplicada anteriormente al inicio. Si se sacan algunos algunos objetos de la caja con el fin de hacerla más ligera, se necesitará una cantidad de fuerza menor que antes para poner o mantener en movimiento de ésta.

Cuando un cuerpo descansa o se desliza sobre una superficie, se dice que qué ésta última ejerce una sola fuerza de contacto hacia arriba sobre el dicho cuerpo, y tiene como resultado, componentes de fuerza perpendiculares y paralelas a la superficie (Fig. 7.4.1). La componente vectorial perpendicular es la fuerza normal, la cual se denota como  $\vec{n}$ . La componente vectorial paralela a la superficie y perpendicular a  $\vec{n}$  es la **fuerza de fricción**, y se denota como  $\vec{f}$ . Si se tratase de una superficie sin fricción, se dice que  $\vec{f}$  es cero, aunque sigue habiendo una fuerza normal aún. Para la fricción de rozamiento, la fuerza de fricción siempre es opuesta al movimiento relativo de las dos superficies.



Fig. 7.4.1 Cuando se empuja el bloque o se tira de él sobre una superficie, esta última ejerce una fuerza de contacto sobre el bloque. Las fuerzas de fricción y normal son realmente componentes de una sola fuerza de contacto.

El tipo de fricción que actúa cuando un cuerpo se desliza sobre una superficie es la fuerza de rozamiento, la cuál llamamos **fuerza de fricción cinética**  $\vec{f_k}$ . El adjetivo cinética y el subíndice k (por la inicial de la palabra kinetic, que es relativa a movimiento) se refiere a que las dos superficies en cuestión se dan en movimiento relativo, es decir se mueve una con respecto a la otra. A mayor la magnitud de la fuerza normal, mayor será la magnitud de la fuerza de fricción. Esta es la razón por la cual se requiere mayor fuerza para deslizar la caja sobre una superficie, no es lo mismo vacía, que llena de objetos. En los sistemas de frenos de los automóviles también se usa éste principio, cuando las zapatas aprietan con más fuerza contra los discos giratorios, aumenta el efecto de frenado.

La magnitud de la fuerza de fricción cinética  $f_k$ , la cual se determina en forma experimental, es proporcional a la magnitud n de la fuerza normal. La relación se representa matemáticamente de la siguiente manera:

$$\vec{f}_k = \mu_k \vec{n} \tag{9}$$

donde  $\mu_k$  (la letra griega mu, subíndice k) es una constante llamada coeficiente de fricción cinética.

Mientras más resbalosa sea la superficie, menor magnitud tendrá  $\mu_k$ .  $\mu_k$  es un número adimensional, ya que es el cociente de dos cantidades, con las mismas unidades, que en éste caso son de fuerza. Las fuerzas de fricción y normal siempre son perpendiculares. La Ec. 9 no es una ecuación vectorial debido a que  $\vec{f_k}$  y  $\vec{n}$  siempre son perpendiculares, más bien, es una relación escalar entre las magnitudes de dos fuerzas.

La Ec. 9 solo es una representación aproximada de un fenómeno complejo. Las fuer-

zas de fricción se deben a fuerzas intermoleculares, (fundamentalmente eléctricas) a nivel microscópico entre dos superficies rugosas en los puntos donde entran en contacto (Fig. 7.4.2). A nivel molecular, cuando se desliza un objeto sobre una superficie, se forman y rompen enlaces entre ambas superficies, dando como consecuencia que el número total de enlaces varíe, y ésto, a su vez, trae como conscuencia que la fuerza de fricción cinética no sea perfectamente constante. Si se pulen las superficies, realmente aumentaría la fricción, pues más moléculas podrían interactuar y enlazarse, así que juntar dos superficies lisas del mismo metal produciría una soldadura fría. Los aceites lubricantes funcionan precisamente porque una película de aceite entre superficies (como por ejemplo entre pistones y paredes de cilindros de un motor) evita que entren realmente en contacto.



Fig. 7.4.2 Las fuerzas normal y de fricción surgen de interacciones entre moléculas en los puntos elevados de las superficies del bloque y del piso. A nivel microscópico, inclusive las superficies lisas son ásperas y tienden a engancharse.

La tabla 7.1 presenta algunos valores representativos de  $\mu_k$ . Aunque están dados en dos cifras significativas, son valores aproximados, ya que las fuerzas de fricción también dependen de la rapidez del cuerpo relativa a la superficie. Por ahora se supondrá que  $\mu_k$  y  $f_k$  son independientes de la rapidez. La tabla 7.1 también muestra coeficientes de fricción estática, la cuál se explica a continuación.

Materiales	Coeficiente de	Coeficiente de	
	fricción estática $(\mu_s)$	fricción cinética $(\mu_k)$	
Acero sobre acero	0.74	0	
Aluminio sobre acero	0.61	0.47	
Cobre sobre acero	0.53	0.36	
Latón sobre acero	0.51	0.44	
Zinc sobre hierro colado	0.85	0.21	
Cobre sobre hierro colado	1.05	0.29	
Vidrio sobre vidrio	0.94	0.40	
Cobre sobre vidrio	0.68	0.53	
Teflón sobre teflón	0.04	0.04	
Teflón sobre acero	0.04	0.04	
Hule sobre concreto (seco)	1.0	0.8	
Hule en concreto (húmedo)	0.30	0.25	

Tabla 7.1 Coeficientes de fricción aproximados.

A diferencia de las fuerzas de fricción cinética, las fuerzas de fricción estática también pueden actuar cuando no hay movimiento relativo. Por ejemplo, al tratar, de deslizar por el piso una caja, es probable que la caja no se mueva porque el piso ejerce una fuerza de fricción igual y opuesta sobre la caja. Esta fuerza se llama **fuerza de fricción estática**  $\vec{f_k}$ . En el caso de la Fig 7.4.3a, la caja está totalmente en reposo, en equilibrio, solamente bajo la acción de su peso  $\vec{w}$  y la fuerza normal hacia arriba  $\vec{n}$ . La fuerza normal iguala a la peso en magnitud (n=w) y ésta es ejercida por el piso sobre la caja. Luego, si se ata una cuerda a la caja (Fig. 7.4.3b), y gradualmente se aumenta la tensión Ten la cuerda. En un principio, la caja no se mueve debido a que, al aumentar T, la fuerza de fricción estática  $\vec{f_s}$  también aumenta, pero su magnitud se mantiene igual a T.

Si, al seguir aumentando la tensión en la cuerda, T se vuelve mayor que la fuerza de fricción estática  $f_s$  máxima que la superficie puede ejercer, la tensión T puede provocar el rompimiento de las interacciones intermoleculares entre las superficies de la caja y el piso, provocando que la caja comience a deslizarse. La Fig. 7.4.3c muestra las fuerzas cuando T tiene este valor crítico. Cuando T excede éste valor crítico, la caja ya no esta en equilibrio. Para un cierto par de superficies, el valor máximo de  $f_s$  depende de la fuerza normal. En diversos experimentos se ha revelado que, existen muchos casos, en que ese valor máximo, llamado  $(f_s)_{max}$ , es aproximadamente proporcional a n, y al factor de proporcionalidad  $\mu_s$  se lo llama coeficiente de fricción estática. En la tabla 7.1 se dan valores representativos de  $\mu_s$ . Para cierta situación específica, la fuerza de fricción estática real puede tener cualquier magnitud entre cero (cuando no hay otra fuerza paralela a la superficie) y un valor máximo dado por  $\mu_s n$ . Esto se puede expresar de la siguiente manera:

$$f_s \le \mu_s n \tag{10}$$



Fig. 7.4.3 a), b), c) Si no hay movimiento relativo, la magnitud de la fuerza de fricción estática  $f_s$  es igual o menor que  $\mu_s n$ . d) Si hay movimiento relativo, la magnitud de la fuerza de fricción cinética  $f_k$  es igual a  $\mu_k n$ . e) Gráfica de la magnitud de la fuerza de fricción f en función de la magnitud de T de la fuerza aplicada. La fuerza de fricción cinética varía un poco conforme se forman y se rompen los enlaces intermoleculares.

Estea es una relación entre magnitudes, así como en la Ec. 9. La desigualdad llega a convertirse en igualdad sólo cuando la fuerza aplicada T alcanza el valor crítico justo en el instante en que el movimiento está a punto de dar inicio (Fig. 7.4.3c). Esto es, cuando T es menor que dicho valor (Fig. 7.4.3b), desigualdad se cumple, y debemos usar las condiciones de equilibrio  $\Sigma \vec{F} = 0$  para obtener  $f_s$ . Si no se aplica fuerza (T = 0), como en la Fig. 7.4.3a, tampoco hay fuerza de fricción estática  $(f_s = 0)$ .

En el momento en que da inicio el deslizamiento de la caja sobre la superficie (Fig. 7.4.3d), suele disminuir la la fuerza de fricción (Fig. 7.4.3e), esto es, que es más fácil mantener la caja en movimiento que ponerla en movimiento. De esta manera, el coeficiente de fricción cinética suele ser menor que el de fricción estática para un par de superficies dado, tal como lo muestra la tabla 7.1.

En algunas situaciones, las superficies se atoran (fricción estática) y se deslizan (fricción cinética) de manera alternada. Esto precisamente es lo que da lugar al rechinido del gis, cuando se aplica con un ángulo inadecuado sobre un pizarrón, o de los neumáticos que se derrapan en el asfalto. De hecho el ejemplo más concluyente es el movimiento de un arco de violín contra una cuerda, que da lugar al sonido. Cuando determinado un cuerpo se desliza sobre una capa de gas, la fricción puede reducirse considerablemente. En el riel con aire que se usa en los laboratorios de física, los deslizadores se apoyan en una capa de aire. La fuerza de fricción depende de la velocidad, sin embargo, a rapideces comunes, el coeficiente de fricción efectivo es del orden de 0.001 [4].

#### vII.4. Teoría de Hamilton

En la teoría de Hamilton, las coordenadas generalizadas y los momentos correspondientes son variables independientes. En esta teoría, las coordenadas de posición y las coordenadas de momento coexisten en el mismo espacio fase. La teoría hamiltoniana conduce a una comprensión esencial de la estructura formal de la mecánica y es de importancia básica para la transición de la mecánica clásica a la mecánica cuántica. Para construir el hamiltoniano  $H(q_i, p_i, t)$  a partir del lagrangiano  $L(q_i, \dot{q}_i, t)$  se utiliza los momentos generalizados, que están dados por

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

Se busca una transformación

$$L(q_i, \dot{q}_i, t) \Rightarrow H(q_i, \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, t) \cong H(q_i, p_i, t)$$
 (11)

El hamiltoniano H se contruye al realizar una transformación de Legendre al lagrangiano en la cual se formula la Ec. 10. En seguida se explica la tranformación de Legendre para un ejemplo sencillo bidimensional. Pasamos de la función f(x, y) a la función  $g(x, u) = g(x, \partial f / \partial x)$ :

$$f(x,y) \Rightarrow g(x,u)$$
 con  $u = \frac{\partial f}{\partial y}$ 

donde g(x, u) esta definida por

$$g(x,u) = uy - f(x,y)$$

Al formar el diferencial total, nos damos cuenta de que la función g formada de esta manera ya no contiene y como variable independiente:

$$dg = ydu + udy - df = ydu + udy - \frac{\partial f}{\partial x}dx - \frac{\partial f}{\partial y}dy$$
$$= ydu - \frac{\partial f}{\partial x}dx$$

donde ahora

$$y = \frac{\partial g}{\partial u}$$
 y  $\frac{\partial g}{\partial x} = -\frac{\partial f}{\partial x}$ 

De acuerdo con esta breve inserción, ahora construimos el hamiltoniano a partir del lagrangiano. Escribimos para el hamiltoniano.

$$H(p_i, q_i, t) = \sum_{i} p_i \dot{q}_i - L(q_i, \dot{q}_i, t)$$
(12)

Buscamos aquellas ecuaciones de movimiento que sean equivalentes a las ecuaciones de Lagrange basadas en el lagrangiano L. Para ello formamos la diferencial total:

$$dH = \sum p_i d\dot{q}_i + \sum \dot{q}_i dp_i - dL \tag{13}$$

El diferencial total del Lagrangiano lee

$$dL = \sum \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$
(14)

Ahora utilizamos la definición del momento generalizado  $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ , y la ecuación de Lagrange en la forma

$$\frac{d}{dt}p_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

Insertando ambos en la Ec. 12 se obtiene

$$dL = \sum \dot{p}_i dq_i + \sum p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Al insertar dL en la Ec. 11, se sigue que

$$dH = \sum p_i d\dot{q}_i + \sum \dot{q}_i dp_i - \sum \dot{p}_i dq_i - \sum p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Dado que el primer y cuarto término se cancelan mutuamente, queda

$$dH = \sum_{i} \dot{q}_{i} dp_{i} - \sum_{i} \dot{p}_{i} dq_{i} - \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

Por tanto, H depende sólo de  $p_i$ ,  $q_i$ , y t por tanto,  $H = H(p_i, q_i, t)$  y tenemos

$$dH = \sum \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt$$

De aquí se siguen inmediatamente las ecuaciones de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \qquad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \qquad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$$
 (15)

Ahora son las ecuaciones fundamentales de movimiento en esta formulación de la mecánica. El hamiltoniano H aquí juega el papel central, similar al lagrangiano L en la formulación de la mecánica de Lagrange. Este hamiltoniano H se construye de acuerdo con la Ec. 12; pero con la prescripción de que todas las velocidades  $\dot{q}_i$ , se expresan por los momentos generalizados  $p_i$ , y las coordenadas generalizadas  $q_i$  a través de la Ec. 11. En otras palabras, la Ec. 11 para la definición de los momentos generalizados.

Haciendo un breve parétesis, el hamiltoniano se obtiene del lagrangiano a partir

de la transformada de Legendre (Ec. 12) El primer término pued pensarse como un emparejamiento de un elemento de su espacio tangente con su dual. En efecto, si Ptiene coordenadas  $(q_1, ..., q_n)$ , then  $\dot{q}\dot{q}^i\partial_i \in T_P(N)$  y si se empareja con el vector dual  $p_j dx^j \in T *_P(N)$  se obtiene el primer término en la definición de hamiltoniano. El efecto de la transormada de Legendre es reemplazar  $\dot{q}^i$  por  $p_i$  como segundo conjunto de variables independientes [21].

$$p_i = \frac{\partial L(q_i, \dot{q}_i, t)}{\partial \dot{q}_i}$$

Se resuelven para las velocidades generalizadas  $\dot{q}_i$ , por lo que

$$\dot{q}_i = \dot{q}_i(q_i, p_i)$$

Los  $\dot{q}_i$  así obtenidos se insertan en la definición de H (ver la Ec. 12), de modo que el hamiltoniano H finalmente depende sólo de  $q_i$ ,  $p_i$  y el tiempo t; por tanto,  $H = H(q_i, p_i, t)$ . A partir de esto, se establecen y resuelven las ecuaciones de Hamilton, Ec. 15. Los  $\dot{q}_i$  así obtenidos se insertan en la definición de H, de modo que el hamiltoniano H finalmente depende sólo de  $q_i$ ,  $p_i$  y el tiempo t; por tanto,  $H = H(q_i, p_i, t)$ .

Las ecuaciones de Lagrange proporcionan un conjunto de n ecuaciones diferenciales de segundo orden en el tiempo para las coordenadas de posición. El formalismo hamiltoniano produce 2n ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden para las coordenadas de momento y posición. En cualquier caso, existen 2n constantes de integración al resolver el sistema de ecuaciones. A partir de las Ec's. 13, se ve que para una coordenada que no entra en el hamiltoniano, el cambio correspondiente del impulso con el tiempo desaparece:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \Longrightarrow p_i = \text{constante}$$

Si el hamiltoniano (el lagrangiano) no depende explícitamente del tiempo, entonces H es una constante de movimiento ya que

$$\frac{dH}{dt} = \sum \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial H}{\partial t}, \qquad (16)$$

Y si usamos las ecuaciones de Hamilton (Ec. 15) en la Ec. 16 obenemos que:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Ahora está claro que con  $\partial H/\partial t = 0$  (ya que *H* no debe depender explícitamente del tiempo) se sigue que dH/dt = 0 y, por lo tanto, H = constante. En el caso especial de un sistema con restricciones holonómicas, escleoronómicas y fuerzas internas conservativas,

la interpretación física del hamiltoniano es que representa la energía del sistema. Para aclarar esto, primero consideramos la energía cinética:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{v} m_{v} \dot{r}_{v}^{2}, \qquad v = 1, 2, ..., N \qquad (N : \text{Número de partículas})$$

Si las restricciones son holonómicas y no dependientes del tiempo, existen ecuaciones de transformación  $r_v = r_v(q_i)$ , y por lo tanto,

$$\dot{r_i} = \sum_i \frac{\partial r_v}{\partial q_i} \dot{q}_i$$

La inserción en los rendimientos de energía cinética produce

$$T = \sum_{v} m_{v} \sum_{i,k} \left( \frac{\partial r_{v}}{\partial q_{i}} \dot{q}_{i} \right) \left( \frac{\partial r_{v}}{\partial q_{k}} \dot{q}_{k} \right)$$
$$= \sum_{i,k} \left( \frac{1}{2} \sum_{v} m_{v} \frac{\partial r_{v}}{\partial q_{i}} \frac{\partial r_{v}}{\partial q_{k}} \right) \dot{q}_{i} \dot{q}_{k} = \sum_{i,k} a_{i,k} \dot{q}_{i} \dot{q}_{k}$$

Así, la energía cinética es una *función cuadrática homogénea* de las velocidades generalizadas. Los *coeficientes de masa* resultantes

$$a_{ik} = \frac{1}{2} \sum_{v} m_v \frac{\partial \mathbf{r}_v}{\partial q_i} \frac{\partial \mathbf{r}_v}{\partial q_k}$$

son simétricos; es decir  $a_{ik} = a_{ki}$  Ahora podemos aplicar el teorema de Euler en funciones homogéneas. Si f es una función homogénea de rango n, es decir, si

$$f(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_k) = \lambda^n f(x_1, x_2, \dots, x_k)$$
(17)

luego también

$$\sum_{i=1}^{k} x_i \frac{\partial f}{x_i} = nf$$

Esto se puede demostrar formando la derivada de la Ec. 17 con respecto a $\lambda,$ así

$$\frac{\partial f}{\partial (\lambda x_1)} x_1 + \ldots + \frac{\partial f}{\partial (\lambda x_k)} x_k = n\lambda^{n-1} f$$

Al establecer  $\lambda = 1$ , se sigue la afirmación. El teorema de Euler, aplicado a la energía cinética (n = 2), significa

$$\sum \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = 2T \tag{18}$$

Dado que las fuerzas son conservativas, existe una función potencial que no depende

de las velocidades  $V(q_i)$ , de modo que

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = p_i$$

y por lo tanto,

$$H = \sum p_i \dot{q}_i - L = \sum p_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L$$

Usando la relación (14) y la definición del lagrangiano, vemos que

$$H = 2T - (T - V) = T + V = E$$

Así, bajo las condiciones dadas, el hamiltoniano representa la energía total. La energía T - V representada por el lagrangiano a veces se denomina energía libre. Cabe señalar que H no incluye un posible trabajo realizado por las reacciones de restricción. La formulación hamiltoniana de la mecánica surge de la teoría y las ecuaciones de Lagrange.

Es conocido que del lagrangiano podemos derivar la ecuación de Euler Lagrange la cual es equivalente a la ecuación de movimiento obtenida de la formulación de la mecánica de Newton. Por el otra parte, se pueden derivar fácilmente las ecuaciones de Newton a partir de las ecuaciones de Hamilton y así mostrar la equivalencia de ambas formulaciones. Es suficiente considerar una sola partícula en un campo de fuerza conservativo y usar las coordenadas cartesianas como coordenadas generalizadas. Luego

$$p_i = m\dot{x}_i,$$
  $H = \frac{1}{2}\sum_i \dot{x}_i^2 + V(x_i)$   $(i = 1, 2, 3),$ 

0

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i}\frac{p_i^2}{m} + V(q_i)$$

Esto conduce a las ecuaciones de Hamilton  $(q_i = x_i)$ :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m}$$
  $y$   $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial V}{\partial q_i}$ 

o en notación vectorial

$$\dot{\mathbf{p}} = -\nabla V$$

Estas son las ecuaciones de movimiento de Newton [1].

#### vII.5. Díferencias Finitas

Se tiene la función u(x,t), la cuál representa una solución a ecuación siguiente

$$d^{2}\frac{\partial^{2}u}{\partial x^{2}} = \frac{\partial u^{2}}{\partial t^{2}} + R(u)$$
(19)

Se utiliza las dos diferenciales centrales siguientes,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{h^2} \left[ u \left( x + h, t \right) - 2u \left( x, t \right) + u \left( x - h, t \right) \right]$$
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \approx \frac{1}{k^2} \left[ u \left( x, t + k \right) - 2u \left( x, t \right) + u \left( x, t - k \right) \right]$$

se sustituye en la Ec. 19 como

$$\frac{d^2}{h^2} \left[ u \left( x + h, t \right) - 2u \left( x, t \right) + u \left( x - h, t \right) \right]$$
$$= \frac{1}{k^2} \left[ u \left( x, t + k \right) - 2u \left( x, t \right) + u \left( x, t - k \right) \right] + R(u)$$
(20)

Al resolver la Ec. 20, se obtiene u(x, t + k), que es  $u_m^{n+1}$ . Si  $\lambda = dk/h$ , entonces la Ec. 20 se puede expresar como

$$u_m^{n+1} = \lambda^2 u_{m+1}^n + 2\left(1 - \lambda^2\right) u_m^n + \lambda^2 u_{m-1}^n - u_m^{n-1} + R(u_m^n)$$
(21)

para  $m = \pm 1, \pm 2, ..., \pm (M - 1)$  y n = 1, 2, ..., N - 1.

Para el caso en que la Ec. 19 sea un modelo para desplazamientos u(x,t) de una partícula vibrando, las condiciones en la frontera típicas son u(0,t) = 0, u(a,t) = 0, t > 0, y las condiciones iniciales son u(x,0) = f(x),  $\partial u/\partial t|_{t=0} = g(x)$ , 0 < x < a. Las funciones  $f \neq g$ , se pueden interpretar como la posición inicial y la velocidad inicial de la partícula. El método numérico basado en la Ec. 21, es un método explícito de Diferencias Finitas. Se usará la ecuación en diferencias para aproximar la solución u(x,t) de la Ec. 19, utilizando las condiciones de frontera e iniciales, sobre una región rectangular en el plano xt definido por las desigualdades  $0 \le x \le a$ ,  $0 \le x \le T$ , donde T es algún valor específico del tiempo. Si  $M \neq N$  son enteros positivos y

$$h = \frac{a}{N}$$
 y  $k = \frac{T}{M}$ ,

y se define que

$$x_m = mh$$
,  $m = \pm 0, \pm 1, \pm 2, ..., \pm M$  y  $t_n = nk$ ,  $n = 0, 1, 2, ..., N$ 

entonces la Ec. 21 permite obtener la aproximación  $u_{m,n+1}$  para el (n+1)-ésimo tiempo

a partir de los valores del n-ésimo y del (n-1)-ésimo tiempos. Además se puede usar

$$u_{0,n} = u(0, nk) = 0$$
  $u_{N,n} = u(a, nk) = 0$   $\leftarrow$  condiciones de frontera $u_{m,0} = u(x_m, 0) = f(x_m)$   $\leftarrow$  condición inicial

Pero la Ec. 21 demanda conocer los valores de  $u_{m,1}$ , para n = 1, y así determinar los valores de  $u_{m,2}$ . Pero con n = 0, se ve que los valores de  $u_{m,1}$  sobre los primeros valores del tiempo, dependen de los valores de  $u_{m,0}$ , sobre el tiempo cero y de los valores de  $u_{m,-1}$ . Para calcular éstos últimos valores, se utiliza la condición de la velocidad inicial  $u_t(x,0) = g(x)$ . En t = 0 se tiene que

$$g(x_m) = u_t(x_m, 0) \approx \frac{u(x_m, k) - u(x_m, -k)}{2k}$$
 (22)

Para que tenga sentido el término  $u(x_m, -k) = u_{m,-1}$  en la Ec. 22, tenemos que imaginar que u(x,t) se prolonga hacia atrás en el tiempo. De la Ec. 22 se tiene que

$$u(x_m, -k) \approx u(x_m, k) - 2kg(x_m) \tag{23}$$

La Ec. 23 sugiere que defina

$$u_m^{-1} = u_m^1 - 2kg(x_m) \tag{24}$$

en la iteración de la Ec. 21. Sustituyendo la Ec. 24 en la Ec. 21 cuando n = 0 obtenemos el caso especial [20].

$$u_m^1 = \frac{\lambda^2}{2} \left( u_{m+1}^0 + u_{m-1}^0 \right) + \left( 1 - \lambda^2 \right) u_m^0 + kg(x_m) + R(u_m^n)$$
(25)

#### viii. Metodología

Se propone una función para el potencial que describe al sustrato cuasiperiodico en el hamiltoniano del modelo de Frenkel Kontorova clásico. Después se aplican las ecuaciones de Hamilton y se obtiene un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales de segundo orden. Luego, se utiliza el método de Diferencias Finitas para resolver numéricamente la ecuación diferencial SG con potencial cuasipieriódico.

Se toma el caso límite  $N \to \infty$  en el sistema de ecuaciones diferenciales y se obtiene la ecuación Seno-Gordon (SG) con potencial cuasipieriodico.

#### IX. Modelo de Estudio

#### IX.1. Secuencias de sustitución 1D

Se sabe que un cristal es un arreglo periódico de un elemento base (celda unitaria) que se repite en toda la estructura. Un mosaico es un conjunto de motivos, a todo motivo períodico se le asocia una red, una celda unitaria y su decoración. Una red es una distribución de puntos en el espacio, la decoración es el contenido de la celda. A diferencia de los cristales, en los cuasicritales no existe una periodicidad (simetría traslacional) pero sí una simetría rotacional. Un objeto posee simetría rotacional si se mantiene invariante después de una rotación por cierto ángulo. Si a una figura hay que rotarla 72° y ésta queda en la misma forma que tenía originalmente, se dice que tiene simetría rotacional de 5 [9].

#### Secuencia Fibonacci

La secuencia de Fibonacci, una secuencia de sustitución cuasiperiódica 1D, se puede obtener mediante la aplicación iterativa de la regla de sustitución:  $L \rightarrow L S$ ,  $S \rightarrow L$  al alfabeto de dos letras L y S, las cuales para este estudio representan distancias largas y cortas respectivamente. La generación de las primeras palabras se muestra en la Tabla 9.1. Los números de letras L y S están representados por  $N_L$  y  $N_S$  respectivamente,  $N_L = F_{n+1}$ ,  $N_S = F_n$ .

Tabla 9.1. Generación de letras de la sucesión Fibonac
--

$ \mathbf{n} $	Sucesión	$N_L$	$N_S$
0	L	1	0
1	LS	1	1
2	LSL	2	1
3	LSLLS	3	2
4	LSLLSLSL	5	3
5	LSLLSLSLLSLLS	8	5
6	LSLLSLSLLSLSLSLSLSL	13	8
:	:	•	:
n		$F_{n+1}$	$F_n$

Los números arbitrarios de Fibonacci se pueden calcular directamente mediante la fórmula de Binet Ec. 26 [5].

$$F_n = \frac{(1+\sqrt{5})^n - (1-\sqrt{5})^n}{2^n\sqrt{5}}$$
(26)

El número  $\tau$ . Si un segmento de línea se divide en la proporción áurea, entonces esta sección áurea tiene la propiedad de que el subsegmento más grande está relacionado con el más pequeño como el segmento completo está relacionado con el subsegmento más

grande. Alternativamente, el símbolo  $\phi$  se usa con frecuencia.  $\tau$  se puede representar mediante la expansión de fracción continua más simple posible [5]

$$\tau = 1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}$$

#### Irracionales de Oro

En la teoría de números, todos los números irracionales pueden describirse mediante una secuencia de números racionales:  $\frac{p_0}{q_0}$ ,  $\frac{p_1}{q_1}$ ,  $\frac{p_2}{q_2}$ ,...,  $\frac{p_n}{q_n}$  en cada etapa, el número racional es una mejor aproximación que la última. Hay varios métodos para encontrar tal secuencia de mejores aproximaciones convergentes. Los dos métodos comúnmente utilizados son el método de fracción continua y el árbol de Farey. El método de la fracción continua presenta cada número irracional mediante una matriz de enteros, que define una fila convergente al número irracional real  $\tau$  como:

$$[n_1, n_2, \ldots] = \frac{1}{n_1 + \frac{1}{n_2 + \frac{1}{n_3 + \ldots}}} = \tau$$
(27)

Esta sucesión es fuertemente convergente si los números  $n_i$  son grandes. El irracional convergente más bajo es cuando la secuencia tiene  $n_i = 1$ .

$$\tau_g = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}}} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$$

Este número, que también es la solución de un polinomio de segundo grado:  $\tau^2 + \tau - 1 = 0$ , se le conoce como la proporción áurea, que es el más difícil de aproximar por racionales y por lo tanto se le considera el número más irracional. La  $n - \acute{esima}$  aproximación  $p_n/q_n$  está dada en este caso por los números de Fibonacci:  $F_n/F_{n+1}$ . Estos números de Fibonacci están definidos por  $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$  con  $F_1 = F_0 = 1$ 

#### El modelo de Frenkel Kontorova

Tal y como ya se explicó en la sección VI.2, el modelo F-K consta de una cadena 1D de N partículas o pequeñas masas, que interactúan a través de fuerzas elásticas, y que se mueven en un potencial sinusoidal, y su hamiltoniano es

$$H = T + U = \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} K \left( x_{i+1} - x_i - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} U_0 \cos \frac{2\pi x_i}{a_b} \right]$$
(28)

En la Ec. 28, el término  $p_i^2/2m$  representa la energía cinética de las partículas, y el siguiente término describe la interacción elástica entre dichas partículas, donde K es la constante elástica, y la distancia de separación entre los vecinos más cercanos en ausencia de fuerzas elásticas y potencial externo es  $a_c$ . El término coseno final describe

el potencial periódico de amplitud  $U_0$  y período  $a_b$ , tal como lo experimentan todas las partículas por igual.

También se vió que haciendo un cambio en el potencial de sitio y aplicando las ecuaciones de Hamilton se llega a la **Ecuación Seno de Gordon** Ec. 29.

$$m\ddot{x}_{i} - K\left(x_{i-1} - 2x_{i} + x_{i+1}\right) + \frac{\pi}{a_{b}}U_{0}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_{i}}{a_{b}} = 0$$
(29)

Una forma de modelar la fricción estática, es que todos los átomos son impulsados por una fuerza externa F, que aumenta adiabáticamente hasta que comienza el deslizamiento [8].

#### Potencial Cuasiperiódico 1D

Una secuencia periódica es el ordenamiento repetitivo de partículas (su periódo es el mismo en cada ciclo). Hay que recordar que una función es períodica si se satisface f(x + T) = f(x), donde T es el período.

En una dimensión, una función f con periódo b, f(x+b) = f(x), puede ser expandida en series de Fourier como:

$$f(x) = \sum_{n = -\infty}^{+\infty} a_n \exp\left(2\pi i \frac{nx}{b}\right)$$

Ahora para dos dimensiones, se considera la función periódica bidimensional  $\tilde{g}(x,y)$ con periódo  $b_1$  en direcciones x y y, a saber  $\tilde{g}(x + b_1, y) = \tilde{g}(x, y + b_1) = \tilde{g}(x, y)$ , y regresando a la función unidimensional g(x) mediante la definición de g(x) como la intersección de  $\tilde{g}(x,y)$  con la línea  $y = \frac{b_1}{b_2}x$ , donde  $b_2$  es sólo otra longitud.

$$\tilde{g}(x,y) = \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty} a_{nm} \exp\left(2\pi i \frac{nx+my}{b_1}\right)$$
$$g(x) = \tilde{g}(x, \frac{b_1}{b_2}x)$$
$$\Rightarrow \tilde{g}(x) = \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty} a_{nm} \exp\left(2\pi i \left(\frac{n}{b_1} + \frac{m}{b_2}\right)x\right)$$

Cuando  $b_1$  y  $b_2$  son conmensurables el uno al otro en la siguiente manera:  $c_1b_1 = c_2b_2$ con  $c_1, c_2 \in Z$ , la función g(x) es periódica con periódo  $c_1b_1$ . Cuando  $b_1$  y  $b_2$  son inconmensurables el uno al otro, se pierde la periodicidad y g(x) es llamado *Cuasiperiódico*. En general, toda función cuasiperiódica unidimensional, puede ser escrita como

$$g(x) = \sum_{n_1,...,n_N} \tilde{g}(n_1...n_N) \exp[2\pi i(n_1v_1 + ... + n_Nv_N)]$$

lo cual corresponde a la intersección de una línea con una función periódica N-

#### dimensional.

Hay varias opciones para ajustar un potencial cuasiperiódico en la cadena de Fibonacci. Una forma de hacer esto es colocar, en cada intervalo, un período de una función coseno, que se ajuste en el intervalo corto S, o largo L. Las partes del potencial corto  $(v_S)$  y largo  $(v_L)$  para los intervalos corto y largo están dadas por [3]

$$v_S(x) = \frac{K_S}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos\frac{2\pi x}{S} \right)$$

$$v_L(x) = \frac{K_L}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos\frac{2\pi x}{L} \right)$$
(30)

donde x es la distancia desde el extremo izquierdo del intervalo, L y S son los períodos largo y corto respectivamente. Ahora se puede obtener el potencial de una secuencia en particular v(x) uniendo las piezas de  $v_S$  y  $v_L$  de acuerdo con la secuencia de Fibonacci.

Todavía hay cierta libertad en la elección de la relación entre  $K_L$  y  $K_S$ . Se puede optar por aplicar profundidades iguales ( $K_S = K_L$ ), o la misma fuerza máxima  $-dV/dx(K_S = (S/L)K_L)$  o aplicar  $K_S = (S/L)^2 K_L$  para hacer que la segunda derivada sea continua. Aubry mencionó, sin embargo, que todas las derivadas del potencial deben ser continuas al menos hasta la tercera para tener estados no fijos.

La razón de los periódos de  $v_S$  y  $v_L$  (S y L), así como la razón del número de intervalos largos y cortos ( $N_S$  y  $N_L$ ) tienden a la proporción áurea, esto es

$$\frac{S}{L} = \tau_g \tag{31}$$
$$\lim_{n \to \infty} \frac{N_S}{N_L} = \lim_{n \to \infty} \frac{F_n}{F_{n+1}} = \tau_g$$

Se puede observar en la figura 9.1 que consta de un cuadrado grande y un cuadrado pequeño. Por lo tanto, podemos escribir para la longitud de un gran cuadrado medido a lo largo de x:

$$|1|^2 = |L|^2 + |S|^2 \Rightarrow$$
$$|L| = \frac{1}{\sqrt{1 + \tau_g^2}}$$

Para obtener la longitud física real tenemos que proyectar |L| en el eje x (eje horizontal en la figura):

$$L = |L| \cos \theta$$

siendo cos  $\theta = \frac{1}{\sqrt{1+\tau_g^2}}$  el ángulo entre  $x^{||}$  y  $\mathbf{e}_1$  en la Figura 9.1. Entonces, la longitud del intervalo largo y corto en el espacio real es:

$$L = \frac{1}{1 + \tau_g^2} = \frac{1}{2 - \tau_g} \tag{32}$$



**Figura 9.1** Representación bidimensional V(x, y) del potencial en una secuencia de Fibonacci. *Titus. (1999). Frenkel Kontorova model on quasiperiodic substrate potencials.* [Fig. 3.1]

#### x. Desarrollo y Resultados

En ésta sección se presenta la función potencial cuasiperiódico Fibonacci y en la figura 10.1 se muestra algunos ejemplos de V(x), en el que se observa claramente su naturaleza aperiódica. En la Tabla 9.1, se puede observar que dentro de la secuencia Fibonacci, la suma total de todos los términos  $N_S$ ,  $N_L$ , y además la suma total entre estas sumas, pertenecen a tal secuencia, entonces podemos expresar el potencial cuasiperiódico V(x) como la suma de dos potenciales,  $V_S(x)$ , y  $V_L(x)$ , con sus respectivos coeficientes,  $A_i$  y  $B_i$ , que contabilizan el número de potenciales elementales ( $v_S(x)$  y  $v_L(x)$ ), expresados en la Ec. 30. Para una *i*-ésima secuencia de la serie Fibonacci, se tienen una correspondiente función para  $V_S(x)$ , y  $V_L(x)$ .

$$V_S(x) = A_i \frac{K_S}{(2\pi)^2} \left(1 - \cos\frac{2\pi x}{S_i}\right)$$

$$V_L(x) = B_i \frac{K_L}{(2\pi)^2} \left(1 - \cos\frac{2\pi x}{L_i}\right)$$
(33)

donde x es la distancia desde el extremo izquierdo del intervalo, y podemos aplicar la fórmula de Binet (Ec. 26) para calcular los coeficientes  $A_i$  y  $B_i$ :

$$A_{i} = \frac{(1+\sqrt{5})^{i} - (1-\sqrt{5})^{i}}{2^{i}\sqrt{5}}$$

$$B_{i} = \frac{(1+\sqrt{5})^{i+1} - (1-\sqrt{5})^{i+1}}{2^{i+1}\sqrt{5}}$$
(34)

Para calcular  $\tau_g$  se utiliza la Ec. 27 para  $n_i = 1$ 

$$\tau_g = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \dots}}} \tag{35}$$

Los periodos  $S_i$  y  $L_i$  de los potenciales dados en la Ec. 33, se calculan usando la Ec. 32, y una aplicación de *i* iteraciones en la representación del número  $\tau_g$  en fracciones continuas, Ec. 35.

$$L_i = \frac{1}{1 + \tau_g^2} = \frac{1}{2 - \tau_g}$$
$$S_i = \frac{\tau_g}{2 - \tau_g}$$
(36)

Ahora, para graficar el pontencial aperiódico se tienen que sumar, todas las  $V_S(x)$ con todas las  $V_L(x)$ , y la suma de los anteriores es el potencial total V(x), esto es

$$V(x) = V_S(x) + V_L(x)$$

$$V(x) = \sum_{i=1}^{N} \left[ A_i \frac{K_S}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x_i}{S_i} \right) + B_i \frac{K_L}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x_i}{L_i} \right) \right]$$
(37)

En la Figura 10.1 se muestra el potencial V(x), que corresponden, de arriba hacia abajo, para i = 1, 4, 7 y 10, en las que se puede ver que el periódo de V(x) se va haciendo más grande, hasta que se pierde completamente cuando *i* tiende a infinito.

Para i = 1, con la Ec. 34

$$A_1 = \frac{(1+\sqrt{5})^1 - (1-\sqrt{5})^1}{2^1\sqrt{5}} = 1$$
$$B_1 = \frac{(1+\sqrt{5})^2 - (1-\sqrt{5})^2}{2^2\sqrt{5}} = 1$$

Se calcula  $\tau_g$ se utiliza la Ec. 27 para  $n_i=1$ 

$$\tau_g = \frac{1}{1} = 1$$

Y ahora se pude calcular  $S_i$  y  $L_i,$  se usa la Ec. 32

$$L_1 = \frac{1}{1+1} = \frac{1}{2}$$
$$S_1 = \frac{1}{2-1} = 1$$

Para  $K_S = K_L = 1$ 

$$V_{S}(x) = 1 \frac{K_{S}}{(2\pi)^{2}} \left(1 - \cos\frac{2\pi x}{1}\right)$$
$$V_{L}(x) = 1 \frac{K_{L}}{(2\pi)^{2}} \left(1 - \cos\frac{2\pi x}{1}\right)$$
$$V(x) = V_{S}(x) + V_{L}(x)$$

Y bajo la Ec. 38 se genera la grafica a) en la Fig. 10.1.

$$V(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ 1 - \cos\left(2\pi x\right) \right] + \frac{1}{(2\pi)^2} \left[ 1 - \cos\left(2\pi x\right) \right]$$
(38)

Para i = 4, con la Ec. 34

$$A_4 = \frac{(1+\sqrt{5})^4 - (1-\sqrt{5})^4}{2^4\sqrt{5}} = 3$$
$$B_4 = \frac{(1+\sqrt{5})^5 - (1-\sqrt{5})^5}{2^5\sqrt{5}} = 5$$

Se calcula  $\tau_g$ se utiliza la Ec. 27 para  $n_i=1$ 

$$\tau_g = \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1}}}}} = \frac{3}{5}$$

Y ahora se pude calcular  $S_i$  y  $L_i,$  se usa la Ec. 32

$$L_4 = \frac{1}{1 + \frac{3}{5}} = \frac{5}{8}$$
$$S_4 = \frac{1}{2 - \frac{3}{5}} = \frac{5}{7}$$

Para  $K_S = K_L = 1$ 

$$V_S(x) = \frac{3}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x}{5/7} \right)$$
$$V_L(x) = \frac{5}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x}{5/8} \right)$$
$$V(x) = V_S(x) + V_L(x)$$

Y bajo la Ec. 39 se genera la grafica b) en la Fig. 10.1.

$$V(x) = \frac{3}{(2\pi)^2} \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{5/7}\right) \right] + \frac{5}{(2\pi)^2} \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{5/8}\right) \right]$$
(39)

Y así de la misma manera salen las gráficas c) y d) de la Fig. 10.1.



**Figura 10.1** En las dos graficas superiores, los potenciales son todavía periódicos, mientras que en las dos gráficas inferiores, ya no lo son, por lo que se puede ver que poco a poco pierde su periodicidad.

Y ahora que tenemos el nuevo potencial ahora aperiódico, Ec. 37, al igual como en la sección VI.2, el segundo término representa el **potencial de sitio/sustrato**. Podemos sustituir éste nuevo potencial, en el potencial de sitio en el modelo de Frenkel-Kontorova, de la siguiente forma

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} K \left( x_{i+1} - x_i - a_c \right)^2 + \frac{1}{2} K \left( x_i - x_{i-1} - a_c \right)^2 + A_i \frac{K_S}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x_i}{S_i} \right) + B_i \frac{K_L}{(2\pi)^2} \left( 1 - \cos \frac{2\pi x_i}{L_i} \right) \right]$$
(40)

En la Fig. 10.2 se ilustra cómo sería el potencial de sustrato cuasiperiódico, donde  $a_c$  sigue siendo la distancia de equilibrio entre partículas, pero el cuasiperiódo  $T_i$  es el período de los dos términos coseno combinados del potencial de sustrato, el cuál se rige bajo la serie Fibonacci.



Figura 10.2 Ilustración de cómo cambia el periódo en un potencial cuasiperiódico.

Para llegar a la ecuación diferencial para la red aperiódica SG unidimensional, se aplican las ecuaciones de Hamilton a la Ec. 40

$$\begin{aligned} \dot{x}_{i} &= \frac{\partial H}{\partial p_{i}} = \frac{p_{i}}{m} \end{aligned}$$
(41)  
$$\dot{p}_{i} &= -\frac{\partial H}{\partial x_{i}} \\ \dot{p}_{i} &= -\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[ \frac{p_{i}^{2}}{2m} + \frac{1}{2} K \left( x_{i+1} - x_{i} - a_{c} \right)^{2} + \frac{1}{2} K \left( x_{i} - x_{i-1} - a_{c} \right)^{2} \\ &+ A_{i} \frac{K_{S}}{(2\pi)^{2}} (1 - \cos \frac{2\pi x_{i}}{S_{i}}) + B_{i} \frac{K_{L}}{(2\pi)^{2}} (1 - \cos \frac{2\pi x_{i}}{L_{i}}) \right] \\ &= -[K \left( x_{i+1} - x_{i} - a_{c} \right) (-1) + K \left( x_{i} - x_{i-1} - a_{c} \right) (+1) \\ &+ A_{i} \frac{K_{S}}{2\pi S_{i}} \sin \frac{2\pi x_{i}}{S_{i}} + B_{i} \frac{K_{L}}{2\pi L_{i}} \sin \frac{2\pi x_{i}}{L_{i}} \right] \\ \dot{p}_{i} &= K \left( x_{i-1} - 2x_{i} + x_{i+1} \right) - A_{i} \frac{K_{S}}{2\pi S_{i}} \sin \frac{2\pi x_{i}}{S_{i}} - B_{i} \frac{K_{L}}{2\pi L_{i}} \sin \frac{2\pi x_{i}}{L_{i}} \end{aligned}$$
(41)

Al derivar la Ec. 41

$$\ddot{x}_i = \frac{\dot{p}_i}{m} \tag{43}$$

Al evaluar la Ec. 43 para  $\dot{p}_i$ , e igualarla con la Ec. 42, obtenemos la Ecuación Seno de Gordon para un potencial aperiódico en su forma discreta (Ec. 44).

$$m\ddot{x}_{i} - K\left(x_{i-1} - 2x_{i} + x_{i+1}\right) + A_{i}\frac{K_{S}}{2\pi S_{i}}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_{i}}{S_{i}} + B_{i}\frac{K_{L}}{2\pi L_{i}}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_{i}}{L_{i}} = 0$$
(44)

#### x.1. Solución Numérica al modelo Frenkel-Kontorova con potencial aperiódico

A partir de la Ec. 44 que es la Ecuación Seno de Gordon en su forma discreta, obtenemos la misma ecuación pero en su forma continua, (para un mayor detalle consultese el apéndice XII.2)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \operatorname{sen} u + \beta \operatorname{sen} \tau u = 0, \qquad -M \le x \le M, \ t \ge 0$$
(45)

Con las condiciones iniciales

$$u(x,0) = f(x), \qquad -M \le x \le M, \ t \ge 0$$
$$u_t(x,0) = g(x), \qquad -M \le x \le M, \ t \ge 0$$

Se aplica el esquema de diferencias finitas, explicada en el marco teórico, a la Ec. 45, y obtenemos lo siguiente:

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} - d^2 \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + \operatorname{sen} u_m^n + \beta \operatorname{sen} \tau u_m^n = 0$$
(46)

El esquema puede ser reescrito de una forma recurrente como:

$$u_m^{n+1} = -u_m^{n-1} + 2(1 - d^2\lambda^2)u_m^n + d^2\lambda^2(u_{m-1}^n + u_{m+1}^n) - k^2 \operatorname{sen} u_m^n - k^2\beta \operatorname{sen} \tau u_m^n, \quad \lambda = \frac{k}{h}$$
(47)

Donde h y k son los anchos de paso para cada variable, y están relacionados mediante el parámetro  $\lambda$ . Y desarrollamos la serie de Taylor para  $u_m^{-1} = u(x_m, -k)$  a orden 2

$$u(x,t) = u(x,t_0) + \frac{du}{dt}\Big|_{t=t_0}(t-t_0) + \dots$$
$$u_m^{n-1} = u(x_m,t_{n-1}) = u(x_m,t_n) + \frac{du_m^{n-1}}{dt}\Big|_{t=t_n}(t_{n-1}-t_n) + \dots$$
$$u_m^n + \frac{d}{dt}u_m^n(-k) + O(k^2) = u_m^n - k\frac{d}{dt}u_m^n + O(k^2)$$
$$u_m^{-1} = u_m^0 - k\frac{d}{dt}u_m^0 + O(k^2) = u_m^{-1} = u_m^0 - ku_t(x_m,0) + O(k^2)$$
$$u(x_m,0) - kg(x_m) = f(x_m) - kg(x_m) = f_m - kg_m$$
$$u(x_m,-k) = u(x_m,0) - ku_t(x_m,0) + O(k^2)$$

Reescribiendo la ecuación en forma de esquema, para la primera iteración:

$$u_m^{-1} = f_m - kg_m, \qquad f_m = f(x_m), g(m) = g(x_m)$$

Para controlar las condiciones de frontera y que esté bien definido debemos construir un espacio virtual

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=-M} &= 0, \qquad \frac{u_{M}^{j} - u_{M-1}^{j}}{2k} = 0, \qquad u_{M-1}^{j} = u_{M}^{j} \\ \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=M} &= 0, \qquad \frac{u_{M}^{j} - u_{M+1}^{j}}{2k} = 0, \qquad u_{M+1}^{j} = u_{M}^{j} \end{aligned}$$

#### Análisis de Von Neumann

En un análisis numérico es posible que se presente alguna inestabilidad, debido al error que se presenta por las interaciones. Para eso se utiliza el análisis de Von Neumann, el cual establece la relación que debe ocurrir entre la resolución temporal y la espacial con la finaliadad de que en la aproximación no presente oscilaciones, las cuales podrían crecer sin control [19].

Según el teorema de Von Newmann para el análisis de estabilidad.

Teorema 1 - Estabilidad de Von Newmann. Un esquema de diferencias finitas de un paso en una ecuación hiperbólica es estable si el factor de amplificación  $g = g(\theta, h, k)$ , satisface,

$$|g(\theta, h, k)| \le 1 + Kk$$

para algún  $K \ge 0$ 

Si  $u_m^{n} = g^n e^{im\theta}$ , vamos analizar el esquema 57, suponiendo que  $senu \approx u$  se cumple para ángulos pequeños

$$g^{n+1}e^{im\theta} - 2g^n e^{im\theta} + g^{n-1}e^{im\theta} - d^2\lambda^2 (g^n e^{i(m+1)\theta} - 2g^n e^{im\theta} + g^n e^{i(m-1)\theta}) + k^2 g^n e^{im\theta} (1+\beta\tau) = 0$$
(48)

Simplificando la última ecuación

$$(g^{\frac{1}{2}} - g^{-\frac{1}{2}})^2 = -k^2(1 + \beta\tau) - 4d^2\lambda^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$
(49)

Si tomamos un  $k \ll 1$ 

$$g^{\frac{1}{2}} - g^{-\frac{1}{2}} - 2id\lambda \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) = 0$$
(50)

Y las raíces para esta ecuación son

$$g_{1,2}^{\frac{1}{2}} = id\lambda \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \pm \sqrt{1 - d^2\lambda^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$
(51)

Por el teorema 1 necesitamos que  $|g_{1,2}^{\frac{1}{2}}| \leq 1$ , y eso es para cuando  $d\lambda \leq 1$ , para la implementación en el código elegiremos un  $d\lambda$  muy cercano a 1 o el mismo 1.

#### **Condiciones Iniciales**

Se sabe que la solución kink de la ecuación clásica Seno-Gordon para el caso  $\beta=0$  es

$$u(x,t) = 4 \arctan\left(\exp\left(\frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1 - v^2}}\right)\right)$$
(52)

Si tenemos la condición inicial  $x = x_0, t = 0$  vemos que

$$u(x,0) = f(x) = 4 \arctan\left(\exp\left(\frac{x}{\sqrt{1-v^2}}\right)\right)$$
(53)

$$u_t(x,0) = g(x) = -2\frac{c}{\sqrt{1-c^2}}\operatorname{sech}\left(\exp\left(\frac{x}{\sqrt{1-v^2}}\right)\right)$$
(54)

Se asume que la solución del problema conocido sirva para calcular las condiciones iniciales necesarias para resolver la ecuación Seno-Gordon con potencial cuasiperiódico, Ec. 47.

#### Resultados

Los resultados del funcionamiento del código con las condiciones iniciales del Kink.

#### Resultados del esquema

Representación numérica del Kink con las condiciones iniciales apropiadas de las Ec's 52 y 54, y el código puede consultarse en el apéndice XII.6.



**Figura xII.1**. Diagrama de la solución numérica al modelo Frenkel-Kontorova con h = 0.05, d = 1, dt = 0.05, c = 0.6,  $\lambda = 1$ , Tf = 24, T = 0.6180 y  $\beta = 0.5$  a) para t = 9.697, b) para t = 19.3939

#### x<sub>I</sub>. Conclusiones

Este trabajo proporciona un modelo matemático para las ecuaciones de movimiento para un cristal cuasiperiódico basado en el de FK clásico, que da como resultado un solitón, tomando como condiciones iniciales la solución analítica de un solitón para el modelo FK clásico, con potencial periódico. Un solitón es una onda solitaria que se propaga sin deformarse en un medio no lineal. Se encuentra en fenómenos físicos como solución a ecuaciones diferenciales no lineales, y aunque este trabajo trata sobre solamente un sustrato cuasiperiódico, también puede sentar las bases para un trabajo futuro que trate sobre dos potenciales cuasiperiódicos, así como también para trabajos en dos y tres dimensiones.

#### xII. Apéndice

#### xII.1. Solución Numérica al modelo Frenkel-Kontorova con potencial periódico

La ecuación seno de Gordon es

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - d^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \operatorname{sen} u = 0, \qquad -M < x < M, t > 0$$
(55)

Con las condiciones iniciales

$$u(x,0) = f(x), \qquad -M \le x \le M, t \ge 0$$
$$u_t(x,0) = g(x), \qquad -M \le x \le M, t \ge 0$$

Y aplicaremos el esquema:

$$\frac{u_m^{n+1} - 2u_m^n + u_m^{n-1}}{k^2} - d^2 \frac{u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n}{h^2} + \operatorname{sen} u_m^n = 0$$
(56)

El esquema puede ser reescrito de una forma recurrente como:

$$u_m^{n+1} = -u_m^{n-1} + 2(1 - d^2\lambda^2)u_m^n + d^2\lambda^2(u_{m-1}^n + u_{m+1}^n) - k^2 \operatorname{sen} u_m^n, \quad \lambda = \frac{k}{h}$$
(57)

Y desarrollamos la serie de Tylor para  $u_m^{-1} = u(x_m,-k)$ a orden 2

$$u(x_m, -k) = u(x_m, 0) - ku_t(x_m, 0) + O(k^2)$$

Reescribiendo la ecuación en forma de esquema, para la primera iteración:

$$u_m^{-1} = f_m - kg_m, \qquad f_m = f(x_m), g(m) = g(x_m)$$

Para controlar las condiciones de frontera y que esté bien definido debemos construir un espacio virtual

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=-M} &= 0, \qquad \frac{u_M^j - u_{M-1}^j}{2k} = 0, \qquad u_{M-1}^j = u_M^j \\ \frac{\partial u}{\partial x}\Big|_{x=M} &= 0, \qquad \frac{u_M^j - u_{M+1}^j}{2k} = 0, \qquad u_{M+1}^j = u_M^j \end{aligned}$$

#### Análisis de Von Newmann

Según el teorema de Von Newmann para el análisis de estabilidad.

Teorema 1 - Estabilidad de Von Newmann. Un esquema de diferencias finitas de un paso en una ecuación hiperbólica es estable si el factor de amplificación  $g = g(\theta, h, k)$ , satisface,

$$|g(\theta, h, k)| \le 1 + Kk$$

para algún $K\geq 0$ 

Si  $u_m^n = g^n e^{im\theta}$ , vamos analizar el esquema 57, suponiendo que  $senu \approx u$  se cumple para ángulos pequeños

$$g^{n+1}e^{im\theta} - 2g^n e^{im\theta} + g^{n-1}e^{im\theta} - d^2\lambda^2 (g^n e^{i(m+1)\theta} - 2g^n e^{im\theta} + g^n e^{i(m-1)\theta}) + k^2 g^n e^{im\theta} = 0$$
(58)

Simplificando la última ecuación

$$(g^{\frac{1}{2}} - g^{-\frac{1}{2}})^2 = -k^2 - 4d^2\lambda^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$
(59)

Si tomamos un  $k \ll 1$ 

$$g^{\frac{1}{2}} - g^{-\frac{1}{2}} - 2id\lambda \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) = 0$$
(60)

Y las raíces para esta ecuación son

$$g_{1,2}^{\frac{1}{2}} = id\lambda \operatorname{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) \pm \sqrt{1 - d^2\lambda^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\theta}{2}\right)} \tag{61}$$

Por el teorema 1 necesitamos que  $|g_{1,2}^{\frac{1}{2}}| \leq 1$ , y eso es para cuando  $d\lambda \leq 1$ , para la implementación en el código elegiremos un  $d\lambda$  muy cercano a 1 o el mismo 1.

#### **Condiciones Iniciales**

Las condiciones iniciales para el caso del kink fueron tomadas de 55 y sólo basta con cambiar las condiciones iniciales fu y gu, y/o modificar la solución analítica que sirve como comparativo.

Las condiciones iniciales del Kink son:

$$f(x) = 4 \arctan\left(\exp\left(\frac{x}{\sqrt{1-c^2}}\right)\right)$$
 (62)

$$g(x) = -2\frac{c}{\sqrt{1-c^2}}\operatorname{sech}\left(\exp\left(\frac{x}{\sqrt{1-c^2}}\right)\right)$$
(63)

Y que en el código éstas condiciones son: fu = @(x,c) y gu = @(x,c) [18].

#### Resultados

Los resultados del funcionamiento del código con las condiciones iniciales del Kink.

#### Resultados del esquema

Representación numérica del Kink con las condiciones iniciales apropiadas de las Ec's 62 y 63.



**Figura XII.1**. Diagrama de la solución numérica al model FK con h = 0.05, d = 1, dt = 0.05, c = 0.6,  $\lambda = 1$  y Tf = 24, a) para t = 4.0404, b) para t = 19.798

#### Código

```
function SINEGORDON CC M = 20;
        N = 400;
        h = 2*M/N;
        d = 1;
        lamda = 0.99;
        dt = h/lamda;
        Tf = 20;
        x = -M:h:M;
        c = 0.2;
        fu = @(x,c) 4^*atan(exp(x/sqrt(1-c^*c)));
        gu = @(x,c) -2^*c/sqrt(1-c^*c)*sech(x/sqrt(1-c^*c));
        ue = @(x,c,t) 4*atan(exp((x-c*t)/sqrt(1-c*c)));
        f = fu(x,c);
        g = gu(x,c);
        up = f-dt.*g;
        ua = f;
        sol = ue(x,c,0);
        clf; plot(x,ua,",x,sol,'-.'); hold on;
        axis([-20 20 -5 8]); title('Sine Gordon 0'); xlabel('x'); ylabel('u');
        legend('Numerica ','Analitica ','Location ','NortEast'); pause(.01);
        u = zeros(size(up));
        \operatorname{cont} = 1;
        for t=dt:dt:Tf
        for m=2:N u(m) = -up(m) + 2 * (1 - d^2 * lamda^2) * ua(m) + d^2 * lamda^2 * (ua(m + d^2)) + 
1) + ua(m-1)) -dt^2 * sin(ua(m)); end
        u(1)=u(2); u(N+1)=u(N);
        up = ua; ua = u;
        \operatorname{cont} = \operatorname{cont} + 1;
        if cont = 5
        sol = ue(x,c,t);
        clf; plot(x,ua,'',x,sol,'-.');
        legend('Numerica ','Analitica ','Location ','NortEast'); hold on;
        title(t); axis([-20\ 20\ -5\ 8]); title(['Sine-Gordon',num2str(t)]);
        xlabel('x'); ylabel('u'); pause(.01);
        cont=1;
        end
        end
```

#### xII.2. Modelo Frenkel Kontorova con potencial aperiódico

Es conocido en la literatura que el modelo de Frenkel Kontorova representa la interacción de la *n*-ésima partícula con sus vecinos más cercanos mediante un potencial armónico y la interacción de este con un potencial externo. En esta sección  $x_n$  representa el desplazamiento de la *n*-ésima partícula con respecto a su posición de equilibrio en ausencia del potencial externo. Todas las partículas que conforman la cadena lineal tienen una masa *m* y están conectadas con un resorte lineal de constante *k*. El potencial que interactúa con la cadena lineal está conformado por la suma de dos potenciales senoidales de diferente periodo. Para un número *n* de partículas se tiene un sistema de *n* ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas no lineales, en las que se puede estudiar el comportamiento de  $x_n(t)$ ,

$$m\frac{\mathrm{d}^{2}x_{n}}{\mathrm{d}t^{2}} - k\left(x_{n-1} - 2x_{n} + x_{n+1}\right) + \frac{AK_{S}}{2\pi S}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_{n}}{S} + \frac{BK_{L}}{2\pi L}\operatorname{sen}\frac{2\pi x_{n}}{L} = 0.$$
(64)

Con el objeto de simplificar el sistema de ecuaciones diferenciales (71) podemos realizar el cambio de variable  $u_n = 2\pi x_n/S$ ,

$$\frac{mS}{2\pi} \frac{d^2 u_n}{dt^2} - \frac{kS}{2\pi} \left( u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1} \right) + \frac{AK_S}{2\pi S} \operatorname{sen} u_n + \frac{BK_L}{2\pi L} \operatorname{sen} \left( \frac{S}{L} u_n \right) = 0.$$
(65)

Multiplicamos la ecuación anterior por  $2\pi/(mS)$ ,

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_n}{\mathrm{d}t^2} - \frac{k}{m} \left( u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1} \right) + \frac{AK_S}{mS^2} \operatorname{sen} u_n + \frac{BK_L}{mLS} \operatorname{sen} \left( \frac{S}{L} u_n \right) = 0.$$
(66)

Podemos reescribir la ecuación previa en términos de los parámetros  $\omega_0^2$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\tau$ , las cuales están definidas a continuación:

$$\omega_0^2 \equiv \frac{k}{m} \tag{67}$$

$$\alpha \equiv \frac{AK_S}{mS^2} \tag{68}$$

$$\beta \equiv \frac{BK_L}{mLS} \tag{69}$$

$$\tau \equiv \frac{S}{L} \tag{70}$$

Es importante notar que  $\omega_0^2$  es la frecuencia natural de oscilación de una cadena compuesta por únicamente dos partículas y en ausencia de un potencial externo. El parámetro  $\tau$  es la relación que hay entre el periodo corto (S) y el largo (L) del potencial externo. Finalmente tenemos una ecuación simple para analizar la dinámica de las n partículas, tal ecuación tiene correspondencia con el modelo de Frenkel Kontorova clásico cuando el parámetro  $\tau$  es cero,

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_n}{\mathrm{d}t^2} - \omega_0^2 \left( u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1} \right) + \alpha \operatorname{sen} u_n + \beta \operatorname{sen} \left( \tau u_n \right) = 0.$$
(71)

#### xII.3. Ecuación de sine-Gordon aperiódico

La ecuación sine-Gordon es la versión en variable continua de la ecuación (71), en contraste con la amplitud  $u_n$  que depende únicamente del tiempo, la amplitud u es una función de dos variables, específicamente x y t.

En una cadena de N partículas cuya distancia de separación entre ellas es  $a_c$ , la longitud total de la cadena es:

$$L = N a_c \,. \tag{72}$$

Imaginemos que L es una cantidad constante, y que el número de partículas tiende al infinito, en tal caso  $a_c$  tiende a cero, y cualquier múltiplo de este tenderá a cero,

$$\lim_{N \to \infty} a_c = \lim_{N \to \infty} \frac{L}{N} = 0.$$
(73)

Como consecuencia de la idea anterior, cantidades como  $na_c$  se transforman en un tipo de variable continua, y esto nos permite proponer un cambio de la función discreta  $u_n(t)$  por una función de variable continua u(x, t),

$$u_n(t) = u(x,t); \quad x = an; \quad a \equiv 2\pi a_c/S.$$
 (74)

En el caso especial en el que  $S = 2\pi$ , la variable *a* representa físicamente la distancia de separación que hay entre dos partículas vecinas, y *x* representaría la coordenada espacial en el que se encuentra la *n*-ésima partícula. A partir de la ecuación (74) podemos obtener un par de relaciones útiles,

$$u_{n+1}(t) = u(na + a, t) = u(x + a, t);$$
 (75a)

$$u_{n-1}(t) = u(na - a, t) = u(x - a, t).$$
 (75b)

Podemos usar la definición de derivada parcial con la fórmula centrada para la primera

derivada parcial  $u_x$ ,

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = u_x(x,t) = \lim_{a \to 0} \frac{u(x + \frac{a}{2}, t) - u(x - \frac{a}{2}, t)}{a}.$$
 (76)

Aplicando la misma definición de derivada parcial empleada en (76), y usando las ecuaciones (74) y (75) podemos obtener una expresión para la segunda derivada parcial  $u_{xx}(x,t)$ ,

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \lim_{a \to 0} \frac{u_x(x + \frac{a}{2}, t) - u_x(x - \frac{a}{2}, t)}{a} = \\
= \lim_{a \to 0} \frac{1}{a} \left[ u_x \left( x + \frac{a}{2}, t \right) - u_x \left( x - \frac{a}{2}, t \right) \right] = \\
= \lim_{a \to 0} \frac{1}{a} \left[ \frac{u(x + \frac{a}{2} + \frac{a}{2}, t) - u(x + \frac{a}{2} - \frac{a}{2}, t)}{a} \right] = \\
- \frac{u(x + \frac{a}{2} + \frac{a}{2}, t) - u(x + \frac{a}{2} - \frac{a}{2}, t)}{a} \right] = \\
= \lim_{a \to 0} \frac{1}{a} \left[ \frac{u(x + a, t) - u(x, t)}{a} - \frac{u(x, t) - u(x - a, t)}{a} \right] = \\
= \lim_{a \to 0} \frac{1}{a^2} \left[ u(x + a, t) - 2u(x, t) + u(x - a, t) \right] = \\
= \lim_{a \to 0} \frac{1}{a^2} \left[ u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} \right].$$
(77)

Dado que estamos en el caso continuo, es decir, el límite planteado en la ecuación (73) es equivalente al caso lím<sub> $a\to0$ </sub>, podemos omitir el límite en la expresión anterior y escribir la segunda derivada parcial como:

$$a^{2} \frac{\partial^{2} u(x,t)}{\partial x^{2}} = u_{n+1} - 2u_{n} + u_{n-1}.$$
(78)

Debemos notar que la separación  $a_c$ , el periodo espacial S, y a son constantes en el tiempo, y que n representa el número de partícula y tampoco depende del tiempo, por lo tanto

$$\frac{dx}{dt} = \frac{d}{dx}na = 0.$$
(79)

La primera derivada temporal de  $u_n(t)$  se puede expresar en términos de la función u(x,t), si calculamos la derivada total usando la ecuación (74) y la ecuación (79),

$$\frac{du_n}{dt} = \frac{\partial u}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial t}$$
(80)

Ahora calculamos la segunda derivada temporal de  $u_n(t)$  calculando la derivada total de la función  $\partial u/\partial t$ ,

$$\frac{d^2 u_n}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial t} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}.$$
(81)

Si sustituimos las ecuaciones (78) y (81) en la ecuación (71) obtenemos la ecuación sine-Gordon para un potencial aperiódico,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \omega_0^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \operatorname{sen} u + \beta \operatorname{sen} (\tau u) = 0.$$
(82)

#### x11.4. Solución analítica a la ecuación clásica sine-Gordon

En el caso especial en el que el parámetro  $\tau = 0$  tenemos la ecuación clásica sine-Gordon,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - a^2 \omega_0^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha \operatorname{sen} u = 0.$$
(83)

La versión más simple de la ecuación anterior que se puede resolver se da cuando los parámetros  $a = \omega_0 = \alpha = 1$ ,

$$u_{tt} - u_{xx} + \sin u = 0. (84)$$

Se propone que la solución a la ecuación sea una función que depende la variable  $\xi$ , la cual esta en función de x y t,

$$u(x,t) = u(\xi); \qquad \xi = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}}.$$
 (85)

Para encontrar una expresión para la primera derivada parcial  $u_t$ , podemos usar la ecuación (85) y la regla de la cadena,

$$u_t = \frac{du}{d\xi} \frac{d\xi}{dt} = \frac{-v}{\sqrt{1 - v^2}} u_{\xi} \,. \tag{86}$$

Podemos usar la ecuación previa y la regla de la cadena para hallar la segunda derivada parcial  $u_{tt}$ ,

$$u_{tt} = \frac{du_t}{dt} = \frac{du_t}{d\xi} \frac{d\xi}{dt} = \frac{-v}{\sqrt{1 - v^2}} \frac{du_\xi}{d\xi} \frac{-v}{\sqrt{1 - v^2}} = \frac{v^2}{1 - v^2} u_{\xi\xi}.$$
(87)

De manera similar a como se encontraron las derivadas parciales  $u_t$  y  $u_{tt}$ , se pueden calcular las derivadas parciales  $u_x$  y  $u_{xx}$ ,

$$u_{x} = \frac{du}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = u_{\xi} \frac{1}{\sqrt{1 - v^{2}}};$$

$$u_{xx} = \frac{du_{x}}{dx} = \frac{du_{x}}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{u_{\xi\xi}}{\sqrt{1 - v^{2}}} \frac{1}{\sqrt{1 - v^{2}}} =$$

$$= \frac{u_{\xi\xi}}{1 - v^{2}}.$$
(88a)
(88b)

Después de sustituir las ecuaciones (87) y (88b) obtenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{v^2}{1-v^2}u_{\xi\xi} - \frac{u_{\xi\xi}}{1-v^2} + \operatorname{sen} u = 0.$$
(89)

En el caso en el que  $v \neq 1$  podemos factorizar  $u_{\xi\xi}$  y simplificar la ecuación anterior,

$$-u_{\xi\xi} + \operatorname{sen} u = 0. \tag{90}$$

Es conveniente escribir despejar la segunda derivada  $u_{\xi\xi}$ ,

$$\frac{du_{\xi}}{d\xi} = \operatorname{sen} u \,. \tag{91}$$

Al multiplicar en ambos lados de la ecuación por  $u_{\xi}$  obtenemos:

$$u_{\xi}\frac{du_{\xi}}{d\xi} = \operatorname{sen} u\frac{du}{d\xi}.$$
(92)

Se integra en ambos lados de la ecuación,

$$\int u_{\xi} du_{\xi} = \int \operatorname{sen} u \, du \tag{93}$$

$$\frac{u_{\xi}^2}{2} = -\cos u + C \tag{94}$$

$$\frac{du}{d\xi} = \pm\sqrt{2} \left[C - \cos u\right]^{1/2} \tag{95}$$

$$\int_{u_0}^{u} \frac{\mathrm{d}u}{\left[C - \cos u\right]^{1/2}} = \pm \sqrt{2} \int_{\xi_0}^{\xi} \mathrm{d}\xi \tag{96}$$

Donde  $u_0$  y  $\xi_0$  son las condiciones iniciales del problema,

$$\xi_0 = \frac{x_0}{\sqrt{1 - v^2}} \tag{97}$$

En el caso especial en el que la constante C = 1, podemos usar la identidad  $1 - \cos u = 2 \operatorname{sen}^2(u/2)$  y resolver la integral,

$$\sqrt{2}\ln\left|\tan\frac{u}{4}\right| - \sqrt{2}\ln\left|\tan\frac{u_{0}}{4}\right| = \pm\sqrt{2}\left(\xi - \xi_{0}\right)$$
(98)

De la ecuación anterior podemos despejar u, se obtendrán dos soluciones debido a las dos soluciones a la raíz  $\sqrt{2}$  que están en el lado derecho de la ecuación anterior,

$$u_{\pm}(\xi) = 4 \arctan\left( \left| \tan \frac{u_0}{4} \right| \exp\left( \pm \left( \xi - \xi_0 \right) \right) \right) \,. \tag{99}$$

Se sabe de la literatura que las funciones  $u_+(x,t)$  y  $u_-(x,t)$  son respectivamente la solución kink y antikink del solitón,

$$u_{\pm}(x,t) = 4 \arctan\left( \left| \tan \frac{u_0}{4} \right| \exp\left( \pm \frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \right).$$
(100)

#### xII.5. Solución a la ecuación Sine-Gordon aperiódico

En el caso particular en el que  $\beta=\tau$  y  $\alpha=a\omega_0=1$  tenemos la siguiente ecuación

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \operatorname{sen} u + \tau \operatorname{sen} (\tau u) = 0.$$
(101)

Inspirados en el proceso de solución de la ecuación sine-Gordon clásica (84), proponemos que la función  $u(x,t) = u(\xi)$ , donde

$$\xi = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \,. \tag{102}$$

Después de sustituir las derivadas parciales (87) y (88b) en la ecuación (101) encontramos la siguiente ecuación:

$$-u_{\xi\xi} + \operatorname{sen} u + \tau \operatorname{sen} (\tau u) = 0 \tag{103}$$

Seguimos los mismos pasos utilizados para resolver la ecuación sine-Gordon clásica.

$$\frac{\mathrm{d}u_{\xi}}{\mathrm{d}\xi} = \operatorname{sen} u + \tau \operatorname{sen} \left(\tau u\right) \tag{104}$$

$$u_{\xi} \frac{\mathrm{d}u_{\xi}}{\mathrm{d}\xi} = \left[\operatorname{sen} u + \tau \operatorname{sen} \left(\tau u\right)\right] \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi} \tag{105}$$

$$\int u_{\xi} \mathrm{d}u_{\xi} = \int \left[ \operatorname{sen} u + \tau \operatorname{sen} \left( \tau u \right) \right] \mathrm{d}u \tag{106}$$

$$\frac{1}{2}u_{\xi}^{2} = -\cos u - \cos \left(\tau u\right) + C \tag{107}$$

La constante de integración podemos proponerla como C = -2 + E, entonces la ecuación anterior queda como:

$$\frac{1}{2}u_{\xi}^{2} + 2 + \cos u + \cos\left(\tau u\right) = E \tag{108}$$

Dependiendo del valor de E, de los valores iniciales para u y  $u_{\xi}$ , y del valor de  $\tau$  tendremos diferentes soluciones

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi} = \pm \sqrt{2} \left[ E - 2 - \cos u - \cos \left(\tau u\right) \right]^{1/2}$$
(109)

$$\int_{u_0}^{u} \frac{\mathrm{d}u}{\left[E - 2 - \cos u - \cos \left(\tau u\right)\right]^{1/2}} = \pm \sqrt{2} \int_{\xi_0}^{\xi} \mathrm{d}\xi \tag{110}$$

Donde  $u_0 \ge \xi_0$  son las condiciones iniciales del problema,

$$\xi_0 = \frac{x_0}{\sqrt{1 - v^2}} \tag{111}$$

xII.6. Código para la solución numérica de la ecuación SG con potencial aperiódico

```
function FK Mod
         M = 20;
         N = 400;
         h = 2*M/N;
         d = 1;
         T = 0.61803398874989484820458683436564;
         lamda = 0.99;
         beta = 0.5;
         dt = h/lamda;
         Tf = 20;
         x = -M:h:M;
         c = 0.2;
         fu = @(x,c) 4^*atan(exp(x/sqrt(1-c^*c)));
         gu = @(x,c) -2*c/sqrt(1-c*c)*sech(x/sqrt(1-c*c));
         ue = @(x,c,t) 4^*atan(exp((x-c^*t)/sqrt(1-c^*c)));
         f = fu(x,c);
         g = gu(x,c);
         up = f-dt.*g;
         ua = f;
         sol = ue(x,c,0);
         clf; plot(x,ua,",x,sol,'-.'); hold on;
         axis([-20 20 -5 8]); title('Sine Gordon 0'); xlabel('x'); ylabel('u');
         legend('Numerica ','Analitica ','Location ','NortEast'); pause(.01);
         u = zeros(size(up));
         \operatorname{cont} = 1;
         for t=dt:dt:Tf
         for m=2:N
         u(m) = -up(m) + 2 * (1 - d^2 * lamda^2) * ua(m) + d^2 * lamda^2 * (ua(m+1) + ua(m-1)) + ua(m-1) + ua(m-1) + ua(m-1) + ua(m-1)) + ua(m-1) + ua(m-
1)) - dt^2 * sin(ua(m)) - dt^2 * beta * sin(T * (ua(m))); end
         u(1)=u(2); u(N+1)=u(N);
         up = ua; ua = u;
         \operatorname{cont} = \operatorname{cont} + 1;
         if cont = 5
         sol = ue(x,c,t);
         clf; plot(x,ua,'.',x,sol,'-.');
         legend('Numerica ','Analitica ','Location ','NortEast'); hold on;
```

```
title(t); axis([-20 20 -5 8]); title(['Sine-Gordon',num2str(t)]);
xlabel('x'); ylabel('u'); pause(.01);
cont=1;
end
end
```

## Bibliografía

#### xIII. Bibliografía

- Greiner W. (2003). Classical Mechanics: Systems of particles and Hamiltonian dynamics. Springer-Verlag. New York. 341-346.
- [2] Naidu S. M. (2013). Engineering physics. Pearson Education in South Asia. Dorling Kindersley India Pvt. Ltd. 2-1,2-2.
- [3] Titus S. (1999). Frenkel Kontorova model on quasiperiodic subtrate potentials. Katholieke Universiteit Nijmegen. 7-9.
- [4] Young H., Freedman R. A. (2019). University Physics. Pearson Education Inc. USA. 141-146.
- [5] Walter S., Deloudi S. (2009). Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 10-11.
- [6] Suck J. B., Schreiber M. P. (2002). Häussler. Quasicrystals An Introduction to Structure, Physical Properties and Applications. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Ursprünglich erschienen bei Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York. 3-4.
- [7] Wenk H. R., Bulakh A. (2006). Minerals Their Constitution and Origin. United States of America by Cambridge University Press, New York. 32-34.
- [8] Manini N., Braun O. M., Tosatti E., Guerra R., Vanossi A. (2016). Friction and Nonlinear Dynamics. Dipartimento di Fisica, Universit'a degli Studi di Milano, Via Celoria 16, 20133 Milano, Italy.
- [9] Kittel C. (2003). Introducción a la física del estado sólido. Editorial Reverté. Barcelona, España. 4.
- [10] Nieves A. F., Dominguez. (2011). Métodos numéricos aplicados a la ingeniería. Grupo Editorial Patria. México DF. 552-553.
- [11] Grossman S., et al. (2012). Algebra Lineal. McGraw Hill. México DF. 547-552.

- [12] Burden R., et al. (2017). Análisis numérico. Cengage Learning Editores. México DF. 247-248.
- [13] Chapra S., Canale S. (2015). Métodos numéricos para ingeniería. McGraw Hil. México DF. 571-573.
- [14] Sickotra S. (2020). Solitons: Kinks, Collisions and Breathers. University of Shiffield UK.
- [15] Dong Y., Vadakkepatt A., Martini A. (2011). Analytical Models for Atomic Friction. Springer Science Business Media, LLC.
- [16] Segovia F. A. (2012). Solitones kink y antikink en la ecuación Seno de Gordon. Universidad Distrital Francisco José de Caldas Bogotá, Colombia.
- [17] Braun O. M., Naumovets A. G. (2005). Nanotribology: Microscopic mechanisms of friction. Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, 03028 Kiev, Ukraine.
- [18] González R. J. C., Cisneros L. A. Introducción al model Frenkel-Kontorova. Instituto Politécnico Nacional. Zacatenco México.
- [19] Castillo P., Gómez S. (2019). Análisis de Von Neumann para el método Local Discontinuous Galerkin en 1D. Universidad Industrial de Santander Puerto Rico.1.
- [20] Zill D. (2018). Ecuaciones diferenciales. Cengage Learning Editores, S.A. de C.V. Cuajimalpa. Ciudad de México, México. 555-556.
- [21] Hassani S. (2013). Mathematical physics. A modern introduction to its foundations. Editorial Springer. New York Dordrecht London. 904.