



---

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
FACULTAD DE CIENCIAS

Movimiento circular en ambientes cuasi-periódicos:  
magnetorresistencia en cuasicristales

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

**Físico**

PRESENTA:

**Alan Rodrigo Mendoza Sosa**

DIRECTOR:

Dr. Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer



Ciudad Universitaria, CD. MX., 2018



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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



---

1. Datos del alumno

Mendoza

Sosa

Alan Rodrigo

61 6 72 90

Universidad Nacional Autónoma de

México

Facultad de Ciencias

Física

414003576

2. Datos del tutor

Dr

Ricardo Atahualpa

Solórzano

Kraemer

3. Datos del sinodal 1

Dr

Rafael Ángel

Barrio

Paredes

4. Datos del sinodal 2

Dr

Víctor Manuel

Romero

Rochín

5. Datos del sinodal 3

Dr

Luis

Benet

Fernández

6. Datos del sinodal 4

Dr

Carlos

Ramírez

Ramos

7. Datos del trabajo escrito

Movimiento circular en ambientes cuasi-periódicos:

magnetorresistencia en cuasicristales

86 p.

2018

*“Quizás fueron las ruinas que dejé detrás  
por eso hoy no le temo al fuego  
pero sí a las cenizas”  
Javier Ibarra Ramos*





# Reconocimientos

---

A mis padres Salvador Mendoza Gómez y Rosa Martha Sosa Guzmán por todo el apoyo y amor brindado no sólo durante la realización de este trabajo, sino a lo largo de más de 22 años de vida, sin los cuales yo no estaría donde me encuentro ahora.

A mi hermana Martha Anahí Mendoza Sosa por ser mi motivación desde pequeño a crecer y mejorar constantemente.

A Fabiola Trujano Jiménez por ser mi mejor amiga, compañera de vida, cómplice, psicóloga, pareja, confidente y un sin fin de adjetivos más que, si bien son realmente admirables, el espacio de esta hoja es muy pequeño para ponerlos.

A Ricardo González Almanza por ser el hermano de otra madre que me ha acompañado desde la preparatoria y cuya compañía y apoyo incondicional en cada uno de mis proyectos, discusiones, debates y aventuras hizo más llevadera la vida.

A Ricardo Atahualpa Solórzano Kraemer quien, más que ser un tutor, director de tesis, profesor, patrón, etc. es un gran amigo y cuyas palabras de aliento a lo largo del desarrollo de este trabajo me permitieron concluirlo manteniendo (parcialmente) mi cordura.

A Carlos Ramírez Ramos, profesor y amigo quien siempre mantuvo la fe y esperanza en mí para continuar mi trayecto como estudiante de Física y cuyas anécdotas en aquellas horas libres me permitieron decidir un camino a recorrer en mi vida más allá de la Facultad.

Investigación realizada gracias al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPIIT) de la UNAM IN117117 Herramientas computacionales para física estadística y dinámica no lineal. Agradezco a la DGAPA-UNAM la beca recibida.



# Declaración de autenticidad

---

Por la presente declaro que, salvo cuando se haga referencia específica al trabajo de otras personas, el contenido de esta tesis es original y no se ha presentado total o parcialmente para su consideración para cualquier otro título o grado en esta o cualquier otra Universidad. Esta tesis es resultado de mi propio trabajo y no incluye nada que sea el resultado de algún trabajo realizado en colaboración, salvo que se indique específicamente en el texto.

Alan Rodrigo Mendoza Sosa. Ciudad Universitaria, CD. MX., 2018



# Resumen

---

El presente trabajo versa sobre la investigación realizada en torno a los gases de Lorentz cuasi-periódicos en presencia de campos magnéticos externos, sobre esa dirección se expone un algoritmo computacional basado en el método de corte y proyección para simular gases de Lorentz cuasi-periódicos (incluyendo al gas de Lorentz periódico como caso particular) en presencia de dichos campos, así como un análisis sobre la difusión del sistema como función de la intensidad del campo magnético para densidades de obstáculos bajas y su respectivo mapeo de Poincaré basado en dichas simulaciones. Con el objetivo de brindar un contexto sólido al tema de interés se expone en los primeros capítulos una recopilación bibliográfica e histórica referente a los gases de Lorentz y sus diversas variaciones considerando ambientes periódicos, cuasi-periódicos y aleatorios.

The present work deals with the research carried out on quasi-periodic Lorentz gases in the presence of external magnetic fields, on this direction a computational algorithm based on a cut-and-project method is exposed to simulate quasi-periodic Lorentz gases (including the periodic Lorentz gas as a particular case) in the presence of these fields, as well as an analysis on the diffusion of the system as a function of the magnetic field strength for low obstacle densities and its respective Poincaré mapping based on these simulations. With the aim of provide a solid context to the topic of interest, a bibliographic and historical compilation of Lorentz gases and its diverse variations considering periodic, quasi-periodic and random environments is exposed in the first chapters.



# Índice general

---

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Presentación . . . . .	1
1.2. Objetivo . . . . .	3
1.3. Estado del arte . . . . .	4
1.3.1. Magnetorresistencia . . . . .	4
1.3.1.1. Magnetorresistencia ordinaria . . . . .	4
1.3.1.2. Magnetorresistencia anisotrópica . . . . .	5
1.3.1.3. Simulaciones numéricas . . . . .	5
1.3.2. Materia activa . . . . .	6
1.3.3. Cuasicristales . . . . .	7
1.3.4. Gases de Lorentz . . . . .	7
1.4. Planteamiento del problema . . . . .	8
1.5. Contribuciones . . . . .	9
1.6. Estructura de la tesis . . . . .	9
<b>2. Ambientes Cuasi-periódicos</b>	<b>11</b>
2.1. Funciones periódicas . . . . .	11
2.2. Definición de casi-periódico y cuasi-periódico . . . . .	13
2.2.1. Funciones Cuasiperiódicas . . . . .	14
2.3. Cuasicristales . . . . .	15
2.4. Métodos de construcción . . . . .	18
2.4.1. Método de corte y proyección . . . . .	18
<b>3. Gases de Lorentz</b>	<b>25</b>
3.1. Gases de Lorentz periódicos . . . . .	30
3.1.1. Billar de Sinai . . . . .	32
3.1.2. Dimensiones altas . . . . .	35
3.1.3. Efectos de campos externos . . . . .	37
3.2. Gases de Lorentz aleatorios . . . . .	38
3.2.1. Con campo magnético . . . . .	40
3.3. Gases de Lorentz cuasiperiódicos . . . . .	41

<b>4. Código y detalles de la simulación</b>	<b>43</b>
4.1. Estructura del código . . . . .	43
4.1.1. Condiciones iniciales . . . . .	44
4.1.2. Cálculo de las colisiones en 2D . . . . .	49
4.1.3. Cálculo de las colisiones en 3D . . . . .	54
4.2. Implementación del código . . . . .	60
4.2.1. Precisión en la simulación . . . . .	62
<b>5. Resultados numéricos y Analíticos</b>	<b>63</b>
5.1. Trayectorias . . . . .	63
5.2. Desplazamiento cuadrático medio . . . . .	65
5.3. Coeficientes de Difusión . . . . .	69
5.4. Cálculo analítico del límite de localización . . . . .	73
5.5. Mapeo de Poincaré . . . . .	75
<b>6. Conclusiones</b>	<b>79</b>
6.1. Trabajos futuros . . . . .	80

# Introducción

---

## 1.1. Presentación

Uno de los conceptos más fundamentales e importantes para toda la física moderna es el átomo. El hecho de que toda la materia conocida hasta nuestros días esté conformada por una cantidad enorme de átomos interactuando entre ellos le otorga al estudio de las interacciones atómicas una importancia primordial para entender y predecir las propiedades macroscópicas que observamos en los diferentes materiales.

Sobre los primeros avances orientados a dicho objetivo se encuentra el desarrollo de la termodinámica en los siglos XVIII y XIX. En principio todo sistema macroscópico está sujeto a las leyes de la termodinámica, las cuales pueden interpretarse como:

- Ley cero: Postula la existencia de una variable termodinámica propia de todos los sistemas macroscópicos denominada temperatura empírica, la cual toma un valor igual para todos los sistemas termodinámicos que se encuentran en equilibrio térmico (sin importar su naturaleza).
- Primera ley: Es el equivalente a la conservación de la energía pero para sistemas macroscópicos. Su formulación requiere la introducción del concepto de calor como una forma no mecánica de transferir energía al sistema macroscópico.
- Segunda ley: Postula la existencia de una nueva variable denominada entropía, la cual permite caracterizar a los procesos irreversibles de manera matemática, prohibiendo la existencia de procesos tales como el flujo de calor de un cuerpo “frío” a otro “caliente”.
- Tercera ley: Enuncia que en aquellos sistemas cuya temperatura absoluta tiende a cero, los cambios en la entropía tienden igualmente a cero.

Una interpretación similar a la expuesta aquí se puede encontrar en G. Carmona [1].

## 1. INTRODUCCIÓN

---

Una de las propiedades fundamentales de la termodinámica es que sus leyes, las cuales conforman las bases sobre las cuales se construye toda la teoría, provienen de observaciones y consideraciones experimentales, con lo cual se dice que la termodinámica es una teoría fenomenológica. De esta forma a la termodinámica le resulta irrelevante la composición de la materia, ignorando por completo su carácter atómico.

Fue hasta los trabajos de Ludwig Boltzmann (físico austriaco nacido en 1844 y muerto en 1906) sobre la teoría cinética de los gases en 1872 que la relación entre la dinámica de los componentes microscópicos de un gas y el comportamiento macroscópico del mismo quedó establecida. Este trabajo, así como la famosa ecuación que lleva su nombre sobre la entropía de un sistema arbitrario en equilibrio termodinámico como función del número de microestados accesibles al mismo ( $S = k_B \log(W)$  donde  $S$  es la entropía,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $W$  es el número de microestados accesibles al sistema) dieron lugar al desarrollo de la física estadística.

El objeto de estudio de esta rama de la física es esencialmente el mismo que el de la termodinámica, sin embargo las bases sobre las que está fundamentada y el análisis teórico de los sistemas difiere por completo. Contrario a la termodinámica, la física estadística considera a los sistemas desde un punto de vista microscópico integrando a la teoría la existencia de los átomos y las interacciones entre ellos como causantes de las propiedades macroscópicas que presentan tales sistemas.

Dado que la cantidad de partículas consideradas suele ser extremadamente grande, la física estadística se apoya de la probabilidad y la estadística para realizar sus cálculos y derivaciones. En este aspecto, una de las hipótesis esenciales en las que se sustenta toda la teoría aplicada a sistemas en equilibrio termodinámico es la denominada hipótesis de ergodicidad de Boltzmann, la cual está estrechamente relacionada con las propiedades dinámicas de los sistemas de interés. Podemos escribir a la hipótesis de ergodicidad de Boltzmann como:

- **Hipótesis de ergodicidad de Boltzmann:** Para sistemas de muchas partículas que interactúan en equilibrio, los promedios temporales (considerando un tiempo que tiende infinito) tienden a los promedios de ensamble [2].

Para visualizar un poco el contenido de dicha hipótesis pensemos en una analogía donde nuestro sistema es un ser humano adulto y la magnitud que nos interesa medir de dicho sistema es la cantidad de dinero que gasta, en promedio, cada día.

Una manera de aproximarnos a dicha cantidad es llevar un registro de los gastos diarios que realiza nuestro sujeto de interés por una cantidad de tiempo suficientemente larga (digamos un mes) y promediar los valores recolectados. Si contáramos con los recursos y el tiempo necesarios para realizar esta tarea, el método de tomar promedios temporales para tiempos suficientemente largos resulta bastante acertado. Pensemos ahora en que no contamos con un mes, sino con un sólo día para aproximarnos a dicha

cantidad. Si suponemos que nuestro sujeto de interés (el sujeto  $A$ ) forma parte un grupo de sujetos con un comportamiento similar en cuanto a gastos se refiere por ejemplo sujetos pertenecientes a una misma clase socioeconómica (el equivalente a un ensamble en física estadística), entonces es posible aproximarnos a la cantidad de dinero que gasta nuestro sujeto de interés recolectando los gastos que realizaron cada uno de los individuos que comparten la misma clase socioeconómica que nuestro sujeto  $A$  y promediar sobre el número de individuos estudiados. El análogo a la hipótesis de ergodicidad de Boltzmann en este caso particular es que para tiempos suficientemente largos y con una cantidad de individuos suficientemente grande que posean el mismo comportamiento en cuanto a gastos diarios se refiere, ambos métodos nos conducirían al mismo resultado [3].

Pese a que, como se mencionó párrafos arriba, toda la física estadística descansa sobre esta hipótesis, la validez de la misma sólo se ha demostrado para casos muy particulares entre los que destaca el denominado billar de Sinai y algunas de sus variaciones [4], los cuales resultan ser equivalentes a los famosos gases de Lorentz [5].

Propuesto originalmente por H. A. Lorentz en 1905 [6] con el fin de deducir la conductividad eléctrica y la conductividad calórica en metales, el gas de Lorentz es uno de los modelos más sencillos y utilizados para el estudio de los denominados fenómenos de transporte, entre los cuales se encuentra la transferencia de cantidad de movimiento, la transmisión de calor y la transferencia de materia; dichos fenómenos pueden asociarse a propiedades de los materiales tales como la viscosidad en los fluidos, las características de los flujos a través de diferentes superficies, la conductividad térmica de gases, líquidos y sólidos, transporte de energía por radiación, cálculo de la difusión en diferentes sistemas tales como gases a baja densidad, suspensiones coloidales, polímeros, etc. así como la conductividad eléctrica en los materiales conductores [7].

A grandes rasgos podemos pensar al gas de Lorentz como un conjunto de obstáculos circulares distribuidos a lo largo del espacio y una partícula puntual que se desplaza a través de dicho espacio colisionando de manera especular con los obstáculos. Entre los gases de Lorentz más estudiados se encuentra el caso periódico y el caso desordenado (siguiendo un proceso Poisson) con y en ausencia de campos externos, conociéndose relativamente poco del caso cuasi-periódico, el cual podría modelar de manera adecuada los fenómenos de transporte presentes en sistemas cuasi-periódicos como los cuasicristales.

## 1.2. Objetivo

Este trabajo tiene dos objetivos principales: El primero consiste en presentar los resultados obtenidos por el autor en colaboración con Atahualpa Kraemer para la simulación computacional de un gas de Lorentz cuasi-periódico en dos dimensiones. Es de particular interés para el presente trabajo estudiar el comportamiento del desplaza-

miento cuadrático medio de una partícula contenida en este sistema como función del radio de los obstáculos y el radio de giro de la partícula (relacionado a la intensidad del campo magnético) con el fin de conocer la difusión de dichos sistemas.

El segundo objetivo de esta tesis es plantear un panorama amplio acerca de los gases de Lorentz, sus aplicaciones a la física como modelos para describir los fenómenos de transporte presentes en diversos sistemas así como las propiedades dinámicas de los mismos y los principales resultados obtenidos para los diversos gases de Lorentz.

### 1.3. Estado del arte

En la presente sección se expondrán algunas de las áreas de interés, así como varios de los trabajos realizados en ellas, relacionadas con el estudio de los gases de Lorentz cuasiperiódicos en presencia de campos magnéticos.

#### 1.3.1. Magnetorresistencia

La magnetorresistencia es el fenómeno en el cual la resistencia eléctrica de los materiales varía en función del campo magnético que se hace inducir sobre ellos. Para los fines de este trabajo nos centraremos en dos tipos de magnetorresistencia, siendo estas la magnetorresistencia ordinaria y la magnetorresistencia anisotrópica.

##### 1.3.1.1. Magnetorresistencia ordinaria

Para los materiales que presentan este fenómeno el cambio en la resistividad,  $\Delta\rho$ , es positivo tanto para campos magnéticos paralelos ( $\Delta\rho_{\parallel}$ ) como para campos magnéticos transversales ( $\Delta\rho_T$ ) a la dirección de la corriente. Se pueden observar tres casos diferentes de magnetorresistencia ordinaria en función de la estructura de los orbitales electrónicos en la superficie de Fermi:

- En metales con superficies de Fermi cerradas los electrones están constreñidos a moverse en una órbita de su espacio  $\mathbf{K}$ , de modo que el campo magnético inducido sobre el metal produce un aumento en la frecuencia ciclotrónica de los electrones al moverse en su órbita cerrada. En este caso la resistencia aumenta hasta saturar al material para campos magnéticos intensos. Algunos metales que presentan este comportamiento son In, Al, Na y Li.
- Para los metales que poseen tanto huecos como electrones en igual cantidad, la magnetorresistencia aumenta al aumentar el campo  $H$  inducido sobre el metal, sin importar la orientación relativa del campo  $H$ . Algunos ejemplos de los metales que presentan este tipo de comportamiento son Bi, Sb, W y Mo.

- Los metales que presentan superficies de Fermi con órbitas abiertas para algunas direcciones cristalográficas exhiben una magnetorresistencia alta para los campos magnéticos aplicados en esas direcciones mientras que la resistencia del metal se saturará en las direcciones donde las órbitas sean cerradas. Este comportamiento se encuentra en metales como Cu, Ag, Au, Mg, Zn, etc.

### 1.3.1.2. Magnetorresistencia anisotrópica

A diferencia de lo que ocurre en la magnetorresistencia ordinaria, donde la resistividad del material aumentaba al aumentar la intensidad del campo magnético incidente sin importar su orientación relativa al material, la magnetorresistencia anisotrópica se caracteriza por afectar el signo del cambio de la resistividad del material en función de la dirección del campo magnético incidente:  $\Delta\rho_{||}$  aumenta al aumentar la intensidad del campo magnético mientras que  $\Delta\rho_T$  decrece al aumentar la intensidad del campo magnético incidente.

El origen físico detrás de este comportamiento se debe al acoplamiento spin-órbita. La nube de electrones alrededor de cada núcleo se deforma ligeramente a medida que la dirección del campo magnético varía; esta deformación cambia la cantidad de dispersión sufrida por los electrones de conducción al atravesar la red y es la responsable del cambio en la resistividad del material. De manera heurística, si el campo y la magnetización son transversales a la corriente, entonces la nube de electrones es coplanar a la corriente produciendo una pequeña sección para la colisión de los electrones libres con los átomos en la red, generando un estado de baja resistencia eléctrica. Por otro lado, si la dirección del campo es paralela a la corriente, la nube de electrones es ortogonal a la dirección de la corriente, aumentando la sección para la colisión de los electrones libres con los átomos de la red, produciendo un estado de alta resistencia eléctrica [8].

### 1.3.1.3. Simulaciones numéricas

Pensando a la magnetorresistencia como un fenómeno de transporte podemos abordar dicho fenómeno a través del estudio de la difusión de algún sistema matemático que sirva de modelo para el material en cuestión, siendo los gases de Lorentz (en el límite clásico donde la dispersión de los electrones en el material está dada por colisiones con obstáculos grandes,  $\approx 500nm$ , por ejemplo los denominados quantum anti-dots) uno de los modelos más empleados para tales fines.

Estudios sobre la difusión de partículas cargadas en una red periódica de obstáculos (gas de Lorentz periódico) bajo la presencia de un campo magnético constante y homogéneo se han realizado de manera computacional reportándose la existencia de trayectorias balísticas estables [9]. La misma situación pero para una red aleatoria de obstáculos (gas de Lorentz aleatorio) dada por un proceso Poisson y densidades de obstáculos bajas se simuló de manera computacional por A. Kuzmany y H. Spohn [10],

en donde se reportaron máximos en la conductividad de Ohm y la conductividad de Hall asociados a campos magnéticos no nulos.

### 1.3.2. Materia activa

A pesar de que el modelo está pensando para estudiar fenómenos de transporte, como la magnetorresistencia, se ha encontrado que los gases de Lorentz pueden ser aplicados al estudio de sistemas tales como nadadores microscópicos o bacterias [11]. En general, los gases de Lorentz pueden modelar determinados casos de la denominada materia activa.

La materia activa engloba a todos los sistemas con la capacidad de transducir energía libre en movimiento sistemático. Esta capacidad está asociada a grados de libertad internos de las partículas que constituyen a los sistemas (denominadas partículas activas) que le permiten a las partículas absorber y disipar energía, generando durante este proceso el movimiento que caracteriza a la materia activa [12]. Algunos ejemplos de estos sistemas son los denominados nadadores microscópicos como las células móviles, bacterias o partículas Janus [11].

Los nadadores microscópicos por lo general se desplazan en medios inhomogéneos cuyas imperfecciones u obstáculos poseen una disposición espacial irregular. Un modelo para representar esta situación es considerar al sistema como una partícula en un gas de Lorentz aleatorio considerando diferentes interacciones entre la partícula y los obstáculos [11]. En el 2013 Chepizhko et al estudiaron el caso bidimensional de una partícula activa con velocidad constante desplazándose en un medio heterogéneo de modo que la partícula activa evadiera a los obstáculos del medio, reportando la existencia de movimientos difusivos y subdifusivos en función de la densidad de obstáculos y la velocidad de giro de la partícula para evadirlos [13]. En el 2014 C. Reichhardt y C. J. Olson Reichhardt estudiaron de manera numérica sistemas activos en gases de Lorentz aleatorios en los cuales la partícula se desplaza en una dirección fija por un determinado tiempo antes de cambiar de dirección de manera abrupta (esta dinámica es equivalente a la de una partícula activa Browniana); en dicho trabajo concluyen que la difusión del sistema para tiempos largos tiende a cero mientras que para tiempos cortos la misma aumenta hasta llegar a un máximo [14]. En el 2016 Zeitz et al estudiaron la difusión de partículas activas Brownianas en un gas de Lorentz aleatorio reportando un comportamiento subdifusivo del sistema cuando este se encuentra cercano al punto de percolación con un comportamiento superdifusivo a tiempos intermedios [11].

Si consideramos que las partículas activas son usualmente asimétricas con respecto a su eje de propulsión, el movimiento de dichas partículas resulta en un movimiento circular (para el caso bidimensional) o en un movimiento helicoidal (para el caso tridimensional) [15, 16]. Esta propiedad de las partículas activas evoca al caso de los gases de Lorentz en presencia de un campo magnético.

### 1.3.3. Cuasicristales

Hasta el año de 1984 se creía que los cristales correspondían a estructuras atómicas periódicas las cuales producían un patrón de difracción discreto [17], sin embargo en dicho año Shechtman et al encontraron de manera experimental al enfriar rápidamente una aleación de Aluminio y Manganeso una estructura atómica aperiódica capaz de producir patrones de difracción discretos, aunque con simetrías prohibidas para los cristales según los modelos de la época [18]; este resultado le valdría el premio Nobel de Química en el año 2011 por el descubrimiento de los cuasicristales.

Pese a que los cuasicristales que se conocen hasta nuestros días están conformados en su gran mayoría por elementos metálicos, sus propiedades tales como la resistencia eléctrica o la conductividad térmica son similares a las presentes en semiconductores o aislantes [19, 20, 21], lo cual permite su uso en diversas áreas, desde barreras térmicas en la industria aeronáutica [19] hasta posibles usos como recubrimiento para utensilios de cocina [22, 19, 23].

Las propiedades de los cuasicristales siguen siendo un tema abierto, siendo de particular interés el entender cómo estas emergen de la estructura atómica de los mismos. Uno de los modelos con mayor aceptación para el estudio de los cuasicristales es el de considerar que la posición espacial de sus átomos corresponde a una retícula cuasi-periódica.

### 1.3.4. Gases de Lorentz

Los gases de Lorentz periódicos han sido estudiados de manera exhaustiva en sus diversas variaciones. Para el caso bidimensional con horizonte finito la difusión del sistema es normal, es decir el desplazamiento cuadrático medio de las partículas es lineal en el tiempo para tiempos muy grandes ( $\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2 \rangle \sim Dt$ ) [24]. Para el caso bidimensional con horizonte infinito el sistema presenta una superdifusión logarítmica ( $\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2 \rangle \sim D t \log t$ ) [25].

En dimensiones mayores la forma funcional de la función de probabilidad de que una trayectoria no colisione con obstáculo alguno en el gas de Lorentz está dada por la siguiente relación:

$$F(t) = \begin{cases} t^{-2} & \text{si } 3 \leq d \leq 5 \\ t^{-2} \log t & \text{si } d = 6 \\ t^{\frac{2+d}{2-d}} & \text{si } d \geq 6 \end{cases},$$

donde  $t$  es el tiempo de vuelo y  $d$  la dimensión del gas de Lorentz [26].

Considerando que la partícula de un gas de Lorentz periódico bidimensional con horizonte finito está cargada y en presencia de un campo eléctrico externo, el sistema

resulta ser ergódico y cumple con la ley de Ohm [27]. El caso de un gas de Lorentz periódico bidimensional con horizonte infinito en presencia de un campo magnético constante ortogonal a la superficie del gas de Lorentz se simuló de manera numérica, reportando la existencia de trayectorias balísticas estables [9]. Posterior a dichos trabajos se demostró la ergodicidad de los gases de Lorentz periódicos bidimensionales con horizonte finito en presencia de fuerzas externas pequeñas [28].

Para los gases de Lorentz aleatorios se ha estudiado el caso en que la distribución espacial de los obstáculos sigue una distribución Poisson reportándose una difusión normal con coeficiente de difusión  $D = \frac{v^2}{3}\tau_c$  donde  $v^2$  es el cuadrado de la norma de la velocidad de la partícula [29]. Aumentando la densidad de los obstáculos los resultados numéricos muestran una subdifusión para una cierta ventana temporal, la cual aumenta conforme la densidad se ve incrementada, llegando a un punto donde la difusión del sistema se vuelve cero [29, 30].

Considerando la presencia de un campo magnético externo al gas de Lorentz se obtuvo de forma numérica la conductividad de Ohm y la conductividad de Hall como función de la intensidad del campo magnético para densidades de obstáculos bajas, reportándose la existencia de un máximo para ambas conductividades asociadas a campos magnéticos no nulos [10]. La ergodicidad de los gases de Lorentz aleatorios con campos magnéticos externos depende de la magnitud del campo externo [31].

Estudios sobre la difusión de gases de Lorentz cuasi-periódicos en dos dimensiones se han realizado de manera numérica por Kraemer y Sanders en el 2013, mostrando la existencia de difusión normal para gases de Lorentz con horizonte finito y una ligera superdifusión para gases de Lorentz con horizonte infinito [32]. Dos años después Kraemer et al estudiaron la distribución de vuelos libres de estos sistemas, resultando en una distribución  $\frac{1}{t^3}$  si el sistema presenta canales, pasando a una distribución  $\frac{1}{t^5}$  cuando los canales se cierran y el sistema presenta un horizonte localmente finito [33].

### 1.4. Planteamiento del problema

Los gases de Lorentz periódicos y aleatorios han sido estudiados de manera exhaustiva a lo largo de los últimos 30-40 años, sin embargo para los gases de Lorentz cuasi-periódicos se conocen muy pocas propiedades sobre su comportamiento dinámico, menos aún si se considera la presencia de campos externos a dichos sistemas.

El problema que aborda este trabajo es el de dar una solución numérica acerca del tipo de difusión que presenta un gas de Lorentz cuasi-periódico bidimensional en presencia de un campo magnético ortogonal al mismo, variando los parámetros correspondientes al campo magnético (radio de giro de la trayectoria de la partícula) y el radio de los obstáculos a lo largo del espacio dos dimensional. Nuestra pregunta es

si esta difusión es similar al caso desordenado, al caso periódico, o presenta nuevas propiedades.

## 1.5. Contribuciones

La principal contribución del presente trabajo consiste en un algoritmo computacional que permite simular gases de Lorentz cuasi-periódicos en dos dimensiones en presencia de un campo magnético ortogonal al gas de Lorentz, teniendo como parámetros al radio de los obstáculos, el radio de giro de la partícula y el ángulo de inclinación relacionado al subespacio que genera la red de cuasi-periódica empleando un método de proyección para dicho fin. Cabe resaltar el hecho de que debido a este último parámetro el código en cuestión es capaz de simular de igual forma gases de Lorentz periódicos en dos dimensiones en presencia de un campo magnético ortogonal al gas de Lorentz. Dicho algoritmo computacional escrito en el lenguaje de programación Julia puede ser descargado en: [https://github.com/AlanRodrigoMendoza/Cuasiperiodic\\_Lorentz\\_Gas](https://github.com/AlanRodrigoMendoza/Cuasiperiodic_Lorentz_Gas)

A través de la implementación de dicho algoritmo se exponen los resultados numéricos para el comportamiento del desplazamiento cuadrático medio de estos sistemas como función de sus parámetros, resultados asociados a la difusión que presenta el sistema en cuestión. Se encontró que para tiempos largos y densidades de obstáculos bajas la difusión del sistema es normal, presentándose un intervalo temporal en el cual, para campos magnéticos relativamente grandes, el sistema presenta subdifusión.

También en este esfuerzo se estudiaron las trayectorias de las partículas y se analizó el mapeo de Poincaré del sistema en búsqueda de trayectorias de tipo balístico como aparecen en el caso periódico; al respecto se encontraron condiciones iniciales tales que el mapeo de Poincaré asociado presente islas, mientras que para condiciones iniciales asociadas a puntos en el espacio fase dentro de las islas el mapeo de Poincaré no presenta estas regiones inaccesibles. Por otro lado, en comparación con el caso desordenado, se estudiaron los coeficientes de difusión en el régimen donde el comportamiento del sistema es difusivo (dependiendo de la densidad de obstáculos), obteniendo cómo varían dichos coeficientes como función del campo magnético.

Estos resultados no se han obtenido con anterioridad hasta donde es del conocimiento del autor.

## 1.6. Estructura de la tesis

Este trabajo está dividido en 6 capítulos. En el capítulo 2 se desarrollan los conceptos de periodicidad, casi-periodicidad y cuasi-periodicidad de una función, su relación

## 1. INTRODUCCIÓN

---

con los denominados cuasicristales (así como la definición y algunas aplicaciones de estos) y el método de corte y proyección que permite generar retículas de puntos cuasi-periódicas en  $d$  dimensiones.

En el capítulo 3 se introduce el concepto del gas de Lorentz y se define a los billares matemáticos siendo de particular interés el billar de Sinai, cuyas variaciones dan lugar a una amplia gama de gases de Lorentz. En este capítulo estudiamos a detalle los casos periódicos y desordenados (siguiendo un proceso Poisson) de los gases de Lorentz considerando la posibilidad de que existan campos externos a dichos gases, por ejemplo campos magnéticos y/o eléctricos.

El capítulo 4 contiene una breve descripción del algoritmo computacional y de las funciones que conforman al código empleado para la simulación de un gas de Lorentz cuasi-periódico en dos dimensiones. Se anexa el código al final del presente trabajo.

Finalmente en los capítulos 5 y 6 se exhiben los resultados obtenidos de la simulación, las interpretaciones de los mismos y las conclusiones derivadas de estos.

# Ambientes Cuasi-periódicos

---

La noción más popular que existe acerca de los cristales es la de un sólido cuyos átomos se encuentran espacialmente localizados en los vértices de una retícula o malla periódica. Esta idea resulta inadecuada para definir completamente a las estructuras cristalinas, sin embargo posee en sí misma uno de los conceptos clave para clasificar a las diferentes estructuras atómicas: la periodicidad.

## 2.1. Funciones periódicas

Formalmente, una función periódica (en una dimensión) se define de la siguiente manera:

- **Función periódica:** Sea  $f$  una función definida en  $X \subset \mathbb{R}$ , decimos que la función  $f$  es periódica con un periodo  $T \neq 0$  si para cada  $x \in X \subset \mathbb{R}$  los números  $x + T$  y  $x - T$  también pertenecen a  $X$ , de modo que se cumple la igualdad  $f(x \pm T) = f(x)$  [34].

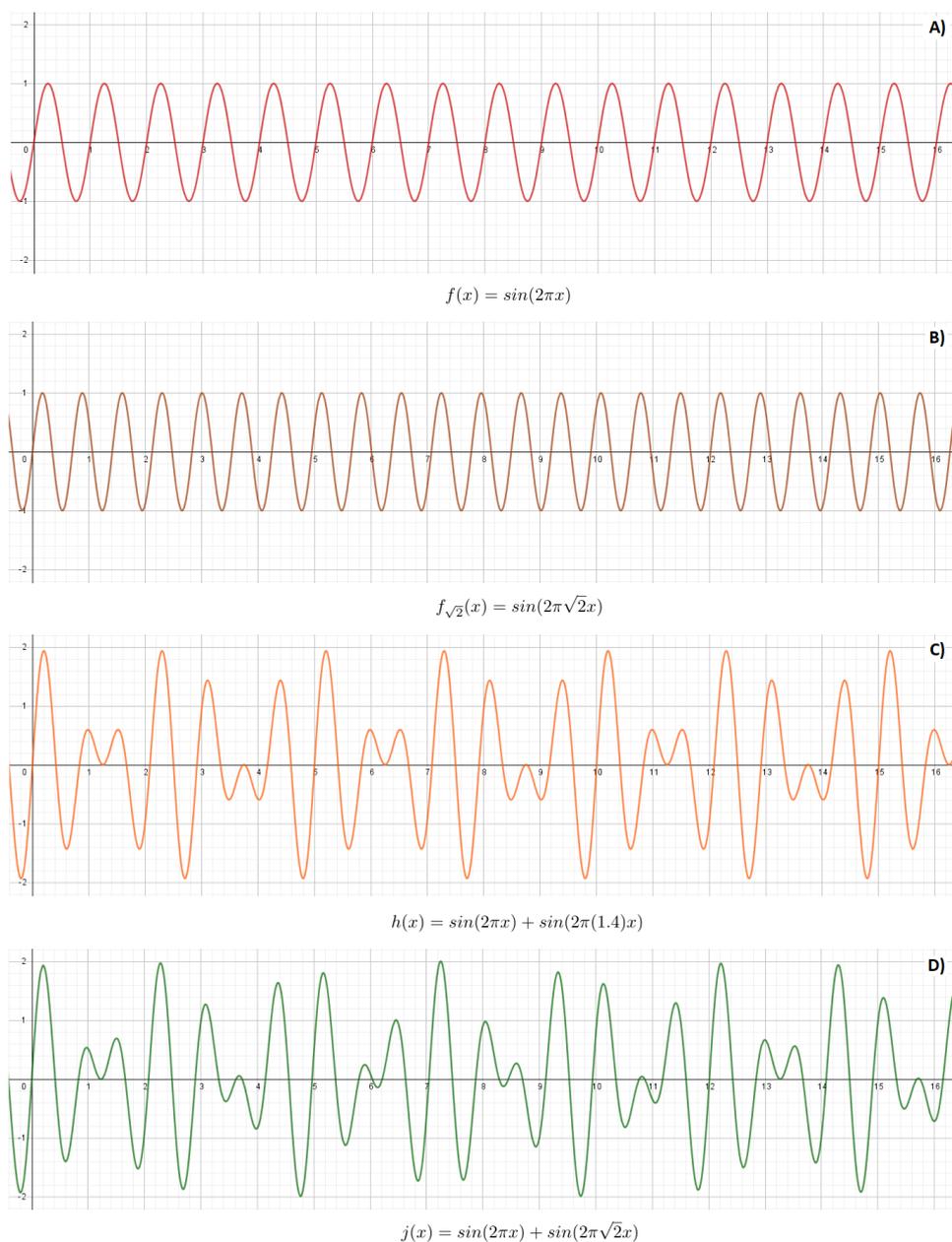
Una manera usual de interpretar esta definición es pensar en las funciones periódicas como aquellas para las cuales existe un segmento que se repite infinitamente a lo largo del espacio, algunos ejemplos de funciones periódicas son: la función trigonométrica  $f_a(x) = \sin(2\pi ax)$  con  $a$  una constante la cual es sabido tiene un periodo  $T = 1/a$ , por ejemplo con  $a = 1$  (que denotamos simplemente  $f(x)$ ) o con  $a = \sqrt{2}$  ( $f_{\sqrt{2}}(x) = \sin(2\pi\sqrt{2}x)$ ) la cual entonces posee un período  $T = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Véase la figura 2.1 A y B .

Uno puede pensar que la suma de funciones periódicas es a su vez una función periódica, lo cual en ocasiones es cierto, por ejemplo la función  $h(x) = \sin(2\pi x) + \sin(2\pi(1.4)x)$  para la cual su periodo es 5. En este último caso nótese que el periodo corresponde al mínimo periodo común entre ambas funciones trigonométricas que conforman a  $h(x)$  (Véase la figura 2.1 C). Sin embargo es posible construir funciones que

## 2. AMBIENTES CUASI-PERIÓDICOS

---

no son periódicas formadas por la suma de dos funciones periódicas, por ejemplo la función  $j(x) = \sin(2\pi x) + \sin(2\pi\sqrt{2}x)$  (Véase la figura 2.1 D).



**Figura 2.1:** Ejemplos de funciones periódicas: (A) [ $f(x) = \sin(2\pi x)$ ] con periodo  $T = 1$ ; (B) [ $g(x) = \sin(2\pi\sqrt{2}x)$ ] con periodo  $T = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ; (C) [ $h(x) = \sin(2\pi x) + \sin(2\pi(1.4)x)$ ] de periodo  $T = 5$ ; (D) función casi-periódica [ $j(x) = \sin(2\pi x) + \sin(2\pi\sqrt{2}x)$ ].

## 2.2. Definición de casi-periódico y cuasi-periódico

La función  $j(x)$  no es periódica, dado que no existe algún valor  $\tau \in \mathbb{R}$  tal que se satisfaga la relación  $j(x + \tau) = j(x)$  para toda  $x \in \mathbb{R}$ , no obstante podemos establecer la existencia de ciertos valores de  $\tau$  para los que esta ecuación se satisface aproximadamente con un grado arbitrario de precisión, es decir:

Para cada  $\epsilon > 0$  existe  $\tau \in \mathbb{Z}$  tal que  $\sqrt{2}\tau$  difiere de algún otro número entero en una cantidad menor que  $\epsilon$ . Por el teorema de Hurwitz existe un par de números  $p$  y  $q$  tales que cumplen la siguiente relación

$$\left| \xi - \frac{p}{q} \right| \leq \frac{1}{\sqrt{5}q^2} \leq \epsilon, \quad (2.1)$$

donde  $\xi$  es un número irracional arbitrario y el par de números  $p$  y  $q$  son primos relativos. Multiplicando la ecuación 2.1 por  $q$  y tomando el caso particular donde  $\xi = \sqrt{2}$  obtenemos la desigualdad deseada interpretando a  $q$  como  $\tau$ .

Para cada uno de estos números  $\tau$  se tiene que

$$\begin{aligned} j(x + \tau) &= \sin(2\pi\{x + \tau\}) + \sin(2\pi\sqrt{2}\{x + \tau\}) \\ &= \sin(2\pi x) + \sin(2\pi\sqrt{2}x + 2\pi\sqrt{2}\tau), \end{aligned}$$

realizando un desarrollo en series de Taylor hasta primer orden sobre el segundo sumando de la igualdad anterior en torno al punto  $2\pi\sqrt{2}x + 2\pi p$  con  $p$  el número entero dado por 2.1 tenemos

$$\begin{aligned} j(x + \tau) &\approx \sin(2\pi x) + \sin(2\pi\sqrt{2}x) + 2\pi\sqrt{2}\tau \\ &\leq j(x) + 2\pi\epsilon, \end{aligned}$$

donde  $2\pi\epsilon$  es un valor arbitrariamente pequeño [35] (aunque  $\tau$  crece inversamente proporcional a  $\epsilon$ ).

La función  $j(x)$  forma parte de un conjunto de funciones denominadas **funciones casi-periódicas** (almost periodic functions), las cuáles fueron estudiadas por el matemático danés Harald Bohr quien creó y desarrolló la teoría matemática para dichas funciones entre los años 1923 y 1925 [36].

Como se mencionó al inicio del capítulo, la función  $j(x)$  no es periódica, pero la distancia entre  $j(x)$  y  $j(x + \tau)$  puede ser tan pequeña como se desee (es decir, son **casi** iguales). Generalizando el comportamiento de nuestra función  $j(x)$  y de manera no tan formal decimos que una función  $F(x)$  es **casi-periódica** si cumple que para toda  $\epsilon > 0$  existe  $\tau \in \mathbb{R}$  tal que

$$|F(x + \tau) - F(x)| \leq \epsilon, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (2.2)$$

esta condición contiene la esencia de las funciones casi-periódicas salvo el hecho de que para valores de  $\epsilon$  no tan cercanos a cero el valor de  $\tau$  correspondiente podría crecer exponencialmente, lo cuál no queremos que ocurra. Para evitarlo pedimos que el conjunto de los  $\tau$  sea relativamente denso en  $\mathbb{R}$ .

Las nociones anteriores se formalizan de la siguiente manera:

- **Casi-periodo:** Sea  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  una función continua en  $\mathbb{R}$ .  $\tau = \tau_f(\epsilon) \in \mathbb{R}$  es llamado un número de traslación o un casi-periodo de  $f$  correspondiente a  $\epsilon > 0$  si  $|f(x + \tau) - f(x)| \leq \epsilon, \forall x \in \mathbb{R}$
- **Conjunto relativamente denso en  $\mathbb{R}$ :** Un subconjunto  $A \subset \mathbb{R}$  es relativamente denso en  $\mathbb{R}$ , si existe  $l > 0$  tal que cualquier intervalo de longitud  $l$  contiene al menos un número de  $A$ .

De esta forma, definimos a las funciones casi-periódicas como:

- **Función casi-periódica:** Una función continua  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$  es llamada casi-periódica, si dado  $\epsilon > 0$  el conjunto de todos los números de traslación de  $f$  correspondientes a  $\epsilon$  ( $\{\tau_f(\epsilon)\}$ ) es relativamente denso en  $\mathbb{R}$ . En otros términos, una función continua  $f$  es casi-periódica si dado  $\epsilon > 0$ , existe  $l = l(\epsilon) > 0$  tal que cualquier intervalo de longitud  $l$  contiene al menos un número de traslación  $\tau$  de  $f$  correspondiente a  $\epsilon$  [36].

### 2.2.1. Funciones Cuasiperiódicas

Un resultado conocido en el análisis de Fourier es que toda función continua puede ser expresada como una serie infinita de funciones armónicas con periodos distintos. Cuando la función de interés se obtiene a partir de una suma finita de dichas funciones armónicas el resultado puede ser periódico (como en el caso de nuestra función  $h(x)$ ) o casi-periódico (como la función  $j(x)$ ). Generalizando esta idea de funciones casi-periódicas obtenidas a través de sumas finitas de funciones periódicas (no necesariamente armónicas) para las cuales los periodos de todas ellas son inconmensurables entre sí, construimos una nueva categoría de funciones, a las cuales denominamos **funciones cuasi-periódicas** (quasi-periodic functions). Formalmente la definición de una función cuasi-periódica es:

- **Función cuasi-periódica:** Una función  $f(t)$  es cuasi-periódica si cumple que  $f(t) = F(t, \dots, t)$  para alguna función continua  $F(t_1, t_2, \dots, t_n)$  de  $n$  variables que es periódica con respecto a  $t_1, t_2, \dots, t_n$  con periodos  $T_1, T_2, \dots, T_n$  respectivamente. Todos los periodos  $T_1, T_2, \dots, T_n$  deben ser estrictamente positivos e inconmensurables entre sí.

Una definición equivalente se puede encontrar en [37].

Cabe resaltar que actualmente no existe consenso sobre la definición de funciones cuasi-periódicas, sin embargo para los fines del presente trabajo emplearemos la definición anterior.

## 2.3. Cuasicristales

La idea de que algunas estructuras aperiódicas pero ordenadas tuvieran lugar y jugaran un papel fundamental en la materia se encuentra presente desde el año 1944 en el cual Schrödinger publicó un libro acerca de varios procesos biológicos como la fecundación, la transmisión de genes, la división celular, entre otros, abordados desde la física. En él, Schrödinger plantea la idea de considerar a los genes y cromosomas como sólidos aperiódicos, los cuáles presentan un orden espacial bien definido sin tener una simetría traslacional, lo que permite que con pocos elementos se puedan generar grandes cantidades de combinaciones distintas de modo que se pueda codificar una mayor cantidad de información (en el sentido de Shannon) que si dichas estructuras fueran periódicas [38, 19].

Como un ejemplo acerca de estructuras ordenadas que carezcan de periodicidad pensemos en la sucesión de Fibonacci  $F = \{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, \dots\}$  la cual está definida por la regla de recursión  $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$  con  $F_1 = F_2 = 1$ ; el conjunto  $F$  es ordenado en el sentido de que existe un algoritmo determinista bien definido para generarlo a partir de dos valores iniciales fijos mientras que dicho conjunto carece de periodicidad.

Sin embargo, dichas ideas de Schrödinger no penetraron en el pensamiento de sus contemporáneos físicos, debido principalmente a que todas las estructuras atómicas conocidas hasta ese entonces podían clasificarse básicamente en dos tipos muy definidos: estructuras periódicas (cristales sólidos) y estructuras desordenadas o aleatorias (líquidos y gases).

Las estructuras cristalinas se caracterizaban por las siguientes propiedades [17]:

1. Tienen órdenes traslacionales de largo alcance con “separaciones” periódicas de celdas unitarias.
2. Tienen un parámetro de orden orientacional de largo alcance con una simetría correspondiente a subgrupos especiales cristalográficos discretos del grupo de rotación (representada por las 5 dos-dimensional (2D) y las 14 tres-dimensional (3D) retículas de Bravais).
3. Tienen un punto de simetría rotacional sujeto a los subgrupos especiales cristalográficos discretos.

## 2. AMBIENTES CUASI-PERIÓDICOS

---

Esto implica que los patrones de difracción asociados a los cristales (bajo la definición anterior) forman un patrón discreto y periódico en el espacio. Un patrón es periódico si puede ser subdividido en una cantidad infinita numerable de regiones congruentes con respecto a traslaciones tales que [39]:

- I Dos regiones diferentes no poseen puntos interiores en común y la unión de todas las regiones conforma al patrón.
- II Para cualesquiera dos regiones  $R_1$  y  $R_2$  existe una traslación que transforma a una en la otra, dejando el patrón inalterado.
- III No existen dos puntos dentro de cualquier región que sean equivalentes bajo traslaciones.

Por otro lado, las estructuras desordenadas no presentan ninguno de estos órdenes de largo alcance presentes en los cristales, dando lugar a patrones de difracción difusos.

Una de las principales consecuencias de definir a los cristales como aquellos cuyas estructuras satisfacen las características anteriores es que resulta imposible que un cristal posea un patrón de difracción con simetría rotacional de orden  $N$  con  $N > 6$  o  $N = 5$  [39].

En 1984 Levine y Steinhardt [40] (basándose en los resultados obtenidos por Shechtman, Blech, Gratias y Cahn sobre el patrón de difracción de electrones en una aleación de Aluminio y Manganeso (86 % Al, 14 % Mn) al ser rápidamente enfriada, el cuál presentaba un patrón de difracción discreto con una simetría icosaédrica [18]) propusieron un nuevo tipo de estructura atómica, la cuál denominaron estructura cuasicristalina, asociada a una nueva fase del estado sólido a la cuál bautizaron como cuasicristal. Las propiedades a partir de las cuales definieron a la retícula de un cuasicristal simple son:

1. La distancia entre dos puntos cualesquiera de la retícula es mayor que algún parámetro  $r > 0$ .
2. Dado un punto cualquiera en la retícula, existe otro punto en dicha retícula a una distancia menor o igual que  $R > 0$ .
3. La retícula es autosemejante en el sentido de que es posible eliminar un subconjunto de puntos de la retícula y obtener otra retícula de un cuasicristal simple en el que la distancia entre vecinos cercanos se ha incrementado por un factor constante.
4. La retícula tiene un parámetro de orden orientacional de largo alcance.
5. La retícula tiene un orden traslacional cuasi-periódico con  $k$  “separaciones” linealmente independientes (inconmensurables entre sí) a lo largo de cada dirección de la retícula. Bajo esta idea una retícula periódica corresponde a una  $k = 1$ .

Debido al creciente número y variedades de cuasicristales reportados tras las publicaciones de Shechtman, Levine y Steinhardt, la Unión Internacional de Cristalografía (IUC por sus siglas en inglés) modificó en 1991 las definiciones de cristal y cuasicristal, quedando de la siguiente manera:

“A partir de ahora, entenderemos por cristal cualquier sólido cuyo patrón de difracción sea discreto, siendo un cristal aperiódico [entre ellos los cuasicristales] cualquier cristal cuya red tridimensional carezca de periodicidad.” [41]

Cabe destacar que la definición de cuasicristal dada por la IUC habla sobre la red tridimensional en su totalidad, por lo cual es posible que un cuasicristal presente simetría traslacional en alguna de sus dimensiones (véase [19]), es decir, que la red atómica del cuasicristal sea periódica en una o dos dimensiones.

Las propiedades y características de los cuasicristales (y en general de los sistemas aperiódicos) son un tema abierto. Una de las preguntas fundamentales que están aún en desarrollo sobre los sistemas aperiódicos versa sobre la relación entre el orden topológico a nivel atómico de estos sistemas y las propiedades físicas que se derivan de dicha estructura atómica; por ejemplo, pese a que los cuasicristales sólidos están compuestos en su gran mayoría por elementos metálicos, su resistividad eléctrica es considerablemente alta (a bajas temperaturas, alrededor de los  $30K$ ) y esta aumenta de manera uniforme a medida que la temperatura del cuasicristal aumenta, comportamiento asociado a materiales semiconductores [19, 20, 21].

Otra de las características inusuales de los cuasicristales referente a los fenómenos de transporte consiste en su baja conductividad térmica, llegando a ser incluso menor en algunos casos que la conductividad térmica de aislantes empleados en la industria aeronáutica como los carburos de titanio, y su extremadamente baja difusión térmica, siendo menor que la asociada al óxido de zirconio. Lo anterior los hace buenos candidatos para ser empleados en la fabricación de barreras térmicas [19].

Por otro lado, los cuasicristales generalmente presentan una dureza alta (similar a la del dióxido de silicio, el cual ocupa la posición 7 en la escala de Mohs), energía superficial baja y poca fricción; estas propiedades posibilitan su uso en utensilios de cocina como un recubrimiento similar al Teflón, donde si bien Dubois hace hincapié en que los cuasicristales basados en aluminio no son mejores antiadherentes que el Teflón, gracias a su dureza resultan más resistentes al uso de cuchillos o similares [22, 19]. En particular, la compañía francesa Sitram elaboró por un tiempo sartenes basadas en cuasicristales, sin embargo esta compañía cerró la producción debido a problemas presentes en sus sartenes con el uso de la sal [23].

Otras posibles aplicaciones de los cuasicristales en la industria son su uso como catalizadores (cuasicristales formados por una aleación de aluminio con paladio para

separar al metanol) o como recubrimientos resistentes al desgaste para partes mecánicas [22].

### 2.4. Métodos de construcción

Uno de los principales problemas que surgieron al momento de querer desarrollar una teoría matemática sobre las estructuras y propiedades topológicas de los cuasicristales fue el determinar el modelo adecuado para estudiarlos. El modelo con mayor aceptación actualmente es el de asociar a su estructura atómica una retícula cuasi-periódica (aquella que está dada por una función de distribución discreta y cuasi-periódica) para la distribución espacial de sus átomos.

Generar estas retículas no es trivial como en el caso de las retículas periódicas. Para estos fines existen varios métodos con los cuales construir retículas cuasi-periódicas, entre ellos los métodos más famosos son: los métodos de proyección (de particular interés para este trabajo el denominado método de corte y proyección), el método de inflación/deflación y el método dual generalizado. A continuación se expone el método de corte y proyección.

#### 2.4.1. Método de corte y proyección

El contenido de los siguientes párrafos en los que se desarrolla parte de la teoría matemática en la que se basa el método de corte y proyección, así como el método mismo, corresponden al libro “Quasicrystals and geometry” del autor Marjorie Senechal [39].

La idea base para generar retículas cuasi-periódicas requiere pensar en dimensiones mayores a la de la retícula que queremos generar debido a la definición de funciones cuasi-periódicas, las cuales están formadas por más de una función periódica, con lo cual podemos interpretar a la dimensión de nuestra red<sup>1</sup> cuasi-periódica como el número de funciones periódicas que requerimos para generar la función cuasi-periódica que generará a nuestra red.

Para el caso más sencillo posible pensemos en la retícula bidimensional cuadrada y una partícula desplazándose en línea recta sobre el plano que la contiene. Debido a que la separación de los puntos que conforman esta lattice es igual en ambos ejes coordenados, la periodicidad del movimiento de la partícula sobre el plano recae únicamente en las proyecciones de la velocidad sobre los ejes coordenados. De esta manera, si las proyecciones de la velocidad son incomensurables entre sí, es decir que la pendiente de la recta que sigue la partícula es irracional, podemos pensar en el movimiento que

---

<sup>1</sup>Se utilizará como sinónimos a lo largo del texto las palabras retícula, red y lattice.

describe la partícula con respecto al vértice más cercano en la retícula como la suma de dos movimientos periódicos con periodos inconmensurables entre sí, es decir, una función cuasi-periódica.

Notemos que hasta ahora, esto nos genera una función cuasi-periódica continua, sin embargo queremos generar una retícula, por lo cual estamos interesados en funciones cuasi-periódicas discretas. Con la función generada hasta ahora podemos seleccionar un subconjunto de puntos de dicha función, correspondiente a los mínimos locales de la función, este conjunto corresponderá a los vértices de nuestra red cuasi-periódica unidimensional. El conjunto de puntos formado al tomar los mínimos locales de nuestra función cuasi-periódica continua es equivalente a considerar la proyección de los vértices más cercanos a la línea que describe la partícula al desplazarse.

Este método de selección de los vértices de la red que proyectaremos a la trayectoria de la partícula es equivalente a considerar a los vértices que conforman a los centros de los polígonos de Voronoi formados a partir de la retícula periódica dos dimensional por los cuales pasa la trayectoria de la partícula. Esto a su vez es equivalente [32] a considerar aquellos vértices de la retícula periódica bidimensional que caen dentro de una banda formada por el producto cruz de la trayectoria y la proyección de un cuadrado de lado uno centrado en el origen sobre el espacio ortogonal a la trayectoria de la partícula.

Podríamos no sólo haber tomado la proyección de los vértices más cercanos, sino también considerar a los vértices más cercanos y a los segundos más cercanos o, incluso, generalizar esta línea de pensamiento a todos aquellos vértices que se encuentren dentro de una banda determinada formada por el producto cruz de la trayectoria y cualquier otra figura en el espacio ortogonal a dicha trayectoria.

Todo lo anterior es la motivación del método de corte y proyección; sin embargo nótese que hasta ahora hemos empleado términos como retícula, proyección ortogonal o discreto basándonos en la idea intuitiva de dichos conceptos. Procedemos ahora a definirlos de manera formal con la intención de poder implementar un algoritmo computacional más adelante.

- **Definición 2.4.1.1:** Sea  $G$  un grupo de transformaciones actuando sobre un “objeto matemático”  $M$ . ( $M$  puede ser todo el espacio euclidiano de  $n$  dimensiones ( $E^n$ ), un objeto geométrico como un cubo o incluso  $G$  mismo). Sea  $x$  un punto de  $M$ .

La órbita de  $x$  bajo  $G$  se define como el conjunto:

$$O_G(x) = \{gx \in M | g \in G\}.$$

- **Definición 2.4.1.2:** Sean  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k \in E^n$  un conjunto de vectores. Al grupo infinito numerable generado por estos vectores bajo la suma usual, de modo que

los elementos del grupo sean de la forma  $\vec{x} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + \dots + m_k\vec{b}_k$  con  $m_i \in \mathbb{Z}$  se le denomina módulo  $Z$ .

- **Definición 2.4.1.3:** Sea  $\Omega$  la órbita de un módulo  $Z$  generado por los vectores  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k \in E^n$ . Si el rango de  $\Omega$  es igual a la dimensión del subespacio generado por los vectores  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k$  decimos que  $\Omega$  es una retícula.

En lo subsiguiente denotaremos por “retícula puntual” ( $\mathbb{L}^p$ ) a una órbita generada por un módulo  $Z$  cuyos vectores generadores sean linealmente independientes, mientras que usaremos el término “retícula” ( $\mathbb{L}$ ) para referirnos al módulo  $Z$ .

- **Definición 2.4.1.4:** Sean  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \dots, \vec{b}_k$  una base para  $\mathbb{L}$ . Definimos a la norma  $N(\vec{b}_i)$  de  $\vec{b}_i$  como:

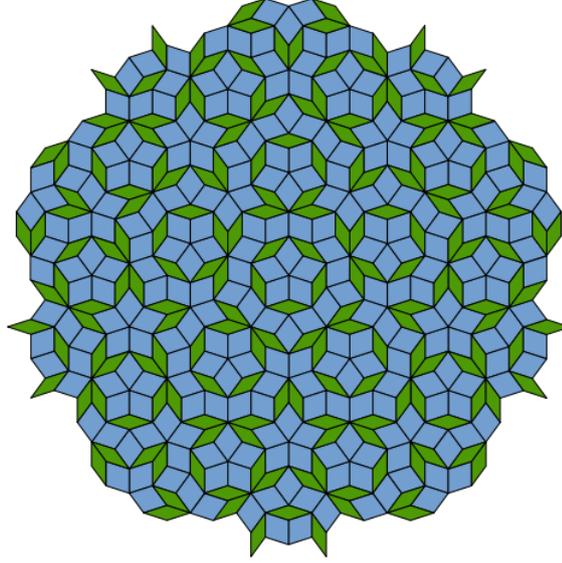
$$N(\vec{b}_i) = |\vec{b}_i|^2 = \vec{b}_i \cdot \vec{b}_i,$$

con  $\cdot$  el producto punto usual.

- **Definición 2.4.1.5:** Decimos que  $\mathbb{L}$  es una retícula entera si, para todo  $\vec{x} \in \mathbb{L}$ ,  $N(\vec{x}) \in \mathbb{Z}$ .
- **Definición 2.4.1.6:** Sea  $\mathbb{L}$  una retícula entera y  $\varepsilon$  cualquier subespacio  $k$ -dimensional de  $E^n$  donde  $0 < k < n$ . Si  $\varepsilon \cap \mathbb{L} = \{0\}$  entonces se dice que  $\varepsilon$  es totalmente irracional.
- **Definición 2.4.1.7:** Sea  $P_L$  un mapeo de un espacio de Hilbert  $H$  a un subespacio  $L$  de  $H$ . Si el mapeo es tal que  $x - P_L(x)$  es ortogonal a  $P_L(x)$  (es decir,  $x - P_L(x) \perp P_L(x)$ ) con  $x \in H$ , se dice que el mapeo  $P_L$  es un proyector ortogonal de  $H$  a  $L$  [42].
- **Definición 2.4.1.8:** Sea  $\Lambda \subset E^n$  un conjunto de puntos. Se dice que  $\Lambda$  es discreto si existe algún número real  $r_0 > 0$  tal que para todo  $x, y \in \Lambda$  se cumple  $|x - y| \geq 2r_0$ .
- **Definición 2.4.1.9:** Un conjunto de puntos  $\Lambda$  es relativamente denso en  $E^n$  si existe algún número real  $R_0$  tal que toda esfera de radio mayor que  $R_0$  en  $E^n$  contiene al menos un punto de  $\Lambda$  en su interior.
- **Definición 2.4.1.10:** Un conjunto de puntos  $\Lambda \subset E^n$  tal que sea discreto y relativamente denso en  $E^n$  se denomina como conjunto de Delone.

Con el método de corte y proyección discutido previamente es posible generar arreglos cuasiperiódicos de dimensión arbitraria tales como el conocido teselado de Penrose (véase la figura 2.2) que incluso se encuentra en cuasicristales reales.

Sea  $\varepsilon$  un subespacio  $d$ -dimensional totalmente irracional de  $E^n$  y sea  $\varepsilon^\perp$  su complemento ortogonal ( $\varepsilon^\perp$  puede o no ser totalmente irracional). Sea  $\Pi$  el proyector ortogonal a  $\varepsilon$  y  $\Pi^\perp$  el proyector ortogonal a  $\varepsilon^\perp$ . Dado que  $\Pi$  y  $\Pi^\perp$  son mapeos lineales, entonces



**Figura 2.2:** Teselación de Penrose en el plano dos dimensional. Imagen obtenida de Wikipedia [43].

$\Pi(\mathbb{L}^p)$  y  $\Pi^\perp(\mathbb{L}^p)$  son órbitas de los módulos  $Z$  en  $\varepsilon$  y  $\varepsilon^\perp$  respectivamente, generados por las proyecciones de cualquier base para  $\mathbb{L}^p$  en dichos subespacios.

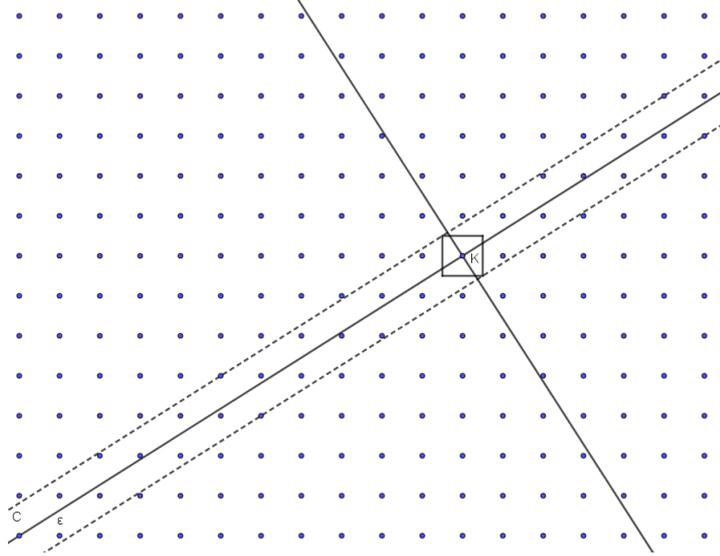
Dado que el conjunto de puntos  $\Pi(\mathbb{L}^p)$  es denso en  $\varepsilon$ ,  $\Pi(\mathbb{L}^p)$  no es un conjunto de Delone (los conjuntos en los que estamos interesados para modelar a los cuasicristales son precisamente conjuntos de Delone). Para obtener uno que sí lo sea debemos seleccionar un subconjunto de puntos de  $\mathbb{L}^p$  para proyectarlos sobre  $\varepsilon$ .

Sea  $K \subset \varepsilon^\perp$  un subconjunto compacto tal que  $K \cap \mathbb{L}^p \neq \phi$ , llamaremos a  $K$  el dominio de aceptación para la proyección. El subconjunto de puntos de  $\mathbb{L}^p$  que proyectaremos sobre  $\varepsilon$  serán aquellos puntos  $x \in \mathbb{L}^p$  tales que  $\Pi^\perp(x) \in K$ . Estos puntos son aquellos que caen dentro del cilindro  $C = K \oplus \varepsilon$  (Véase la figura 2.3).

- **Proposición 2.3.1.1:** Sea  $X = C \cap \mathbb{L}^p$ . El conjunto de puntos  $\Pi(X)$  es un conjunto de Delone.

*Demostración:* Debemos mostrar que el conjunto  $\Pi(X)$  es discreto y relativamente denso en  $\varepsilon$ . Para probar el que sea discreto basta con mostrar que hay una vecindad alrededor del origen en  $\varepsilon$  que no contiene ningún otro punto de  $\Pi(X)$  más que el origen. Sea  $x \in X$  y supongamos que  $\Pi(x)$  cae en  $B_0(c)$ , la bola de radio  $c > 0$  alrededor del origen. Dado que

$$|x|^2 = |\Pi(x)|^2 + |\Pi^\perp(x)|^2,$$



**Figura 2.3:** Ejemplo del cilindro  $C$  determinado por el dominio de aceptación  $K$  para una proyección de una retícula integral en dos dimensiones a un subespacio  $\varepsilon$  totalmente irracional de una dimensión. Imagen creada en el software **Paint**.

y que el conjunto  $\Pi^\perp(X)$  es un conjunto acotado por hipótesis,  $\Pi(x)$  debe caer en una esfera de radio finito  $m > 0$  alrededor del origen. Dado que  $\mathbb{L}^p$  es discreta (pues estamos suponiendo que nuestra retícula  $\mathbb{L}$  es integral) entonces  $\mathbb{L}^p \cap B_0(m)$  es un subconjunto finito  $U \subset \mathbb{L}^p$ . Por lo anterior, el conjunto de puntos  $\Pi(U)$  es finito y para algún valor  $r > 0$  tenemos que  $\Pi(U) \cap B_0(r) = \{0\}$ .

La densidad relativa es inmediata debido a que  $\mathbb{L}^p$  es relativamente densa en  $E^n$  y por lo tanto en el cilindro  $C$ .

- **Proposición 2.3.1.2:** Si  $\varepsilon$  es totalmente irracional, entonces  $\Pi(X)$  es no periódico.

*Demostración:* Descompongamos a  $\varepsilon^\perp$  en los subespacios  $V$  y  $W$  tal que  $\varepsilon^\perp = V \oplus W$ . Dado que  $\Pi^\perp(\mathbb{L})$  es uno a uno y la dimensión de  $\varepsilon^\perp < n$ , el subespacio  $V$  es no trivial y la restricción de  $\Pi$  a  $(V \oplus \varepsilon) \cap \mathbb{L}$  es uno a uno puesto que  $\Pi^\perp((V \oplus \varepsilon) \cap \mathbb{L})$  es denso en  $V$ . Entonces, dado que  $K \cap \mathbb{L}^p \neq \emptyset$ ,  $(K \cap V) \cap \Pi^\perp(\mathbb{L})$  es denso en  $K \cap V$ . Definamos  $X_V = ((K \cap V) \oplus \varepsilon) \cap \mathbb{L}$ . Si  $\Pi(X_V)$  es periódico entonces  $X_V$  lo es. Sin embargo,  $X_V$  no puede ser periódico pues  $K$  es compacto y por lo tanto no puede contener todos los múltiplos enteros de cualquier vector. Así, siendo que  $(K \cap W) \cap \Pi^\perp(\mathbb{L})$  es finito, entonces  $X$  y por lo tanto  $\Pi(X)$  no puede ser periódico.

De esta forma tenemos un método relativamente sencillo de generar retículas  $k$  dimensionales cuyo conjuntos de puntos son un conjunto de Delone no periódicos al

proyectar subconjuntos de otras retículas integrales en  $n$  dimensiones con  $k < n$ .



---

## Capítulo 3

# Gases de Lorentz

---

Un gran porcentaje de los sistemas físicos puede describirse en términos de un Hamiltoniano el cual contiene, en principio, toda la información del sistema y cómo evoluciona en el tiempo. Estos sistemas que pueden describirse en términos de hamiltonianos son bajo ciertas condiciones equivalentes a los denominados billares matemáticos [44].

Cuando hablamos coloquialmente de un billar nos referimos al juego consistente en una mesa rectangular con paredes rígidas y una determinada cantidad de esferas sobre ella, las cuales son impactadas por un taco lo que les proporciona un momento, con lo que eventualmente dichas esferas colisionarán con las paredes de la mesa de manera especular (sigue la ley de Snell de la reflexión). Esto en esencia, es lo que entendemos por un billar matemático: Una mesa por la que se desplaza una partícula de modo que las colisiones con dicha mesa son especulares.

Considérese un sistema mecánico compuesto por  $N$  partículas y un conjunto de obstáculos en  $\mathbb{R}^d$ . Sea  $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)$  y  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$  los vectores que determinan los puntos en el espacio fase de nuestro sistema siendo  $\mathbf{q}_i$  el vector de dimensión  $d$  asociado a la posición de la partícula  $i$  y  $\mathbf{p}_i$  el vector de dimensión  $d$  asociado al momento de la partícula  $i$ .

Entendemos por billares a aquellos sistemas dinámicos conservativos en los que el movimiento de las partículas entre obstáculos está definido por una función hamiltoniana

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N),$$

y para los cuales el punto  $\mathbf{X} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$  en el espacio fase se somete a colisiones elásticas. En la ecuación previa  $V(\mathbf{q})$  es un potencial de interacción entre las partículas que frecuentemente es cero [44].

### 3. GASES DE LORENTZ

---

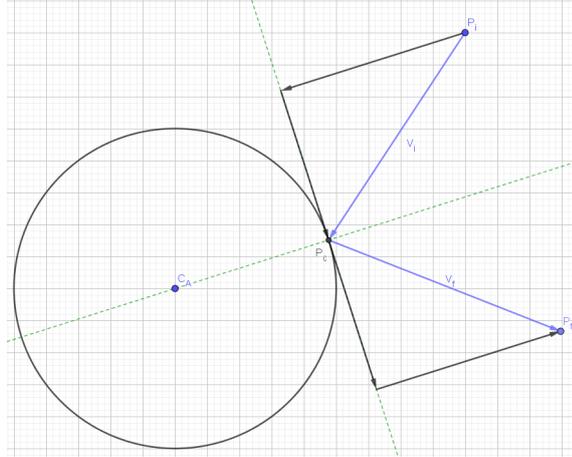
Un ejemplo de billar es el denominado gas de Lorentz, propuesto por H. A. Lorentz en 1905, el cual ha servido como base para el estudio de diversos problemas tanto matemáticos como físicos en los cuáles se ven involucrados fenómenos de transporte, dispersión, sistemas dinámicos, probabilidad, etc. Para su desarrollo Lorentz tomó la idea generada por los trabajos de Riecke, Drude y J. J. Thomson de que algunos fenómenos de conducción presentes en los metales como lo son las corrientes termoeléctricas, el efecto Thomson, el efecto Hall, etc. “pueden ser explicados a partir de la hipótesis de que un metal contiene una gran cantidad de electrones libres y que estas partículas, partícipes en la conducción de calor del cuerpo, se mueven de un lado a otro con una velocidad que depende de la temperatura.”[6]

Con el objetivo de generar un modelo que explicara estos fenómenos de conducción, Lorentz supuso las siguientes hipótesis:

1. Todos los electrones presentes en el metal son idénticos, con una carga  $e$  y una masa  $m$ , los cuales se mueven de manera tal que su energía cinética promedio está determinada por  $aT$ , donde  $a$  es una constante y  $T$  es la temperatura absoluta del metal.
2. Las colisiones entre los electrones y los átomos del metal predominan por encima de las posibles colisiones entre electrones, por lo cual estas últimas son despreciables para los efectos generales de los fenómenos de conducción.
3. Para los efectos de colisión entre átomos y electrones ambas partículas son consideradas como esferas rígidas, además la posición de los átomos es inamovible.

Debido a que la posición de los átomos es inamovible ante las colisiones de los electrones con ellos, el cambio en la velocidad que sufre un electrón tras colisionar con un átomo está dado por la siguiente regla: Coloquemos un sistema de referencia centrado en el punto de colisión entre el átomo y el electrón, si descomponemos la velocidad del electrón justo al momento de la colisión en una componente a lo largo de la línea que une los centros del electrón y del átomo y en otra componente ortogonal a dicha línea, esta última se mantiene sin cambio alguno mientras que la componente que cae sobre la línea que pasa por los centros del átomo y del electrón ve invertida su dirección (Véase la imagen 3.1). Esto es equivalente a la reflexión especular [6].

A partir de estas hipótesis Lorentz trabajó sobre la deducción de las fórmulas para la conductividad eléctrica  $\sigma$  y la conductividad de calor  $k$  en metales, sin embargo una de las hipótesis realizadas por Lorentz de manera implícita en sus cálculos fue el considerar que la densidad espacial de los átomos en los materiales es baja, lo cual no es una hipótesis válida. Pese a que el enfoque original de Lorentz de considerar a los átomos de un sólido como los obstáculos con los cuales los electrones colisionan resulta erróneo en la implementación de su modelo, el reinterpretar a los obstáculos como algún otro elemento del sistema, por ejemplo defectos del material, permite emplear de manera

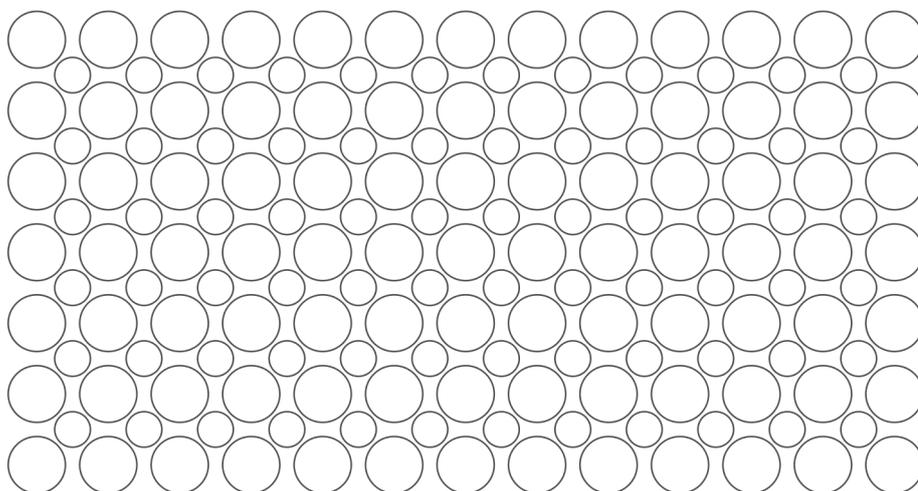


**Figura 3.1:** Ejemplo dos dimensional del cambio en la velocidad que sufre una partícula tras colisionar de manera especular con un obstáculo circular. El punto  $C_A$  corresponde al centro del obstáculo circular mientras que el punto  $P_C$  es el punto de colisión de la partícula con el obstáculo. En morado se muestran las velocidad inicial y final ( $V_i$  y  $V_f$  respectivamente) de la partícula antes y después de la colisión.

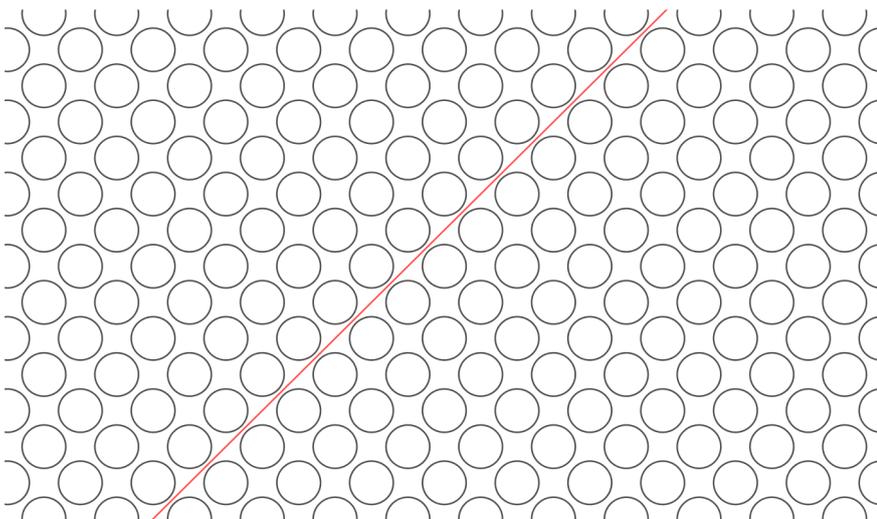
válida el modelo a diferentes fenómenos físicos [26].

Uno de los conceptos importantes para estudiar las propiedades de transporte en los billares (en particular de los gases de Lorentz) es el concepto de **horizonte**. Si en una distribución espacial dada de los obstáculos de un billar existen trayectorias de la partícula tales que esta no colisiona con algún obstáculo para tiempos de vuelo arbitrariamente grandes, se dice que dicho billar tiene un **horizonte infinito** (véase la figura 3.2 B)). Por otro lado, si dada la distribución espacial de los obstáculos en un billar toda trayectoria posible para la partícula implica que esta eventualmente colisione con algún obstáculo, se dice que dicho billar tiene un **horizonte finito** (véase la figura 3.2 A)). Para distribuciones espaciales aperiódicas de los obstáculos en un billar existe una tercera posibilidad en la que no hay trayectorias sin colisiones con obstáculos ni una cota superior para el tiempo de vuelo antes de la primera colisión, estos billares se dice que presentan un **horizonte localmente finito** [26].

Para visualizar esta tercera posibilidad pensemos en un cubo con condiciones periódicas a la frontera y un cilindro totalmente irracional (bajo las definiciones vistas en el capítulo 2) cuyo eje de simetría pasa por el centro del cubo, debido a las condiciones periódicas del cubo esto generará que haya tres segmentos de cilindro contenidos dentro del cubo (véase la figura 3.3 (a)). Si constreñimos a la partícula para que se desplace únicamente en algún plano paralelo a las caras verticales del cubo y el radio de los cilindros es lo suficientemente pequeño, aparecen regiones del espacio en las cuales la

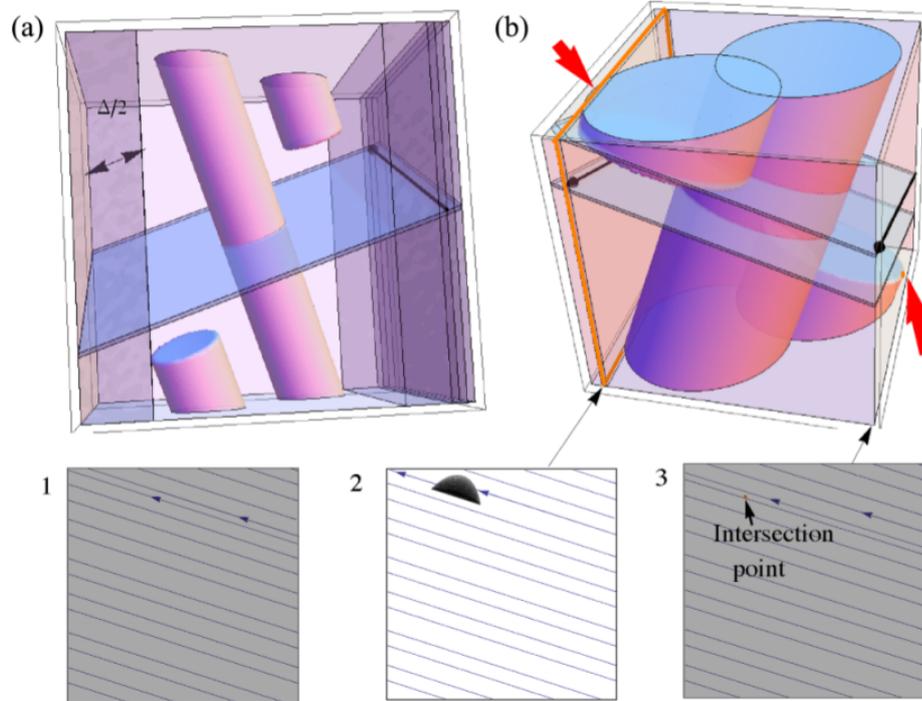


A)



B)

**Figura 3.2:** Ejemplo de distribuciones espaciales de los obstáculos en gases de Lorentz periódicos. En la imagen **A)** el gas de Lorentz presenta un horizonte finito mientras que en la imagen **B)** el gas de Lorentz posee un horizonte infinito, siendo la recta en color rojo una posible trayectoria para la partícula de modo que esta no colisione nunca con algún obstáculo.



**Figura 3.3:** Trayectoria de una partícula constreñida a moverse en un plano paralelo a una de las caras del cubo para el caso en el que el plano ortogonal al eje del cilindro es totalmente irracional. La trayectoria de la partícula dentro de un canal representado en (a) llena de manera densa la cara del cubo, representada en (1) como un fondo gris con parte de su trayectoria resaltada en líneas negras. Si los canales se bloquean (b), la trayectoria puede seguir llenando densamente la cara del cubo (3) o puede volverse tal que tarde un tiempo finito antes de colisionar con un obstáculo si la partícula se mueve en un plano paralelo a una cara del cubo (2), dado que colisiona con un segmento de elipse (mostrada en negro) resultado de la intersección del cilindro con el plano. Las flechas rojas en la figura (b) muestran la intersección de los planos con el cilindro. La flecha de abajo muestra sólo un punto mientras que la otra muestra una región de intersección. Imagen obtenida de [33] con autorización del autor.

partícula no colisionará con ningún obstáculo, por ejemplo la región sombreada en 3.3 (a). Debido a las condiciones periódicas a la frontera si la partícula tiene una velocidad cuya pendiente sea irracional entonces la proyección de su trayectoria sobre la cara vertical del cubo llenará densamente a dicha cara (véase la figura 3.3 1).

Si aumentamos el radio de los cilindros llegaremos a una situación en la que toda trayectoria de la partícula colisionará en algún momento con algún obstáculo (véase la figura 3.3 (b)), sin embargo tenemos dos posibilidades en este escenario: Que la intersección del plano de movimiento con los obstáculos tenga medida diferente de cero (por ejemplo el plano señalado por la flecha roja superior en 3.3 (b)) en cuyo caso la proyección de la trayectoria de la partícula sobre la cara vertical del cubo será finita antes de colisionar con el obstáculo por primera vez (véase la figura 3.3 2) o bien, que la intersección del plano de movimiento con los obstáculos tenga medida cero (por ejemplo el plano señalado por la flecha roja inferior en 3.3 (b)) caso para el cual la proyección de la trayectoria de la partícula sobre la cara vertical del cubo llena a esta última de manera densa, debido a que la probabilidad de que se de la colisión es cero (véase la figura 3.3 3). Es este último caso el que asociamos a un horizonte localmente finito [33].

Dependiendo del problema que se desea abordar se han considerado diferentes configuraciones y variaciones del modelo originalmente propuesto por Lorentz; tales variaciones están relacionadas a las dimensiones espaciales del problema, el arreglo espacial de los obstáculos, la trayectoria que describen las partículas, entre otras. Algunas de dichas variaciones se presentan en las siguientes secciones.

#### 3.1. Gases de Lorentz periódicos

Como su nombre lo indica, los gases de Lorentz periódicos son aquellos gases de Lorentz cuya distribución espacial de sus obstáculos está dada por los vértices de una retícula periódica. Como veremos más adelante en el caso de una retícula cuadrada un gas de Lorentz es equivalente a un gas de dos esferas duras, el cual es el sistema dinámico más simple que involucra más de una partícula.

En el desarrollo de la mecánica estadística, Ludwig Boltzmann utilizó como base fundamental una hipótesis sobre el comportamiento de sistemas dinámicos con muchas partículas, denominada la hipótesis de ergodicidad de Boltzmann. Sin embargo, queda la pregunta de a partir de cuántas partículas es válida dicha hipótesis ¿será acaso que a partir de dos partículas esta hipótesis sea válida?

De manera formal dicha hipótesis puede escribirse como:

- **Hipótesis de ergodicidad de Boltzmann:** Para sistemas de muchas partículas que interactúan en equilibrio, los promedios temporales (considerando un tiempo que tiende infinito) tienden a los promedios de ensamble [2].

Para interpretar de manera adecuada el enunciado anterior, analicemos cada uno de los conceptos empleados en él. En palabras de Sergio Alejandro Cannas:

Un sistema Hamiltoniano define un flujo en el espacio de las fases  $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ . Sea una función arbitraria  $f(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ . Se define el promedio temporal de la función  $f$  como

$$\langle f \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} f(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) dt,$$

esto es, el promedio a lo largo de una trayectoria. Por otra parte, el promedio de ensamble de la función  $f$  viene dado por

$$\langle f \rangle = \int f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q} d\mathbf{p} = \frac{1}{\Gamma(E)} \int_{E \leq H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \leq E+\Delta} f(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q} d\mathbf{p},$$

donde  $\rho$  es la densidad de probabilidad y  $\Gamma(E)$  es el volumen ocupado por la superficie de nivel con energía  $E$  en el espacio fase del sistema.

De este modo, un sistema es ergódico si para casi toda trayectoria  $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$  (excepto por un conjunto de medida nula) se cumple que  $\langle f \rangle_T = \langle f \rangle$ .

Tomemos un volumen arbitrariamente pequeño  $R$  sobre una “superficie”<sup>1</sup> de nivel con energía constante en el espacio fase de nuestras variables  $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  y sea  $\tau_R$  el tiempo que el sistema pasa en dicho volumen.

Sea  $\phi_R(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  una función auxiliar tal que

$$\phi_R(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \begin{cases} 1 & \text{si } (\mathbf{q}, \mathbf{p}) \in R \\ 0 & \text{caso contrario} \end{cases},$$

De este modo, tenemos que

$$\tau_R = \int_{t_0}^{t_0+T} \phi_R(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t)) dt,$$

y si el sistema es ergódico se cumple la igualdad

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\tau_R}{T} = \langle \phi_R \rangle_T = \frac{1}{\Gamma(E)} \int_{E \leq H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \leq E+\Delta} \phi_R(\mathbf{q}, \mathbf{p}) d\mathbf{q} d\mathbf{p} = \frac{\Gamma(R)}{\Gamma(E)},$$

donde  $\Gamma(R)$  es el volumen ocupado por  $R$  en la “superficie” de nivel con energía constante en el espacio fase. Es decir, si el sistema es ergódico, la fracción de tiempo que el

<sup>1</sup>En general la dimensión de esta “superficie” puede ser mayor a dos.

sistema pasa en una región cualquiera depende sólo de su volumen y no de su posición en dicha “superficie”. Así, el sistema recorre de manera uniforme toda la “superficie”.

Este resultado acerca de que en un sistema aislado en equilibrio todos los microestados accesibles al sistema son igualmente probables es fundamental para el desarrollo y la construcción de la mecánica estadística, sin embargo hasta nuestros días son muy pocos los sistemas para los cuales se ha demostrado que son ergódicos [45].

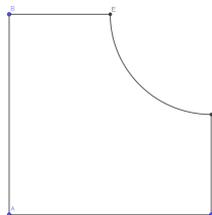
#### 3.1.1. Billar de Sinai

En 1963, tras los trabajos realizados por Gustav Hedlund y Eberhard Hopf sobre la ergodicidad de los sistemas dinámicos cuyo comportamiento es hiperbólico en variedades compactas de curvatura negativa, Sinai formuló una versión más fuerte de la hipótesis de ergodicidad de Boltzmann para el caso particular de sistemas compuestos por esferas elásticas y duras.

- **Hipótesis de ergodicidad de Boltzmann-Sinai:** Los sistemas de  $N$  esferas duras en  $\mathbb{T}^2$  o  $\mathbb{T}^3$  son ergódicos para  $N \geq 2$ .

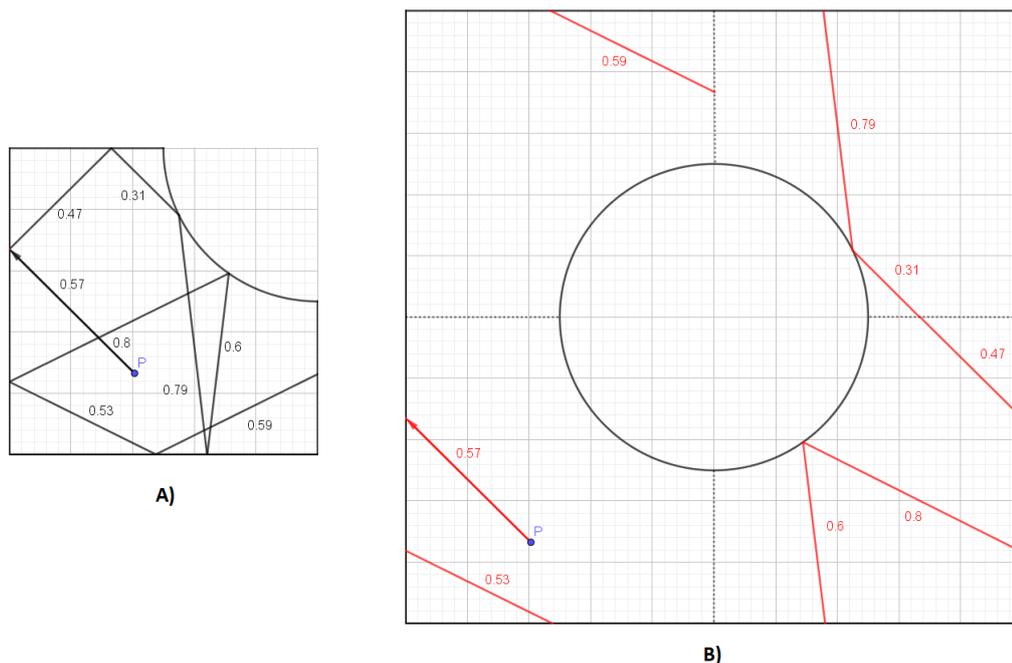
donde  $\mathbb{T}^2$  y  $\mathbb{T}^3$  son los toros unitarios bidimensional y tridimensional respectivamente [2]. Esta nueva hipótesis quita la restricción de que la ergodicidad sólo se alcanza para sistemas con muchas partículas, aunque se restringe a los casos en que el sistema está contenido en un toro. Pese a ser una hipótesis, Sinai logró demostrar su veracidad para el caso particular de  $N = 2$  en un toro bidimensional.

La geometría del sistema estudiado por Sinai consiste en un cuadrado de lado  $L$  al cual se le retira la intersección de dicho cuadrado con el interior de un círculo de radio  $L/2$  cuyo centro se localiza en el vértice superior derecho del cuadrado (véase la figura 3.4), la partícula que se mueve dentro de este espacio lo hace siguiendo líneas rectas mientras que las colisiones con la frontera del billar son especulares. A este sistema se le conoce como el billar de Sinai.



**Figura 3.4:** Representación gráfica del denominado billar de Sinai, la curva que une a los puntos E y F corresponde a un cuarto de circunferencia de radio igual a la mitad de la longitud entre los puntos A y B y cuyo centro se localiza en la intersección de la recta que pasa por los puntos B y E con la recta que pasa por los puntos C y F.

Este billar es equivalente al billar cuadrado de lado  $L$  al cual se le retira el interior de un círculo de radio  $L/4$  centrado en la intersección de las diagonales del cuadrado si se considera que en este último billar se le imponen condiciones periódicas a la frontera a la trayectoria de la partícula (véase la figura 3.5).



**Figura 3.5:** En la imagen **A)** está representada la trayectoria de una partícula en el billar de Sinai cuya posición inicial es P; en la imagen **B)** está representada la trayectoria de una partícula en un billar cuadrado de lado  $L$  al cual se le ha retirado el interior de un círculo de radio  $L/4$  centrado en la intersección de sus diagonales con condiciones periódicas a la frontera y cuya posición inicial es P (Se han agregado los cuatro segmentos de recta que parten de la circunferencia a los lados del cuadrado para resaltar el hecho de que la geometría de este billar corresponde a tener cuatro billares de Sinai en diferentes orientaciones). En ambos casos se ha agregado la longitud de cada segmento de recta que conforma la trayectoria de la partícula. Nótese que las intersecciones de la trayectoria de la partícula con la frontera del billar en la imagen **B)** son las mismas que en la imagen **A)** si consideramos cada uno de los cuatro sectores que conforman al billar en la imagen **B)** como un billar de Sinai, de igual forma, la longitud de la trayectoria es igual en ambos casos.

### 3. GASES DE LORENTZ

---

Debido a la equivalencia entre los dos billares mencionados en el párrafo anterior, el billar de Sinai modela a dos discos duros moviéndose libremente en un espacio bidimensional con condiciones periódicas a la frontera de modo que el centro de masa del sistema se mantiene estático; si nos cambiamos a un sistema de coordenadas relativas podemos interpretar las colisiones entre los dos discos duros como la colisión de una partícula puntual con un disco duro de radio igual a la suma de los radios de ambos discos. Debido a las condiciones periódicas a la frontera esta colisión de una partícula puntual con un disco duro es equivalente a una partícula desplazándose en el espacio dos dimensional infinito en el cual hay un arreglo periódico de discos duros con los cuales puede colisionar la partícula. Este sistema corresponde al modelo más simple (no trivial) de dinámica molecular y equivale a un gas de Lorentz periódico en dos dimensiones [5].

Para el caso particular en que el gas de Lorentz periódico en dos dimensiones tiene horizonte finito, la difusión de dicho sistema es normal [24], esto es que el desplazamiento cuadrático medio de las partículas que se desplazan en dicho gas es lineal en el tiempo para tiempos muy grandes

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2 \rangle \sim Dt,$$

donde  $\langle \rangle$  denota el valor esperado,  $\mathbf{x}(t)$  es la posición de la partícula tras un tiempo de vuelo  $t$ ,  $\mathbf{x}_0$  es la posición inicial de la partícula,  $D$  es el coeficiente de difusión y el símbolo  $A(t) \sim B(t)$  significa que  $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{A(t)}{B(t)} = 1$ .

Este sistema cumple con el teorema de límite central

$$\frac{\Delta(t)}{\sqrt{t}} \Rightarrow \mathcal{N}(0, 2D_{ij}),$$

donde  $\Delta(t) = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}(0)$ ,  $\mathcal{N}$  es la distribución normal multivariada,  $D_{ij}$  es el tensor de difusión y  $\Rightarrow$  denota la convergencia de distribuciones cuando  $t \rightarrow \infty$  [26].

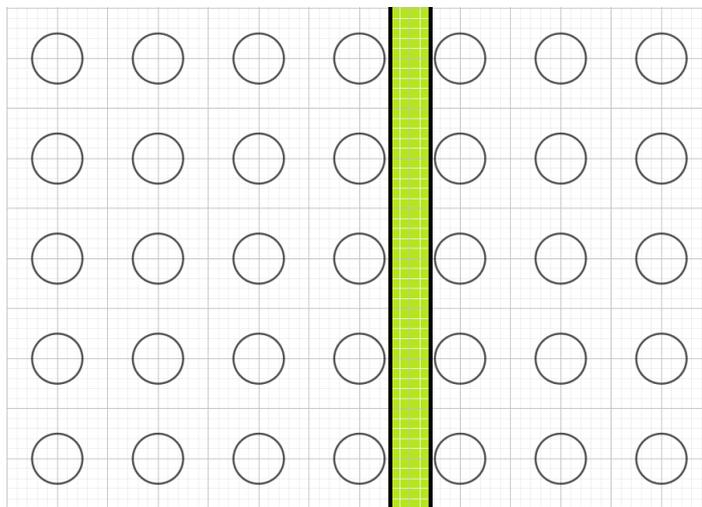
Además presenta un comportamiento hiperbólico en el sentido de que el exponente de Lyapunov asociado a casi todas las condiciones iniciales de la partícula en el billar es positivo, esto nos habla de que el sistema es caótico, es decir dos condiciones iniciales infinitesimalmente cercanas se alejan mutuamente de manera exponencial [26].

Para el caso con horizonte infinito, existen bandas infinitas las cuales no intersectan a ningún obstáculo denominadas “canales” (véase la figura 3.6), esto implica que el sistema presente una superdifusión logarítmica [25], es decir

$$\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2 \rangle \sim D t \log t,$$

Este sistema cumple con el teorema de límite central

$$\frac{\Delta(t)}{\sqrt{t \log t}} \Rightarrow \mathcal{N}(0, D_{ij}).$$



**Figura 3.6:** Ejemplo de una banda infinita en un gas de Lorentz periódico bidimensional con horizonte infinito. Si la posición inicial de la partícula es tal que se encuentra dentro de la región verde con una velocidad inicial paralela a las rectas que definen a dicha región, la partícula nunca colisionará con ningún obstáculo.

Otra de las propiedades de interés en los gases de Lorentz es la denominada **distribución de vuelos libres**. Para el caso bidimensional dicha distribución está dada por

$$\phi_\epsilon(]a, b[) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{m(\{(x, v) \in (\Omega_{\Gamma_\epsilon} \cap B_0(R)) \times S^1 \mid \tau_\epsilon(x, v) \in ]a, b[\})}{m(\Omega_{\Gamma_\epsilon} \cap B_0(R))}, \quad (3.1)$$

donde  $]a, b[$  es el intervalo abierto de  $a$  a  $b$ ,  $\epsilon$  es el radio de los obstáculos,  $m(\cdot)$  es la medida de Lebesgue,  $\Omega_{\Gamma_\epsilon}$  es el espacio accesible a las coordenadas espaciales de la partícula,  $S^1$  es el círculo unitario,  $B_0(R)$  es la bola de radio  $R$  centrada en el origen y  $\tau(x, v)$  es la longitud del camino libre para la posición  $x$  y la velocidad  $v$  definida como

$$\tau_\epsilon(x_0, v_0) = \inf\{t > 0 \mid x_0 + tv_0 \notin \Omega_{\Gamma_\epsilon}\}. \quad (3.2)$$

Para bajas densidades en los obstáculos, se tiene que la distribución  $\phi_\epsilon$  que siguen los gases de Lorentz periódicos es

$$\phi_\epsilon(]t, \infty[) \Rightarrow Ct^{-1},$$

cuando  $t \rightarrow \infty$  y  $\epsilon \rightarrow 0$  [46].

### 3.1.2. Dimensiones altas

Como se mencionó previamente en la introducción de este capítulo, los gases de Lorentz periódicos pueden ser de horizonte infinito o finito dependiendo de si existen

### 3. GASES DE LORENTZ

---

o no trayectorias de la partícula tales que esta no colisione con algún obstáculo para tiempos de vuelo arbitrariamente grandes. Considerando la existencia de estas trayectorias es posible definir subespacios a los que llamaremos canales donde las partículas se pueden mover libremente (véase la región de color verde en la figura 3.6).

La idea esencial detrás de dichos canales consiste en buscar regiones lineales (rectas, planos, hiperplanos, etc.) que atraviesan la retícula sin cortar ningún obstáculo. Estas regiones pueden desplazarse de manera ortogonal de forma que sigan sin intersectar a ningún obstáculos, dotando de un volumen a dicho canal. Formalizando lo anterior definimos los siguientes conceptos:

Sea  $V \subset \mathbb{R}^d$  (con  $d \geq 2$ ) tal que para algún punto  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  el conjunto  $\mathbf{x} + V$  no intersecta a ningún obstáculo del gas de Lorentz (aunque puede ser tangente a ellos), diremos que  $V$  es un subespacio libre de la retícula.

Sea  $B_H \subset \mathbf{x} + V^\perp$  el máximo conjunto conexo que contiene a  $\mathbf{x}$  y que tiene a  $V$  como un subespacio libre, donde  $V^\perp$  es el espacio lineal perpendicular a  $V$ .<sup>1</sup>

Definimos el canal de un gas de Lorentz como

$$H = \{(\mathbf{x}, \mathbf{v}) : \mathbf{x} \in B_H + V, \mathbf{v} \in V \cap \mathbb{S}^{d-1}\},$$

donde  $\mathbb{S}^{d-1}$  es la hiperesfera unitaria de dimensión  $d - 1$ . La dimensión del canal  $d_H$  es la dimensión de  $V$  y satisface la desigualdad  $1 \leq d_H \leq d - 1$ .

Con base en lo anterior definimos como **canal máximo** al canal de máxima dimensión entre todos los canales de un gas de Lorentz dado; decimos que el canal de un gas de Lorentz es un **canal principal** si su dimensión es  $d - 1$  y que es un **canal incipiente** si el conjunto  $B_H$  tiene una medida cero  $d - d_H$  dimensional (por ejemplo un plano tangente a los obstáculos por ambos lados) [26].

Sea  $F(t)$  la probabilidad de que una trayectoria dentro del gas de Lorentz sea tal que tras un tiempo  $t$  la partícula no haya colisionado con algún obstáculo. Uno de los principales resultados sobre gases de Lorentz en dimensiones altas es la forma funcional de  $F(t)$  al variar la dimensión si el gas de Lorentz posee al menos un canal principal e incipiente (aunque por lo tanto no sería principal pues tendría medida cero) [26]:

$$F(t) = \begin{cases} t^{-2} & \text{si } 3 \leq d \leq 5 \\ t^{-2} \log t & \text{si } d = 6 \\ t^{\frac{2+d}{2-d}} & \text{si } d \geq 6 \end{cases},$$

donde  $d$  es la dimensión del espacio considerado.

---

<sup>1</sup>Este es el ancho del canal

Los gases de Lorentz bidimensionales considerados en la sección anterior son equivalentes a los sistemas de dos discos duros en un toro bidimensional cuando nos montamos en el sistema de referencia de su centro de masa y consideramos el movimiento relativo de los discos. Para poder modelar tres o más discos es necesario considerar gases de Lorentz periódicos en dimensiones mayores. La gran diferencia entre los billares que modelan a los sistemas de dos discos con aquellos de  $N \geq 3$  discos es que estos últimos presentan obstáculos convexos, mas no estrictamente convexos, como sí era el caso en el modelo para dos discos. A esta clase de billares se les conoce como billares semi-dispersivos [47].

Para estos sistemas de  $N \geq 2$  discos duros se ha demostrado su comportamiento hiperbólico [47] así como su ergodicidad [4] con lo cual se demostró como cierta la hipótesis de ergodicidad de Boltzmann-Sinai. Sin embargo, aún hay muchas preguntas abiertas sobre la ergodicidad de sistemas más generales, muchos de gran interés físico, por ejemplo sistemas de discos duros constreñidos a una caja con paredes duras o sistemas de discos duros en presencia de diferentes fuerzas actuando sobre ellos.

### 3.1.3. Efectos de campos externos

En 1993 Chernov, Eyink, Lebowitz y Sinai estudiaron el modelo de gas de Lorentz periódico con horizonte finito en dos dimensiones fuera de equilibrio al aplicarle un campo eléctrico externo (suponiendo que la partícula en el gas de Lorentz está cargada) considerando además una fuerza de fricción de modo que la energía cinética de la partícula en dicho sistema se mantuviera constante. Entre los resultados reportados por este grupo en [27] destaca la ergodicidad de este sistema para campos externos suficientemente pequeños, así como la deducción de la ley de Ohm y la relación de Einstein  $\mathbf{J} = D\mathbf{E} + \mathcal{O}(\mathbf{E})$  donde  $\mathbf{J}$  es la corriente,  $D$  el coeficiente de difusión del sistema y  $\mathbf{E}$  el campo eléctrico.

El caso del gas de Lorentz periódico dos dimensional con los obstáculos localizados en una retícula cuadrada con horizonte infinito en presencia de un campo magnético constante ortogonal a la superficie del gas de Lorentz fue estudiado en 1996 por Flie\Ser, Schmidt y Spohn. Para su trabajo realizaron simulaciones numéricas sobre la difusión del gas de Lorentz en cuestión agregando impurezas al sistema, representadas por una variación aleatoria al ángulo de la velocidad de la partícula para tiempos que siguen una distribución Poisson separados en promedio un tiempo  $\tau$ .

Siendo  $L$  la magnitud de la arista de la retícula cuadrada considerada, los valores para el radio de los obstáculos ( $r_o$ ), el radio de giro de la partícula ( $r_c$ ) y el parámetro  $\tau$  cumplen las siguientes relaciones

$$\frac{r_o}{L} \approx \frac{1}{6}, \quad \frac{r_c}{L} \approx 2, \quad \frac{\tau}{L} \approx 10.$$

### 3. GASES DE LORENTZ

---

Bajo estas condiciones encontraron numéricamente la existencia de picos muy pronunciados en las gráficas de la magnetoresistencia como función de la intensidad del campo magnético.

En ausencia de impurezas, y para radios de giro ( $r_c$ ) tales que  $r_c < \frac{1}{2} - r_o$  (considerando  $L = 1$ ) las órbitas que siguen las partículas son círculos alrededor de un punto, círculos que contienen a un obstáculo o colisiones con un sólo obstáculo; para valores de  $r_c$  lo suficientemente grandes el sistema se vuelve caótico mientras que para valores intermedios de  $r_c$  existen regiones del espacio fase en el cual el sistema es no caótico. Esta región no caótica se asocia a trayectorias que divergen, similares a un movimiento balístico, las cuales presentan una cierta ventana de estabilidad ante variaciones del campo magnético [9].

Estudios posteriores realizados por Chernov en el año 2001 [28] sobre gases de Lorentz periódicos con horizonte finito bidimensionales y en presencia de fuerzas externas pequeñas (por ejemplo aquellas fuerzas isotrópicas y conservativas provenientes de potenciales pequeños dependientes únicamente de la posición de la partícula o combinaciones de campos magnéticos y eléctricos al agregar al sistema una fuerza de “fricción” o un termostato a fin de mantener la energía cinética constante) demostraron que bajo estas hipótesis el sistema es ergódico, presenta comportamiento hiperbólico y cumple el teorema de límite central.

En el año 2008, Chernov presentó un artículo sobre el análisis matemático de un gas de Lorentz periódico con horizonte finito en dos dimensiones bajo una fuerza externa constante sin fricción ni termostato alguno; el sistema en cuestión modela una caja de Galton ideal cuando la fuerza externa es la fuerza gravitacional. En dicho artículo demuestra que el desplazamiento de la partícula en la dirección paralela a la fuerza ( $\langle x(t) \rangle$ ) crece como  $t^{2/3}$  mientras que su velocidad ( $v(t)$ ) aumenta como  $t^{1/3}$  [48].

Estudios similares a los realizados por Chernov y compañía en 1993 fueron publicados por Dolgopyat y Chernov en el 2009, en esta ocasión el sistema estudiado fue un gas de Lorentz periódico con horizonte infinito bidimensional. El principal resultado presentado por los autores del artículo consiste en una expresión para la corriente  $\mathbf{J}$  generada en el sistema por la presencia de un campo eléctrico pequeño y homogéneo  $\mathbf{E}$  cuando el campo eléctrico no es paralelo a la dirección de cualquier canal; dicha expresión es  $\mathbf{J} = \frac{1}{2} \mathbf{D} \mathbf{E} \log \|\mathbf{E}\| + \mathcal{O}(\|\mathbf{E}\|)$  donde  $\mathbf{D}$  es la matriz de difusión del sistema en ausencia del campo eléctrico [49].

### 3.2. Gases de Lorentz aleatorios

Los gases de Lorentz considerados en esta sección corresponden a aquellos cuya posición espacial de sus obstáculos sigue una distribución aleatoria dada por un proceso

Poisson, estos corresponden al modelo originalmente propuesto por Lorentz para su estudio de los fenómenos de transporte presentes en los metales.

Pese a que el sistema es determinista una vez fijada la posición de los obstáculos y las condiciones iniciales de la partícula (posición y velocidad), la velocidad de esta se vuelve rápidamente aleatoria debido a las colisiones con los obstáculos, lo que conduce a un movimiento difuso para tiempos suficientemente largos [29]. En el caso en que la densidad de los obstáculos es baja (descartando la posibilidad de que los obstáculos se solapen) la función de autocorrelación de la velocidad de la partícula decae en el tiempo como  $t^{-\frac{d}{2}-1}$  donde  $d$  es la dimensión del sistema [50].

Lo anterior puede pensarse como un proceso en el cual la partícula va dando saltos espaciales con una distribución de tiempo de espera entre salto y salto  $p_\tau(\tau)$  y una distribución espacial  $p_{\mathbf{x}}(\mathbf{x})$  de acuerdo a un proceso Poisson de parámetro  $\tau_c^{-1}$  asociado a las colisiones con los obstáculos, con lo cual la distribución de tiempo de espera tiene un primer y segundo momento dados por  $\langle \tau \rangle = \tau_c$  y  $\langle \tau^2 \rangle = 2\tau_c^2$  respectivamente. Este sistema (un gas de Lorentz aleatorio con densidad de obstáculos baja) muestra una difusión normal cuyo coeficiente de difusión está dado por

$$D = \frac{v^2}{3} \tau_c,$$

donde  $v^2$  es el cuadrado de la norma de la velocidad de la partícula (usualmente igual a uno) [29].

Al aumentar la densidad de los obstáculos, los resultados numéricos muestran que el sistema se vuelve subdifusivo  $\langle (\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2 \rangle \sim t^{2/z}$  con  $z > 2$  para una cierta ventana temporal, la cual tiende a ser mayor conforme la densidad aumenta hasta llegar a una densidad crítica, a partir de la cual la difusión del sistema se vuelve cero [29, 30].

Respecto a la distribución que sigue la longitud del camino libre en este sistema, tenemos la siguiente convergencia para  $\phi_\epsilon$

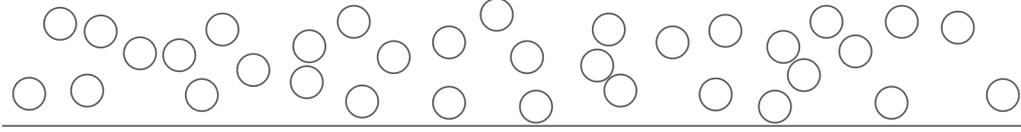
$$\phi_\epsilon([t, \infty[) \Rightarrow \exp(-ct),$$

cuando  $t \rightarrow \infty$  y  $\epsilon \rightarrow 0$  [51].

Muy relacionados a un gas de Lorentz, aunque sin ser uno propiamente hablando, son los denominados tubos de Lorentz. En dos dimensiones un tubo de Lorentz corresponde a un sistema de una partícula desplazándose libremente en un dominio extendido infinitamente en una dirección en el cual se encuentran localizados obstáculos distribuidos de manera aleatoria, las colisiones con dichos obstáculos son especulares (Véase la figura 3.7). Estos sistemas (particularmente el análogo en tres dimensiones) se emplean para modelar nanotubos, siendo de particular interés las propiedades difusivas

### 3. GASES DE LORENTZ

---



**Figura 3.7:** Ejemplo de un tubo de Lorentz en dos dimensiones con obstáculos circulares, el dominio del tubo en la dirección horizontal no está acotado.

que presentan [52].

Para el caso particular del tubo de Lorentz en dos dimensiones con un horizonte finito y obstáculos convexos disjuntos se ha demostrado la ergodicidad del sistema bajo la hipótesis de que dicho sistema cumple el teorema de Schmidt [52]. Una generalización para la ergodicidad de los tubos de Lorentz en dimensiones más altas puede encontrarse en [53].

#### 3.2.1. Con campo magnético

El modelo de un gas de Lorentz aleatorio bidimensional en el cual la partícula se desplaza por arcos de circunferencia se ha empleado para estudiar de manera teórica las propiedades de transporte presente en placas bidimensionales contaminadas con quantum antidots por las cuales se desplazan electrones bajo la presencia de un campo magnético externo (siendo el tamaño de los quantum antidots lo suficientemente grande para desprestigiar efectos cuánticos, alrededor de los 500 nanómetros) [10] así como partículas activas en presencia de una distribución aleatoria de obstáculos tales como bacterias o gotas de emulsión auto propulsadas [11, 13].

Las colisiones de la partícula con los obstáculos son especulares y debido a que modelan partículas cargadas en un campo magnético ortogonal a la velocidad de dichas partículas, el radio de giro de la partícula es inversamente proporcional a la magnitud del campo magnético acorde a la ecuación para el radio del ciclotrón  $R = mv/qB$ .

Para el caso en que el sistema tiene una densidad de obstáculos baja ( $\rho = 0.1$ ,  $\rho = 0.15$ ,  $\rho = 0.2$  y  $\rho = 0.3$ ) se simuló las colisiones de la partícula en dicho sistema, calculándose la variación de la conductividad de Ohm y la conductividad de Hall como función de la intensidad del campo magnético [10]. Entre los resultados principales de dicha simulación se encuentra la existencia de un máximo para las conductividades de Ohm y Hall asociado a campos magnéticos no nulos para cada una de las densidades consideradas. De igual forma, la función de autocorrelación de la velocidad de la partícula en presencia del campo magnético decae como  $t^{-2}$ , siendo la misma relación funcional que en el caso sin campo magnético.

Una de las características más relevantes de los gases de Lorentz aleatorios en presencia de campos magnéticos externos es que la ergodicidad de estos depende de la magnitud del campo externo. En 1994 Breymann, Kovács y Tél estudiaron la caoticidad de los gases de Lorentz aleatorios al variar la magnitud del campo magnético, identificando cuatro etapas durante las cuales el comportamiento hiperbólico y caótico del sistema se ve reducido cada vez más [31].

En el año 2015 Schirmacher, Fuchs, Höfling y Franosch estudiaron el comportamiento de la difusión de los gases de Lorentz aleatorios como función de la densidad de los obstáculos y la relación entre el radio de giro de la partícula  $R$  y el radio de los obstáculos  $\sigma$  [54]. Entre sus resultados se muestra que para densidades de obstáculos moderadas y bajo una relación de radios  $R/\sigma = 0.9$  el sistema presenta una difusión normal  $\langle(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2\rangle \sim 4Dt$  con  $D$  el coeficiente de difusión, mientras que al disminuir la densidad de los obstáculos el sistema se va tornando subdifusivo  $\langle(\mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_0)^2\rangle \sim t^\gamma$  para  $\gamma = 0.581 \pm 0.005$ .

### 3.3. Gases de Lorentz cuasiperiódicos

Un gas de Lorentz cuasiperiódico es aquel cuya retícula asociada a la posición de los obstáculos es cuasiperiódica, obtenida generalmente por el método de proyección el cual se describe de manera breve en el capítulo 2 del presente trabajo. Este método de generar retículas cuasiperiódicas permite trasladar al gas de Lorentz cuasiperiódico a un gas de Lorentz periódico en dimensiones más altas [32].

En el 2012 Wennberg realizó una simulación numérica para conocer la distribución que sigue la longitud del camino libre en un gas de Lorentz cuasiperiódico unidimensional cuyos obstáculos siguen una distribución de Fibonacci, encontrando que dicha distribución tiende a  $t^{-p}$  con  $p = 1.035$  [51]. Un análisis en dimensiones más altas sobre la existencia y características de dicha distribución se puede encontrar en [55].

Las simulaciones numéricas realizadas por Atahualpa Kraemer y David Sanders en el 2013 muestran que la difusión para un gas de Lorentz cuasiperiódico en dos dimensiones es normal en el caso en que dicho gas presenta un horizonte finito, ligeramente superdifusivo cuando presenta un horizonte infinito y subdifusivo para tiempos cortos cuando los obstáculos se traslapan [26, 32].

En el año 2013 Jens Marklof y Andreas Strömbergsson estudiaron la convergencia de la distribución de vuelos libres en el límite de bajas densidades y para tiempos tendiendo a infinito de gases de Lorentz no periódicos formados a partir de una superposición de  $N$  gases de Lorentz periódicos con periodos inconmensurables a pares (pairwise immeasurable) similar al efecto twinning en cristales. En sus resultados encontraron que dicha distribución converge a  $\frac{1}{t^{N+2}}$  [56].

### 3. GASES DE LORENTZ

---

Atahualpa Kraemer, Michael Schmiedeberg y David Sanders demostraron en el 2015 para gases de Lorentz cuasi-periódicos en dos dimensiones que la distribución de vuelos libres va como  $\frac{1}{t^3}$  cuando el sistema presenta canales, mientras que cuando los canales se cierran el sistema pasa a tener horizonte localmente finito y la distribución de vuelos libres va como  $\frac{1}{t^5}$  [33].

---

## Capítulo 4

# Código y detalles de la simulación

---

Pese al gran potencial que representa el poder caracterizar las propiedades dinámicas de un gas de Lorentz cuasi-periódico en el entendimiento de los fenómenos de transporte para estructuras cuasi-periódicas como lo son los cuasicristales, la cantidad de avances que se han realizado en dicho campo es relativamente poca comparado a lo que se conoce para los casos periódicos y aleatorios.

Uno de los principales obstáculos presentes al momento de querer estudiar de manera numérica estos sistemas es la dificultad para generar arreglos cuasi-periódicos de obstáculos en el espacio de interés de forma computacional, así como simular las interacciones entre una partícula puntual y dichos obstáculos.

Pensando en el caso de un gas de Lorentz cuasi-periódico dos dimensional<sup>1</sup> en presencia de un campo magnético constante y ortogonal se ha desarrollado en colaboración con Atahualpa Kraemer un código en el lenguaje de programación Julia que nos permite simular las trayectorias de una partícula cargada en dicho sistema, de modo que es posible cuantificar el desplazamiento cuadrático medio para este sistema como función de la intensidad del campo magnético y el radio de los obstáculos.

### 4.1. Estructura del código

El código desarrollado se divide básicamente en tres secciones: la primera de ellas contiene las funciones necesarias para generar las condiciones iniciales de la simulación, la segunda sección engloba a las funciones cuyo código contiene los comandos necesarios para calcular los puntos de intersección de la partícula con los obstáculos a lo largo

---

<sup>1</sup>El presente código sólo considera ambientes cuasi-periódicos dos dimensionales generados a partir de la proyección de un ambiente periódico tres dimensional utilizando el método de corte y proyección, aunque es posible generalizarlo a más dimensiones, caso que por simplicidad y costo computacional no es tratado en este trabajo

## 4. CÓDIGO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN

---

de su trayectoria, así como los parámetros de posición y velocidad de la partícula en distintos momentos de la misma; finalmente la tercera sección contiene al conjunto de funciones cuyo código integra a las funciones definidas en las primeras dos secciones de modo que se pueda simular y visualizar la trayectoria de la partícula.

Salvo que se indique lo contrario, el sistema de coordenadas empleado a lo largo de este capítulo corresponde a un sistema cartesiano y la velocidad de la partícula es tal que su norma es unitaria.

### 4.1.1. Condiciones iniciales

Basados en el método de corte y proyección analizado en el capítulo 2, podemos obtener un arreglo cuasi periódico de obstáculos circulares en un espacio dos dimensional por medio de un arreglo periódico de cubos en un espacio tres dimensional, cada uno de los cuales es atravesado por un cilindro cuyo eje de simetría pasa por el centro del cubo con un ángulo de inclinación irracional respecto al plano  $XY$ , de modo que si nuestra partícula está constreñida a moverse en un plano ortogonal a los ejes de los cilindros, la disposición de los obstáculos para dicha partícula corresponde a la de un arreglo cuasi-periódico de obstáculos circulares en un espacio dos dimensional.

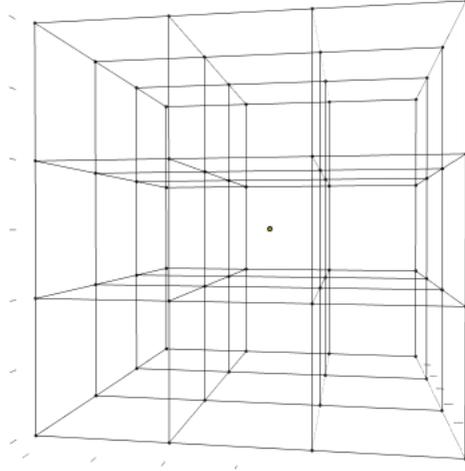
Podemos reducir la dinámica de la partícula en el arreglo periódico de cubos con sus respectivos cilindros en todo el espacio a la dinámica de la partícula en un cubo con condiciones periódicas a la frontera (estas condiciones periódicas a la frontera afectan tanto a la partícula como al cilindro que atraviesa al cubo). Bajo este enfoque requerimos que todas las posiciones dentro del cubo y fuera de los segmentos de cilindro sean igualmente probables a ser la posición inicial de la partícula, así como que la velocidad inicial siga una distribución homogénea sobre el círculo unitario.

Con base en lo anterior se definen las siguientes funciones con el fin de poder generar las condiciones iniciales:

- **caja\_Periodica(Posicion, LadoCaja):** Consideremos al espacio tres dimensional y una teselación de dicho espacio por cubos cuya magnitud de sus aristas es “LadoCaja”, de modo que uno de los cubos tenga su centro en el origen del sistema de coordenadas (véase la figura 4.1).

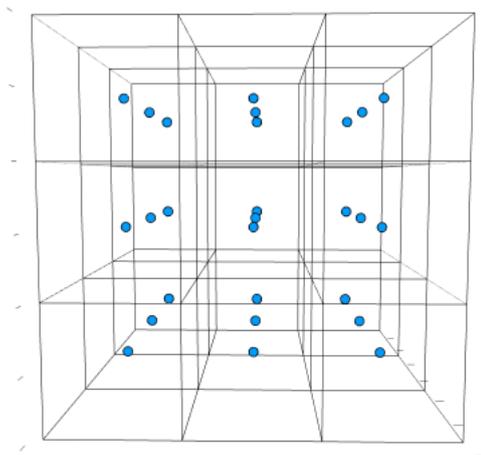
La función “caja\_Periodica” toma un arreglo tres dimensional correspondiente a las coordenadas de la posición de una partícula en el espacio y modifica dicho arreglo de modo que las nuevas entradas del arreglo correspondan a las coordenadas de la partícula relativas al centro del cubo que la contiene.

Básicamente esta función nos permite que las partículas en movimiento se mantengan confinadas en el cubo con centro en  $(0, 0, 0)$  generando las condiciones periódicas a la frontera de dicho cubo.



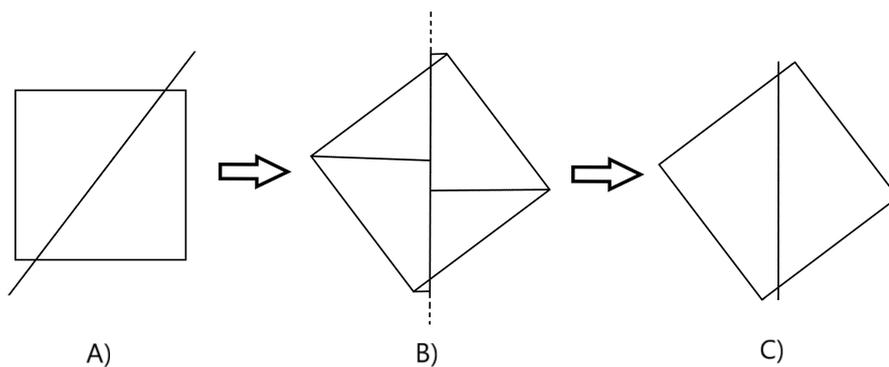
**Figura 4.1:** Ejemplo del espacio tres dimensional siendo cubierto por cubos cuyos lados miden una unidad. El punto más grande corresponde al origen  $(0, 0, 0)$ .

- **mat\_Rot(Normal):** Esta función toma como parámetro de entrada un arreglo tres dimensional con las coordenadas de un vector y regresa la matriz de rotación que transforma al vector canónico  $\hat{e}_3 = (0, 0, 1)$  en el vector unitario que apunta a la misma dirección que el vector dado.
- **vel\_Rand(Matriz\_Rotacion):** Considerando al parámetro de entrada como la matriz que transforma al vector canónico  $\hat{e}_3$  en un vector unitario colineal al eje de simetría del cilindro, la función nos regresa un vector unitario ortogonal al eje de simetría del cilindro con una distribución homogénea sobre el círculo unitario. Esta función es la responsable de determinar la velocidad inicial de la partícula en la simulación.
- **centros\_Cajas\_3D(LadoCaja):** Función que nos regresa un arreglo de 27 entradas, cada una de las cuales es a su vez un arreglo de tres dimensiones, con las coordenadas del centro de un cubo cuya magnitud de sus aristas es “LadoCaja” centrado en el origen y de los centros de los 26 cubos idénticos adyacentes a dicho cubo (véase la figura 4.2).
- **longitud\_Cilindro(LadoCaja, Matriz\_Rotacion\_Inv):** Considerando al parámetro de entrada “Matriz\_Rotacion\_Inv” como la matriz que transforma a un vector colineal al eje de simetría del cilindro al vector canónico  $\hat{e}_3$ , la función nos regresa la longitud que deben tener los cilindros que atraviesan a los cubos cuya magnitud de sus aristas es “LadoCaja” de modo que al rotar el espacio y tener al cilindro vertical, la longitud del cilindro  $L$  sea el mínimo valor tal que las proyecciones de los vértices del cubo sobre el eje de simetría del cilindro estén en el



**Figura 4.2:** Visualización de los 27 cubos con sus respectivos centros.

intervalo  $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$  sobre el eje de simetría del cilindro (véase la figura 4.3 para una representación esquemática dos dimensional).



**Figura 4.3:** Ejemplo en dos dimensiones sobre el proceso para determinar la longitud del cilindro: A) Tenemos un cuadrado por cuyo centro atraviesa una recta correspondiente al eje de simetría del “cilindro”. B) Tras rotar el espacio de modo que el eje de simetría del cilindro quede vertical se proyectan los vértices del cuadrado al eje de simetría del “cilindro”. C) La longitud del cilindro queda determinada al considerar el mínimo segmento de recta que pasa por el eje de simetría del “cilindro” tal que las proyecciones de todos los vértices del cuadrado caen dentro de dicho segmento.

- **posiciones\_Iniciales(EjeCil, RadioCil, LadoCaja, Iteraciones)**: Esta función nos regresa un arreglo con tantas entradas como valor numérico del parámetro “Iteraciones” en el cual, cada una de sus entradas es un arreglo tres dimensional con las coordenadas de un punto localizado dentro de los límites de un cubo cuya magnitud de sus aristas es “LadoCaja” centrado en el origen y con 26 cubos idénticos alrededor de dicho cubo, cada uno de los cuales (incluido el cubo centrado en el origen) es atravesado por un cilindro de radio “RadioCil” y cuyo eje de simetría es paralelo al vector “EjeCil” (la longitud de los cilindros queda determinada por el algoritmo descrito por la función **longitud\_Cilindro()**). Las coordenadas de dichos puntos son tales que cada uno de los puntos no está contenido en ninguno de los 27 cilindros considerados (véase las gráficas de la columna izquierda de la figura 4.4).

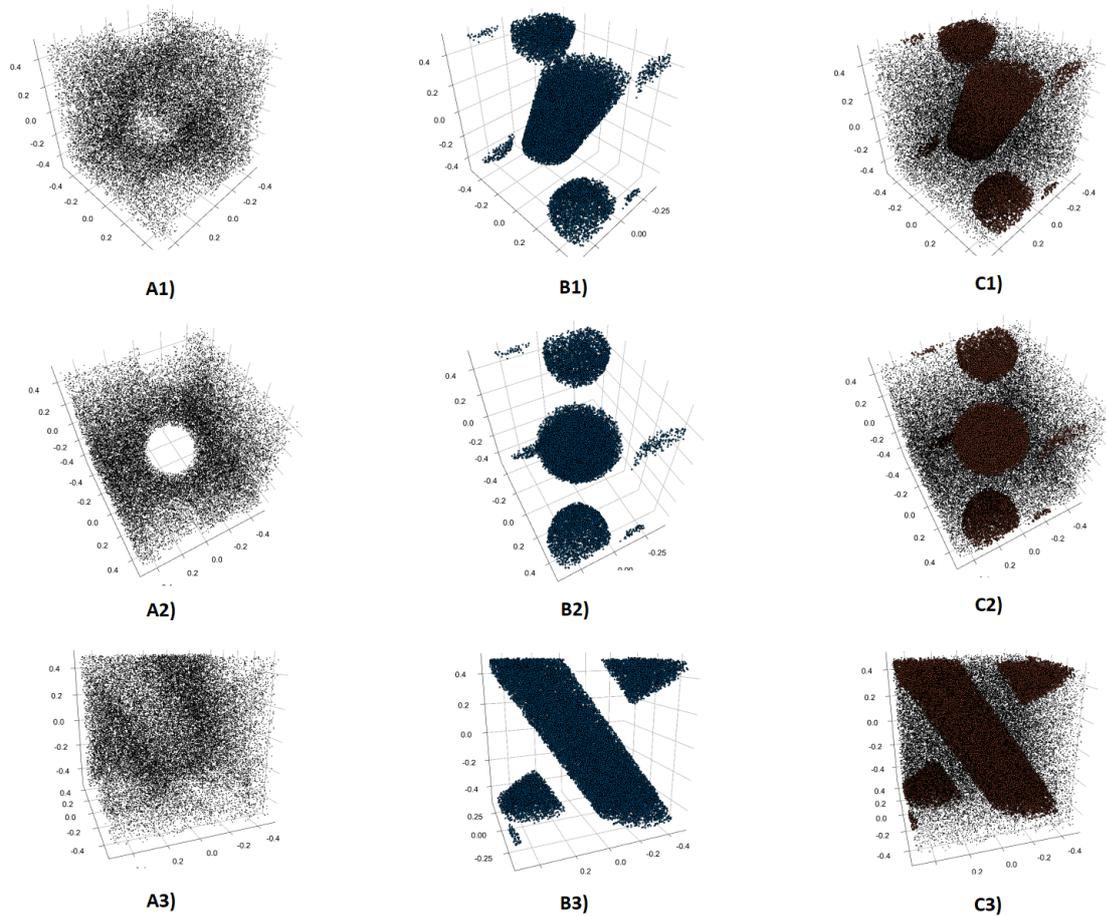
Esta función es la responsable de determinar la posición inicial de la partícula en la simulación.

- **posiciones\_Iniciales\_2(EjeCil, RadioCil, LadoCaja, Iteraciones)**: El algoritmo de esta función es esencialmente el mismo que el de la función **posiciones\_Iniciales()** con la excepción de que las coordenadas de los puntos que regresa la función son tales que se encuentran dentro de los límites de un cubo cuya magnitud de sus aristas es “LadoCaja” centrado en el origen y dentro de alguno de los 27 cilindros considerados.

La principal utilidad de esta función radica en que nos permite visualizar (si el parámetro “Iteraciones” es lo suficientemente grande) los segmentos de cilindro que se encuentran dentro del cubo centrado en el origen (véase las gráficas de la columna central de la figura 4.4).

#### 4. CÓDIGO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN

---



**Figura 4.4:** Distintos ángulos de las gráficas realizadas con los puntos obtenidos de las funciones `posiciones_Iniciales()` (gráficas de la columna izquierda) y `posiciones_Iniciales_2()` (gráficas de la columna central). Las gráficas de la columna derecha se obtuvieron al graficar los conjuntos de puntos que forman a las gráficas de la columna izquierda junto con los puntos que forman a las gráficas de la columna central consideradas por renglones. Para este caso particular las coordenadas cartesianas del vector que determina el eje de simetría del cilindro son  $(1, 2, \pi)$ , la magnitud de las aristas del cubo es igual a una unidad, el radio del cilindro es igual a 0.20 unidades y cada uno de los conjuntos de puntos (tanto dentro como fuera del cilindro) tienen 30000 elementos.

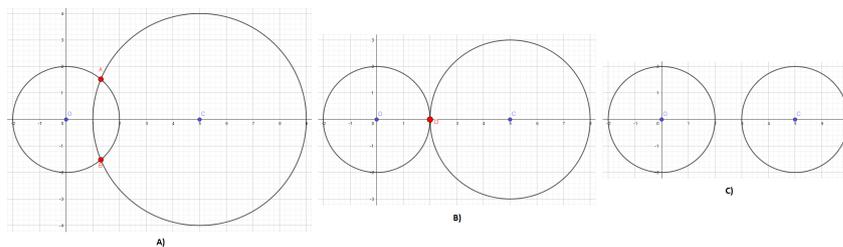
### 4.1.2. Cálculo de las colisiones en 2D

Debido a la presencia del campo magnético las partículas cargadas que se desplacen por el gas de Lorentz cuasi-periódico bidimensional lo harán describiendo arcos de circunferencia siendo las posibles colisiones de la partícula con los diferentes obstáculos circulares del gas de Lorentz colisiones elásticas las cuales generarán una reflexión espejular de la partícula en el punto de intersección de ambas circunferencias (la trayectoria que describe la partícula y el obstáculo).

Con el objetivo de simular lo anterior requerimos de funciones que calculen la circunferencia asociada a la posición y velocidad de la partícula en un punto dado, así como poder determinar los posibles puntos de intersección de dos circunferencias arbitrarias caracterizadas por sus centros y sus radios. De igual forma es necesario poder calcular la velocidad de la partícula en un punto cualquiera de su trayectoria circular, la velocidad tras la colisión con algún obstáculo y el tiempo de vuelo ente colisiones consecutivas medido a través del ángulo que recorre la partícula desde su posición inicial hasta el punto de intersección de las circunferencias.

Considerando la situación descrita en el párrafo anterior se definen las siguientes funciones:

- **interseccion\_1(Radio1, Radio2, d)**: Consideremos dos circunferencias en un espacio dos dimensional de radios “Radio1” y “Radio2” con centros en las coordenadas  $(0, 0)$  y  $(d, 0)$  respectivamente. La función **interseccion\_1()** nos regresa dos arreglos, cada uno de dimensión dos, con los puntos de intersección de dichas circunferencias (si no hay intersección ambos arreglos serán  $[Inf, Inf]$  mientras que si se intersectan en un sólo punto ambos arreglos serán iguales; véase la figura 4.5).



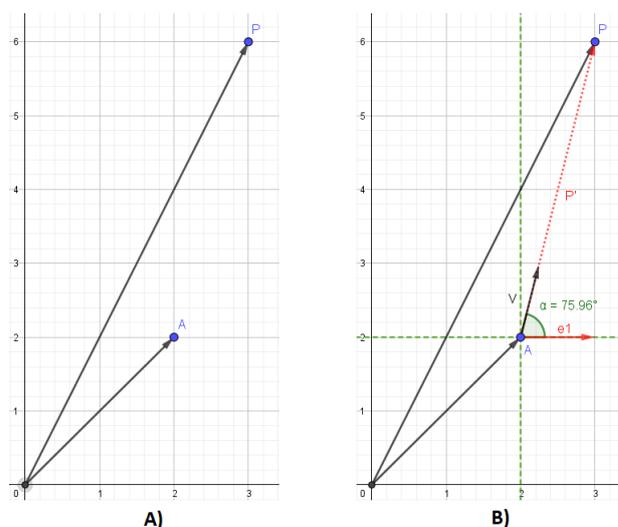
**Figura 4.5:** Posibles resultados al calcular la intersección de las circunferencias con centros en  $(0, 0)$  y  $(d, 0)$ . Para el caso **A)** la función **interseccion\_1()** regresará dos arreglos, cada uno con las coordenadas correspondientes a los puntos  $A$  y  $B$ ; para el caso **B)** la función regresará dos arreglos, ambos con las coordenadas correspondientes al punto  $D$  mientras que para el caso **C)** la función regresará los arreglos:  $[Inf, Inf], [Inf, Inf]$ .

#### 4. CÓDIGO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN

---

- **rotacion(X1, X2)**: Esta función toma como parámetros dos arreglos X1 y X2, cada uno de dimensión dos, asociados a las coordenadas de dos puntos en el espacio dos dimensional y calcula la matriz de rotación que transforma al vector canónico  $\hat{e}_1 = (1, 0)$  en el vector unitario  $\hat{X}_2$  considerando al vector X1 como el origen del sistema de coordenadas. Véase la figura 4.6.

La función regresa como parámetros de salida la matriz de rotación mencionada en el párrafo anterior y la distancia entre los vectores X1 y X2.



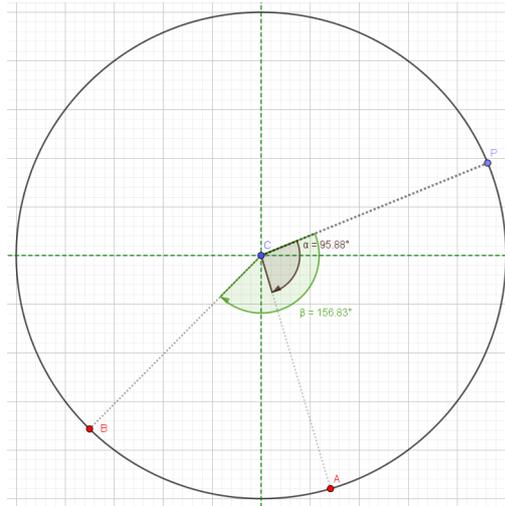
**Figura 4.6:** Dadas las coordenadas de los puntos A y P en el espacio dos dimensional (imagen A)) la función **rotacion()** regresa la matriz de rotación que transforma al vector unitario  $e_1 = (1, 0)$  en el vector unitario V que va en la dirección  $\vec{P} - \vec{A}$  en el sistema de referencia centrado en A (imagen B)).

- **interseccion\_2(Radio1, Radio2, Centro1, Centro2)**: El análogo a la función **interseccion\_1()** para dos circunferencias con centros arbitrarios.

Empleando la función **rotacion()** se obtiene la distancia entre los centros de ambas circunferencias  $d$  así como la matriz de rotación  $R$  que transforma al vector canónico  $\hat{e}_1$  en el vector unitario  $\text{Centro2}$  considerando que el origen del sistema de coordenadas coincide con el centro de la primera circunferencia (Centro1).

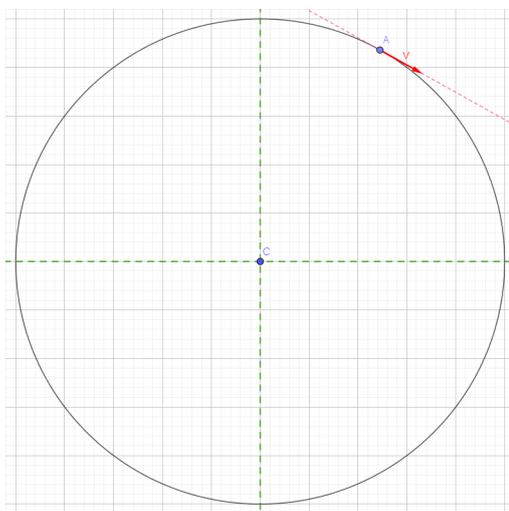
Con dicho valor  $d$  se calculan los puntos de intersección de ambas circunferencias considerando que sus centros están en las coordenadas  $(0, 0)$  y  $(d, 0)$  a partir de la función **interseccion\_1()**. A las coordenadas de los puntos de intersección obtenidos de esta forma se les aplica la matriz de rotación  $R$  y se les suma las coordenadas del centro de la circunferencia con centro en Centro1; estas nuevas coordenadas corresponden a los puntos de intersección de las dos circunferencias iniciales.

- **tiempo\_Trayectoria(Posicion\_Inicial, Posicion\_Final, Centro, Radio)**: Función que regresa el ángulo que hay entre dos puntos (Posicion\_Inicial y Posicion\_Final) sobre una circunferencia con centro en “Centro” y radio “Radio” considerando que la circunferencia es recorrida en el sentido de las manecillas del reloj. Véase la figura 4.7.



**Figura 4.7:** Dadas la posición inicial  $P$  sobre una circunferencia y algún otro punto sobre la misma circunferencia (por ejemplo el punto  $A$  o  $B$ ), la función **tiempo\_Trayectoria()** regresa el ángulo entre el punto  $P$  y el punto  $A$  (o  $B$ ) recorriendo la circunferencia en el sentido de las manecillas del reloj.

- **centro\_Circunferencia(Velocidad, Posicion, Radio)**: Considérese una circunferencia recorrida en el sentido de las manecillas del reloj cuyo radio tiene una magnitud “Radio”, que pasa por un punto determinado por las entradas del arreglo dos dimensional “Posicion” y que el vector tangente a la circunferencia en dicho punto está dado por las entradas del arreglo dos dimensional “Velocidad”; la función regresa un arreglo con las coordenadas del centro de la circunferencia.
- **velocidad\_Particula(Posicion, Centro)**: Dadas las coordenadas de un punto dos dimensional (determinado por las entradas del arreglo “Posicion”) por el que pasa una circunferencia recorrida en el sentido de las manecillas del reloj cuyo centro está determinado por las entradas del arreglo dos dimensional “Centro”, la función regresa un arreglo con las coordenadas asociadas al vector unitario tangente a la circunferencia en el punto determinado por el arreglo “Posicion” (véase la figura 4.8).
- **avance(Posicion\_Inicial, Velocidad, Radio,  $\Delta t$ )**: Dada la posición inicial de una partícula determinada por el arreglo dos dimensional “Posicion\_Inicial” cuya



**Figura 4.8:** Dada la posición  $A$  sobre una circunferencia (recorrida en el sentido de las manecillas del reloj) la función `velocidad_Partícula()` calcula el vector unitario  $V$  tangente a la circunferencia en el punto  $A$  asociado a la dirección de la velocidad lineal de la partícula en el punto  $A$ .

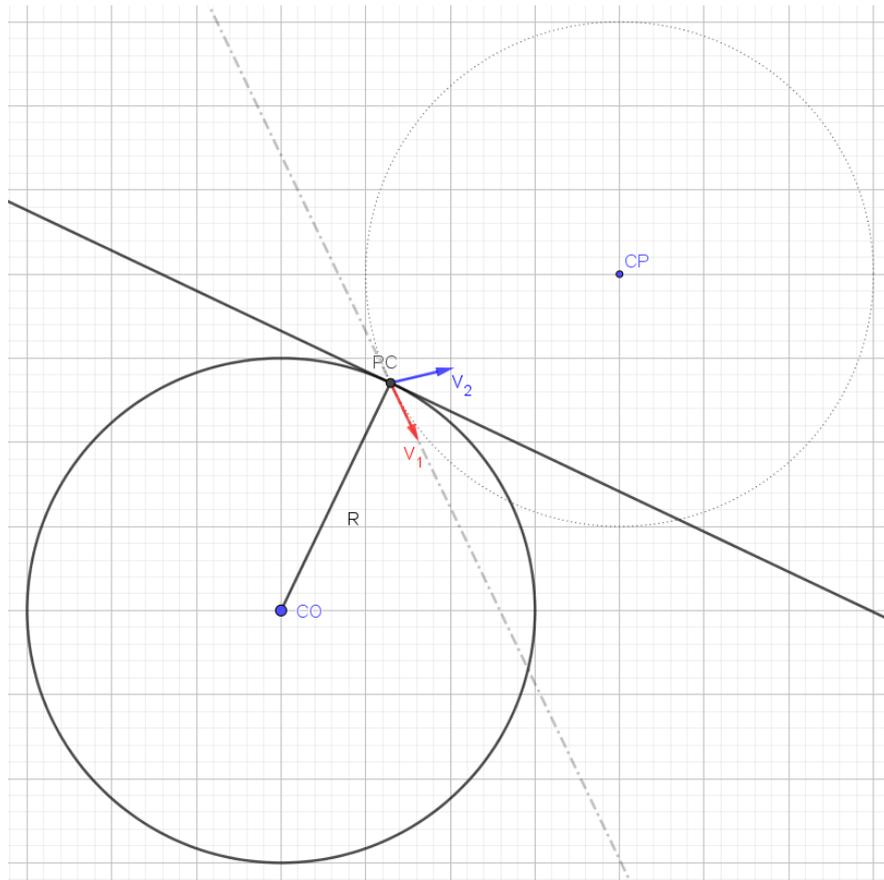
trayectoria es una circunferencia cuyo radio tiene magnitud “Radio” recorrida en el sentido de las manecillas del reloj y cuya velocidad lineal inicial está determinada por el arreglo dos dimensional “Velocidad”, la función regresa dos arreglos asociados a la posición y velocidad lineal de dicha partícula tras un “tiempo” (cantidad de radianes)  $\Delta t$ .

- **colision(Posicion\_Inicial, Velocidad, Radio\_Partícula, Centro\_Obstaculo, Radio\_Obstaculo):** Calcula las coordenadas del punto de intersección (en caso de que exista, si no hay intersección regresa el arreglo  $[Inf, Inf]$ ) entre una circunferencia recorrida en el sentido de las manecillas del reloj asociada a la trayectoria de una partícula determinada por los parámetros de entrada “Posicion\_Inicial, Velocidad, Radio\_Partícula” y la circunferencia con centro dado por el arreglo “Centro\_Obstaculo” y radio de magnitud “Radio\_Obstaculo” asociada a un obstáculo.

La función regresa el arreglo con las coordenadas del punto de colisión y el “tiempo” requerido para la colisión medido como el ángulo entre la posición inicial y el punto de colisión de la partícula.

- **velocidad\_Tras\_Colision(Centro\_Obstaculo, Posicion\_Colision, Velocidad):** La función considera un obstáculo circular cuyo centro está dado por las coordenadas del arreglo dos dimensional “Centro\_Obstaculo”; suponiendo que nuestra partícula colisiona con el obstáculo en la posición indicada por el arreglo dos di-

mensional “Posicion\_Colision” y que al momento de la colisión la partícula tiene una velocidad definida por el arreglo dos dimensional “Velocidad”, la función calcula la dirección de la velocidad que tendrá la partícula un instante después de la colisión considerando que dicha colisión es una reflexión especular de la partícula en el plano tangente al punto de colisión. Véase la figura 4.9.



**Figura 4.9:** Sea el punto  $CO$  el centro del obstáculo cuyo radio es  $R$ , el punto  $CP$  el centro de la trayectoria de la partícula y el punto  $PC$  el punto de colisión entre la partícula y el obstáculo. Sea el vector en rojo ( $V_1$ ) la velocidad de la partícula al momento de la colisión, debido a que la colisión es tal que la partícula sufre una reflexión especular en el plano tangente al obstáculo en el punto de colisión, la componente normal de la velocidad de la partícula al plano tangente se refleja mientras que la componente tangencial se mantiene invariante, esto genera el vector en azul ( $V_2$ ) correspondiente a la velocidad de la partícula un instante después de la colisión.

- **colision\_Condensada(Posicion\_Inicial, Velocidad\_Inicial, Radio\_Partícula, Centro\_Obstaculo, Radio\_Obstaculo)**: Esta función únicamente ejecuta funciones definidas previamente, en particular las funciones **colision()**, **centro\_Circunferencia()**, **velocidad\_Partícula()** y **velocidad\_Tras\_Colision()**.

Con los arreglos obtenidos de cada una de estas funciones entrega como resultado final el ángulo desde la posición inicial de la partícula definida por el arreglo dos dimensional “Posicion\_Inicial” hasta la posición de colisión entre la partícula y el obstáculo (si no hay colisión regresa *Inf*), el arreglo con las coordenadas cartesianas del punto de colisión entre la partícula y el obstáculo, así como el arreglo con las coordenadas que determinan la velocidad de la partícula un instante después de la colisión.

### 4.1.3. Cálculo de las colisiones en 3D

Una vez programadas las funciones que determinan las condiciones iniciales válidas para las partículas que queremos simular (en un espacio tres dimensional), así como las funciones que calculan los parámetros de las posibles colisiones entre una partícula y los obstáculos en un espacio dos dimensional (como la posición de colisión, el ángulo entre la posición de la partícula en algún tiempo  $t_1$  y la posición de colisión, la velocidad de la partícula tras colisionar, etc.) nos interesa poder implementar todas estas funciones de modo que, en conjunto, generen la trayectoria en dos dimensiones que nos interesa.

Con lo anterior en mente, definimos las siguientes funciones:

- **colision\_Cilindro(Posicion\_Inicial, Velocidad\_Inicial, EjeCil, Centro\_Cilindro, Radio\_Cilindro, Longitud\_Cilindro, Radio\_Partícula)**: Considérese una partícula cuya posición está determinada por el arreglo tres dimensional “Posicion\_Inicial”, con una velocidad asociada a esta posición definida por el arreglo tres dimensional “Velocidad\_Inicial” y un cilindro con centro geométrico en el punto definido por las entradas del arreglo “Centro\_Cilindro”, de altura “Longitud\_Cilindro”, radio de la base de magnitud “Radio\_Cilindro” y cuyo eje de simetría es paralelo al vector con coordenadas cartesianas dadas por el arreglo “EjeCil”.

Tanto la posición como la velocidad de la partícula son tales que la partícula no está contenida dentro del cilindro y la trayectoria que describe en el espacio está contenida en algún plano ortogonal al eje de simetría del cilindro. Pensemos además en que nuestra partícula se moverá por arcos de circunferencia con un radio de magnitud “Radio\_Partícula”.

La función calcula la matriz de rotación que transforma al vector canónico  $\hat{e}_3$  en el vector unitario paralelo al eje de simetría del cilindro ( $M_R$ ) por medio de la función **mat\_Rot()**, así como su inversa ( $W_R$ ). Con la matriz  $W_R$  se rota el

espacio de modo que el cilindro quede vertical y comparamos la diferencia entre la componente  $Z$  de la posición de la partícula ( $P_z$ ) y el centro geométrico del cilindro ( $C_z$ ) con la mitad de la altura del cilindro ( $|P_z - C_z| > \frac{1}{2} \text{Longitud\_Cilindro}$ ), si dicha desigualdad resulta verdadera la partícula se está moviendo en un plano que no intersecta al cilindro, por lo cuál no habrá colisión y la partícula se moverá por una circunferencia cerrada (la función en este momento termina y nos regresa los arreglos “Posicion\_Inicial” y “Velocidad\_Inicial”, así como un tiempo de colisión infinito, véase las imágenes **A)** y **B)** de la figura 4.10); por otro lado si la desigualdad es falsa la partícula se mueve en un plano que contiene una circunferencia debido a la presencia del cilindro por lo que puede haber una colisión entre la partícula y el cilindro, nótese que debido a la condición de que la velocidad de la partícula es tal que la trayectoria de la misma esté contenida en un plano ortogonal al eje de simetría del cilindro y dado que tras rotar el espacio el cilindro ha quedado vertical, podemos reducir el problema al cálculo de la colisión entre una partícula que se mueve en una circunferencia coplanar a un obstáculo circular (problema de dos dimensiones). Véase las imágenes **A’)** y **B’)** de la figura 4.10

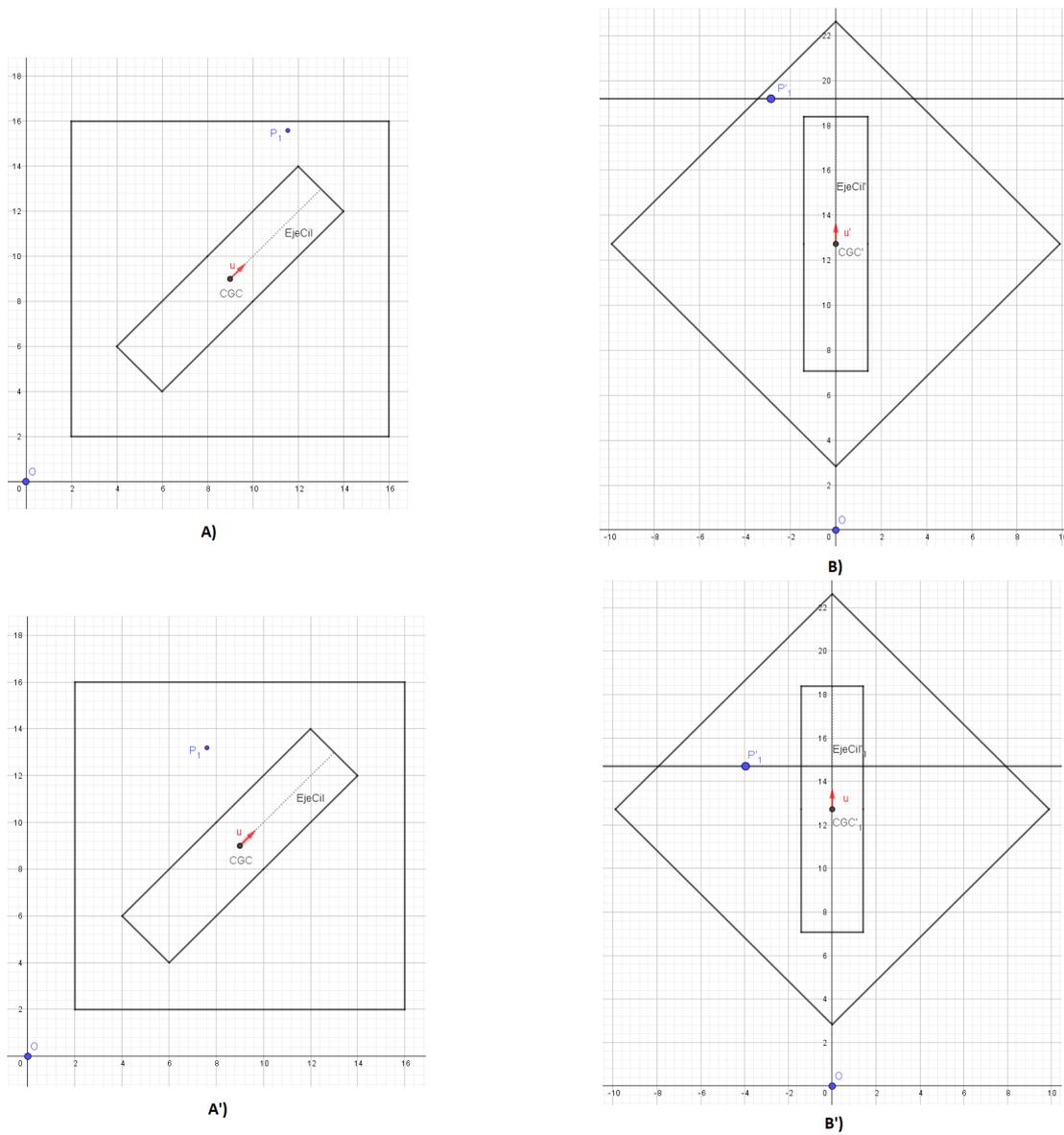
Tomando la proyección al plano  $XY$  de nuestro problema y por medio de las funciones definidas en la subsección “Cálculo de las colisiones” se calculan los parámetros de la colisión (en caso de que exista) tales como la posición de la colisión ( $[PC_x, PC_y]$ ), la velocidad de la partícula tras colisionar y el ángulo recorrido desde la posición inicial de la partícula hasta la posición de la colisión empleando la función `colision_Condensada()`. Para recuperar la información en tres dimensiones agregamos la coordenada  $Z$  de la posición inicial tras haber rotado el espacio (de modo que el cilindro quedara vertical) a las coordenadas  $[PC_x, PC_y]$  del vector de posición de la colisión y rotamos el espacio por medio de la matriz  $M_R$  que regresa al cilindro a su inclinación original.

Finalmente la función nos regresa los arreglos con las coordenadas del punto de colisión, la velocidad de la partícula tras colisionar y el ángulo recorrido por la partícula tras haber rotado el espacio de modo que el cilindro esté en su inclinación original.

- **avanza(Posicion\_Inicial, Velocidad\_Inicial, EjeCil, Radio\_Partícula,  $\Delta t$ ):** La idea detrás de esta función es básicamente la misma que la empleada para la función `colision_Cilindro()`, con la diferencia de que en este caso no estamos interesados en saber si la partícula va a colisionar o no con el cilindro, si no que, independientemente de ello, vamos a calcular la posición y velocidad de la partícula tras un “tiempo”  $\Delta t$ .

Debido a que en la subsección “Cálculo de las colisiones” se definió a la función `avance()`, la cual calcula la posición y velocidad de una partícula que se mueve en una circunferencia (recorrida en el sentido de las manecillas del reloj) en dos

#### 4. CÓDIGO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN



**Figura 4.10:** Esquema en dos dimensiones de los pasos empleados por la función `colision_Cilindro`; en la columna izquierda tenemos la configuración inicial en donde el punto  $P_1$  representa la posición inicial de la partícula y el rectángulo representa al “cilindro”, tras rotar el espacio por medio de la matriz  $W_R$  llegamos a la configuración de la columna derecha, la recta horizontal que pasa por el punto  $P'_1$  representa al plano ortogonal al eje del cilindro en donde está constreñida a moverse la partícula.

dimensiones tras un tiempo  $\Delta t$ , el objetivo es poder emplear dicha función para obtener la velocidad y posición de la partícula cuando la circunferencia está en el espacio tres dimensional.

La función calcula la matriz de rotación que transforma al vector canónico  $\hat{e}_3$  en el vector unitario paralelo al eje de simetría del cilindro ( $M_R$ ) por medio de la función `mat_Rot()`, así como su inversa ( $W_R$ ). Con la matriz  $W_R$  se rota el espacio de modo que el cilindro quede vertical, se toma la proyección al plano  $XY$  de la velocidad y la posición iniciales (definidas por los arreglos “Posicion\_Inicial” y “Velocidad\_Inicial” respectivamente) tras haber rotado el espacio, con lo cuál estamos en las hipótesis de la función `avance()`, aplicando dicha función obtenemos la posición y velocidad de la partícula en la proyección al plano  $XY$  tras un tiempo  $\Delta t$ . Finalmente, para recuperar la posición y velocidad en el espacio tres dimensional le agregamos la coordenada  $Z$  de la posición inicial tras haber rotado el espacio por medio de la matriz  $W_R$  al arreglo de la posición arrojado por la función `avance()` y rotamos el espacio con la matriz  $M_R$  de modo que el eje del cilindro esté en la inclinación original.

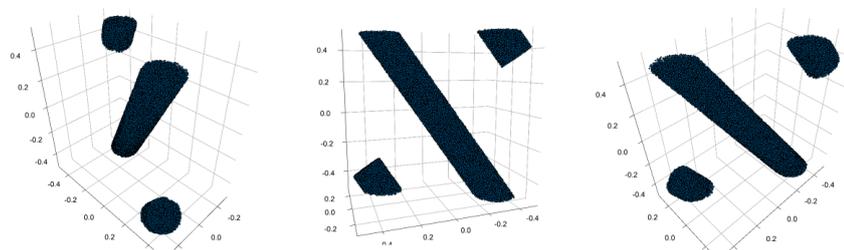
- lorenz\_Cuasi\_Magnetico(Posicion\_Inicial, Velocidad\_Inicial, EjeCil, LadoCaja, Radio\_Partícula, Radio\_Cilindro, Tiempo\_Vuelo, Centros, N\_Caja, Eficiencia = true):** Considérese el espacio tres dimensional cubierto por cubos cuya magnitud de sus aristas es “LadoCaja” de modo que uno de los cubos está centrado en las coordenadas  $(0, 0, 0)$ , cada uno de estos cubos está siendo atravesado por un cilindro cuyo eje de simetría pasa por el centro del cubo paralelo al vector determinado por el arreglo “EjeCil”, la longitud de los cilindros está dada por el algoritmo descrito en la función `longitud_Cilindro()` (un ejemplo de cómo se observa el espacio contenido en cualquiera de los cubos puede encontrarse en las imágenes de la columna central en la figura 4.4).

Si tomamos las condiciones iniciales de nuestra partícula de modo que esta tenga su posición inicial dentro del cubo centrado en el origen (de ahora en adelante, la caja central) podemos describir la trayectoria completa de la partícula en todo el espacio considerando únicamente la caja central y condiciones periódicas a la frontera de dicha caja (nótese que bajo estas hipótesis los segmentos de cilindro que se observaban en la caja central sin considerar condiciones periódicas a la frontera pueden interpretarse como un único cilindro cuyo eje de simetría atraviesa a la caja central por su centro, sujeto a las condiciones periódicas a la frontera).

Si la magnitud del radio del cilindro (`Radio_Cilindro`) que atraviesa a la caja central es lo suficientemente pequeña (en función de la dirección del vector que determina el eje de simetría del cilindro), tendremos que únicamente habrá tres segmentos de cilindro en la caja central (véase la figura 4.11), debido a que los segmentos de cilindro pueden interpretarse tanto como un único cilindro con con-

#### 4. CÓDIGO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN

---



**Figura 4.11:** Distintos ángulos de una gráfica realizada con los puntos obtenidos de la función `posiciones_Iniciales_2()` para visualizar los tres segmentos de cilindro que aparecen en la caja central si el radio de los cilindros es lo suficientemente pequeño. Para este caso en particular las coordenadas cartesianas del vector que determina el eje de simetría del cilindro son  $(1, 2, \pi)$ , la magnitud de las aristas del cubo es igual a una unidad, el radio del cilindro es igual a 0.10 unidades y se consideraron 90000 puntos.

diciones periódicas a la frontera o como la presencia de 26 cilindros alrededor de la caja central más el cilindro que atraviesa a la caja central, el cálculo de las colisiones de la partícula con los segmentos de cilindro puede realizarse haciendo el cálculo de las colisiones de la partícula con los 27 cilindros, o bien, si estamos en el caso en que únicamente hay tres segmentos de cilindro en la caja central, este cálculo de las colisiones considerando 27 cilindros puede reducirse al cálculo de las colisiones considerando únicamente tres cilindros, siendo estos los correspondientes a las cajas con coordenadas  $(0, 0, LadoCaja)$ ,  $(0, 0, 0)$  y  $(0, 0, -LadoCaja)$ . En la función, el usuario puede determinar si se realizará el cálculo considerando los 27 cilindros (`Eficiencia = false`) o si se realizará considerando únicamente los tres cilindros mencionados anteriormente (`Eficiencia = true`) siendo responsabilidad del mismo el uso adecuado del cálculo considerando tres cilindros. En cualquiera de los dos casos, tanto si se consideran los 27 cilindros como si se consideran únicamente tres de ellos, el algoritmo detrás de la función es el siguiente:

Considérese una partícula cuya posición está determinada por el arreglo tres dimensional “`Posicion_Inicial`” (tal que la partícula esté contenida dentro de la caja central con aristas de magnitud “`LadoCaja`”) y con una velocidad asociada a esta posición definida por el arreglo tres dimensional “`Velocidad_Inicial`”. Considérese también un conjunto de 27 cilindros, cuyos ejes de simetría sean paralelos al vector determinado por el arreglo “`EjeCil`” y con radios de magnitud “`Radio_Cilindro`”.

La función calcula la matriz de rotación que transforma al vector canónico  $\hat{e}_3$  en el vector unitario paralelo al eje de simetría del cilindro ( $M_R$ ) por medio de la función `mat_Rot()`, así como su inversa ( $W_R$ ), de igual forma calcula la longitud

de los cilindros en función de la magnitud de las aristas de la caja central (empleando la función **longitud\_Cilindro()**).

Debido a que vamos a generar una trayectoria extendida en todo el espacio a partir de una trayectoria contenida en la caja central considerando condiciones periódicas a la frontera necesitamos almacenar la información, para cada punto sobre la trayectoria que tengamos, de cuál sería el cubo en el que estaría contenida la partícula si no consideráramos condiciones periódicas a la frontera, para ello la función define un arreglo  $[0, 0, 0]$  al cuál se le sumará las coordenadas del centro del cubo que contendría a la partícula en cada paso.

Mientras el parámetro “Tiempo\_Vuelo” sea mayor que cero (el cuál se interpreta como la cantidad de tiempo que se desea que la partícula se desplace o como la cantidad de radianes que la partícula debe desplazarse), la función le aplica condiciones periódicas a la frontera a la posición (hasta ese momento) de la partícula por medio de la función **caja\_Periodica()**, esta función modifica el arreglo asociado a la posición de la partícula y nos arroja las coordenadas del cubo que la contenía.

Para cada uno de los cilindros a considerar (ya sean 3 o 27) se calcula la posición de colisión, la velocidad tras la colisión y el tiempo de colisión de la partícula con dicho cilindro (a través de la función **colision\_Cilindro()**), eligiéndose al final los valores correspondientes al menor tiempo de colisión.

Si el tiempo de colisión es menor que un parámetro  $\delta t$  la nueva posición de la partícula así como su velocidad será la posición de colisión y la velocidad tras la colisión, respectivamente. En este caso se guarda en un arreglo las coordenadas del centro (en dos dimensiones, cuando el cilindro está vertical) del cilindro con el que la partícula colisionó. Al parámetro “Tiempo\_Vuelo” se le resta el tiempo de colisión.

Si el tiempo de colisión es mayor que el parámetro  $\delta t$  la nueva posición de la partícula así como su velocidad será la posición y velocidad de la partícula tras desplazarse ese parámetro  $\delta t$  (empleando la función **avanza()**). Al parámetro “Tiempo\_Vuelo” se le resta el parámetro  $\delta t$ .

La función repite este algoritmo hasta que el parámetro “Tiempo\_Vuelo” sea menor que cero, momento en el que regresa los arreglos asociados a la posición y velocidad de la partícula, así como las coordenadas del cubo en el que estaría contenida la partícula y los centros (en dos dimensiones cuando los cilindros están verticales) de los cilindros con los que la partícula colisionó.

### 4.2. Implementación del código

A partir de las funciones definidas en la sección previa, principalmente de la función `lorentz_Cuasi_Magnetico()`, estamos en condiciones de calcular un número arbitrario de trayectorias, cada una de ellas con un “tiempo” de vuelo arbitrario.

Considérese una configuración del sistema fija dada por la magnitud de las aristas de la caja central “LadoCaja”, la magnitud del radio del cilindro que atraviesa la caja central “Radio.Cilindro” así como el vector paralelo al eje de simetría del cilindro determinado por el arreglo “EjeCil”, la magnitud del radio de las circunferencias por las cuáles se moverá la partícula “Radio\_Trayectoria” y la matriz de rotación que transforma al vector canónico  $\hat{e}_3$  en el vector unitario  $EjeCil$  ( $M_R$ ) así como su inversa ( $W_R$ ).

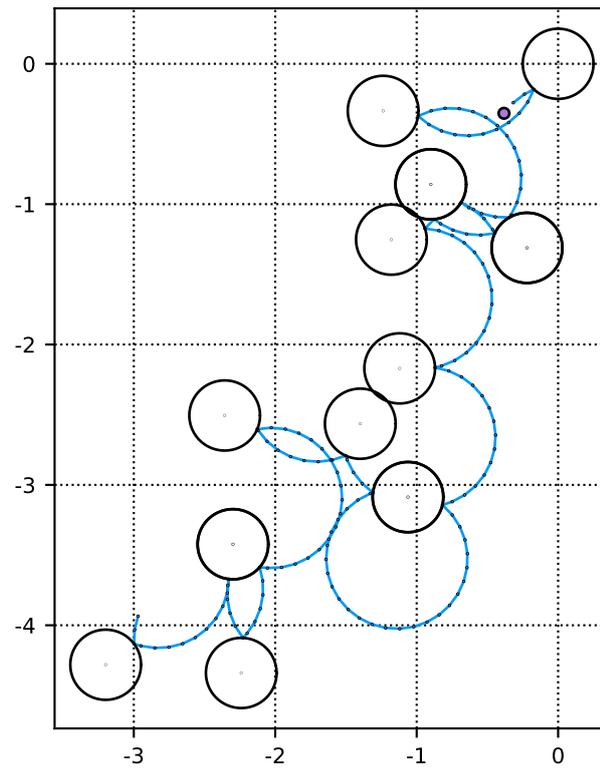
Para cada una de las trayectorias que simulemos definimos las condiciones iniciales de posición y velocidad de nuestra partícula por medio de las funciones `posiciones_Iniciales()` y `vel_Rand()` respectivamente.

Por medio de la matriz  $W_R$  rotamos el espacio tres dimensional de modo que los segmentos de cilindro queden verticales, en este punto guardamos las coordenadas de la posición inicial de la partícula (tras la rotación) en los arreglos “X\_Cil\_Vert”, “Y\_Cil\_Vert” y “Z\_Cil\_Vert” (uno para cada coordenada).

Considerando que el tiempo de vuelo total de nuestra partícula está dado por el parámetro “Tiempo\_Vuelo\_1” realizamos un ciclo `for` desde uno hasta el parámetro “Tiempo\_Vuelo\_1” donde en cada iteración modificamos la posición inicial y velocidad inicial (en tres dimensiones) de nuestra partícula tras un tiempo de vuelo igual a la unidad por medio de la función `lorentz_Cuasi_Magnetico()`, de igual forma en cada iteración almacenamos las coordenadas del cubo que contendría a la partícula si se pudiera desplazar libremente por todo el espacio tres dimensional.

Con esta información podemos determinar, para cada iteración del ciclo `for`, las coordenadas  $X$  y  $Y$  que tendría nuestra partícula en el plano ortogonal al eje del cilindro cuando dicho cilindro se encuentra en posición vertical, simplemente sumamos las coordenadas de la posición de la partícula (en tres dimensiones) relativa al centro de la caja central con las coordenadas del centro del cubo que contendría a dicha partícula, le aplicamos la matriz de rotación  $W_R$  a dicho vector y tomamos la proyección en el plano  $XY$ . Estas coordenadas son almacenadas en los arreglos “X\_Cil\_Vert” y “Y\_Cil\_Vert” respectivamente. Con dichos arreglos y la información sobre los centros de los obstáculos (en dos dimensiones) con los cuales la partícula colisionó, es posible reconstruir la trayectoria de la partícula en el plano dos dimensional ortogonal al eje del cilindro (véase la figura 4.12).

Al final del ciclo `for` los arreglos “X\_Cil\_Vert” y “Y\_Cil\_Vert” contendrán las coor-



**Figura 4.12:** Trayectoria de una partícula moviéndose en un espacio dos dimensional ortogonal al eje de simetría del cilindro. El punto sólido morado más grande en las gráfica corresponde a la posición inicial de la partícula, la cuál se mueve por arcos de circunferencia recorridos en el sentido de las manecillas del reloj. Se consideró un arreglo  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ , radio de giro de la partícula igual a 0.5 unidades y radio de los obstáculos igual a 0.25 unidades.

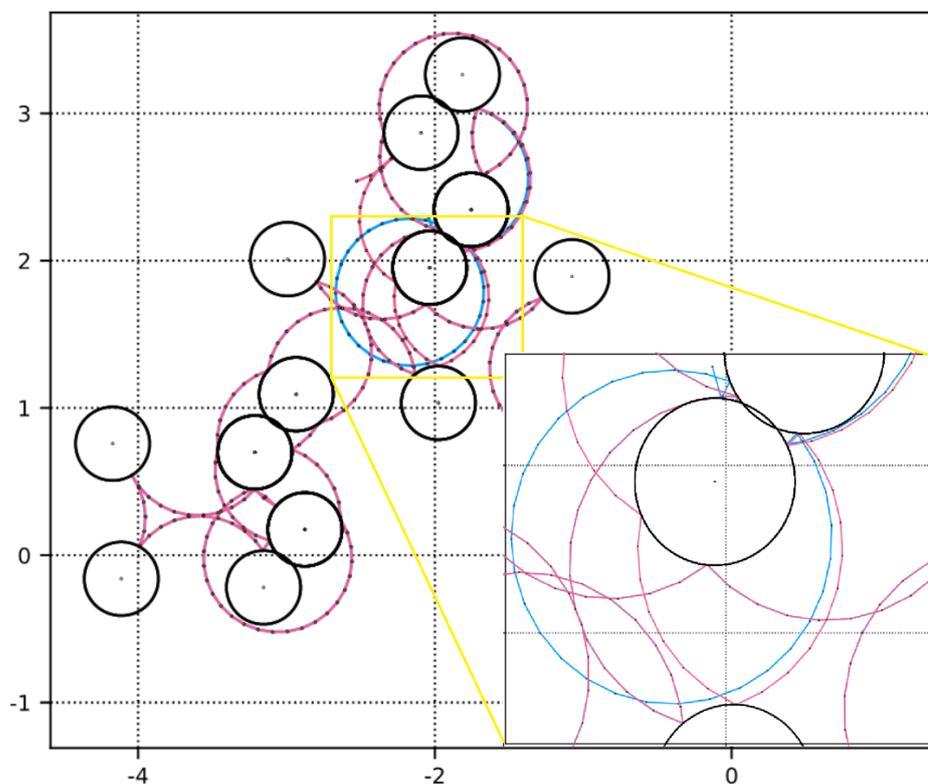
## 4. CÓDIGO Y DETALLES DE LA SIMULACIÓN

---

denadas de la partícula a lo largo de su trayectoria. Este proceso puede repetirse  $N$  veces, con  $N$  el número de trayectorias que se deseen simular. Con las coordenadas de la posición de  $N$  partículas a lo largo de sus trayectorias es posible determinar el desplazamiento cuadrático medio del sistema.

### 4.2.1. Precisión en la simulación

Dada la sensibilidad del sistema que estudiaremos nos interesa contar con una precisión en los cálculos elevada, por lo cual trabajaremos con variables de precisión igual a 256 bits (BigFloat). Lo anterior se justifica debido a la rapidez de acumulación del error numérico que presenta el caso con precisión de 64 bits respecto al de 256 bits, lo que genera trayectorias radicalmente diferentes (veáse la figura 4.13).



**Figura 4.13:** Ejemplo de una trayectoria con condiciones  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ , radio de giro de la partícula igual a 0.5 unidades y radio de los obstáculos igual a 0.25 unidades con precisión de 64 bits (gráfica de color magenta) y con precisión de 256 bits (gráfica de color cyan). En la esquina inferior derecha se ha realizado una ampliación a la sección de la gráfica enmarcada por un rectángulo amarillo para resaltar la zona en la que ambas trayectorias difieren.

## Resultados numéricos y Analíticos

---

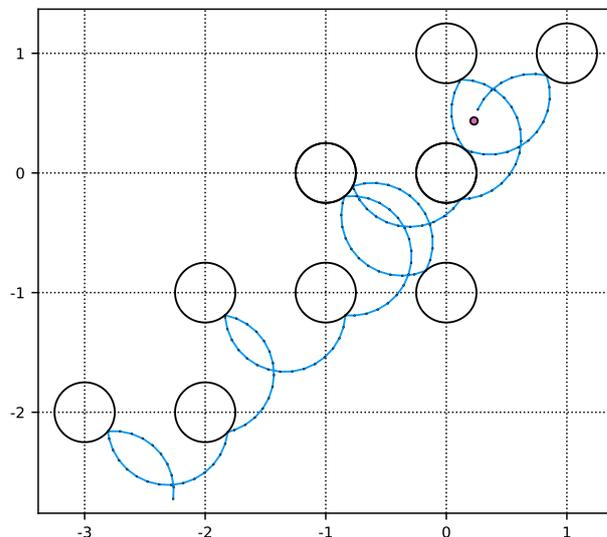
Este capítulo está dedicado a la exhibición y análisis de los resultados obtenidos para las diferentes simulaciones realizadas empleando el código descrito en el capítulo anterior y a hacer el cálculo analítico sobre los límites de localización. Los resultados se dan en términos del radio de trayectoria (de ahora en adelante  $r_t$ ) o el campo magnético ( $B(r_t) = 1/r_t$ ), la inclinación del cilindro central (*EjeCil*) y el radio del obstáculo (de ahora en adelante  $R_c$ ). Puesto que el cilindro es de lado 1, la densidad  $\rho$  de discos del sistema cuasiperiódico se puede calcular simplemente como el volumen del cilindro, junto con sus secciones periodizadas, o lo que es lo mismo  $\rho(R_c, EjeCil) = \pi R_c^2 h(EjeCil)$ , donde  $h(EjeCil)$  es la longitud del cilindro (como función de la inclinación del cilindro) que se puede calcular con la función **longitud\_Cilindro**.

### 5.1. Trayectorias

Los primeros resultados que se presentan, son simplemente un test de que el código funciona correctamente, es decir, las trayectorias de las partículas son circulares y colisionan con los obstáculos de forma especular.

En la figura 5.1 se muestra un ejemplo de estas trayectorias para un caso periódico. Como ya se ha visto en otros trabajos [9], en el caso periódico se pueden obtener trayectorias tipo balístico (veáse la figura 5.2), donde el flujo neto de las partículas va sobre canales. Para hacer esta figura se utilizó un vector de dirección  $EjeCil = [1, 0, 0]$ , un radio de trayectoria  $r_t = 0.5$ , y un radio de obstáculo  $R_c = 0.25$ .

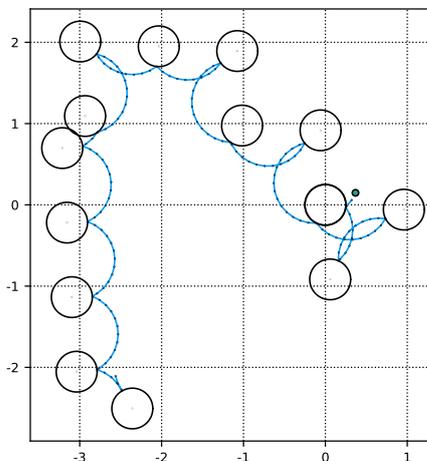
En la figura 5.3 se muestra un ejemplo del mismo tipo de condiciones iniciales para el radio de giro de la partícula y el radio de los obstáculos, pero sobre una configuración cuasi-periódica. Se puede apreciar que a pesar de haber canales en el sistema cuasiperiódico, no hay trayectorias que sean de tipo balístico, aunque existen trayectorias cuyos segmentos parecen seguir una trayectoria balística por un tiempo finito antes de ser destruidas a causa de la cuasi-periodicidad de los obstáculos. Se hizo un esfuerzo



**Figura 5.1:** Ejemplo de una trayectoria en un gas de Lorentz periódico obtenida con el código descrito en el capítulo 4 del presente trabajo. Para este caso en particular se emplearon las condiciones  $EjeCil = [1, 0, 0]$ ,  $r_t = 0.5$ ,  $R_c = 0.25$ . El punto naranja corresponde a la posición inicial de la partícula.



**Figura 5.2:** Ejemplo de una trayectoria balística en un gas de Lorentz periódico obtenida con el código descrito en el capítulo 4 del presente trabajo. Para este caso en particular se emplearon las condiciones  $EjeCil = [1, 0, 0]$ ,  $r_t = 0.5$ ,  $R_c = 0.25$ . El punto naranja corresponde a la posición inicial de la partícula. Por cuestiones de dimensión esta trayectoria fue retocada para permitir una correcta visualización de la misma, eliminando los ejes coordenados y redimensionándola.



**Figura 5.3:** Ejemplo de una trayectoria en un gas de Lorentz cuasi-periódico obtenida con el código descrito en el capítulo 4 del presente trabajo. Para este caso en particular se emplearon las condiciones  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ ,  $r_t = 0.5$ ,  $R_c = 0.25$ . El punto verde sólido más grande corresponde a la posición inicial de la partícula.

por buscar esta clase de trayectorias, pero no se logró encontrar ninguna. Para hacer esta figura se utilizó un vector de dirección  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ , un radio de trayectoria  $r_t = 0.5$ , y un radio de obstáculo  $R_c = 0.25$ .

## 5.2. Desplazamiento cuadrático medio

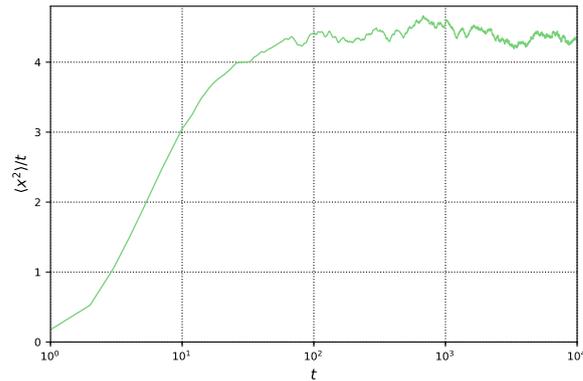
Una vez probado el código, revisando que se podían obtener el mismo tipo de trayectorias que en el sistema periódico y que en el sistema cuasiperiódico no parecía haber esta clase de situación, se pasó a medir el desplazamiento cuadrático medio para dos densidades y vectores de dirección diferentes.

En el primer caso, el cilindro central se eligió con un eje de simetría paralelo al vector  $(1, 2, \pi)$  con radio de la base igual a 0.10 unidades. Para esta configuración particular se tomaron en cuenta 18 valores diferentes para el radio de giro de las partículas en dicho sistema, siendo estos  $\{50, 100/3, 25, 20, 10, \frac{20}{3}, \frac{10}{2}, \frac{20}{5}, \frac{10}{3}, 3, \frac{20}{7}, \frac{10}{4}, 2, \frac{10}{6}, \frac{10}{7}, \frac{10}{8}, \frac{10}{9}, 1\}$  asociados a los campos magnéticos (salvo constantes)  $\{0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25, 0.3, 1/3, 0.35, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1\}$  respectivamente; para cada uno de los diferentes valores de radio de giro de las partículas se realizó la simulación de 1,000 partículas, cada una con un tiempo de vuelo igual a 10,000 unidades, con las cuales se realizó el cálculo del desplazamiento cuadrático medio del sistema para cada valor de radio de giro de la partícula considerado como función del tiempo de vuelo de las partículas.

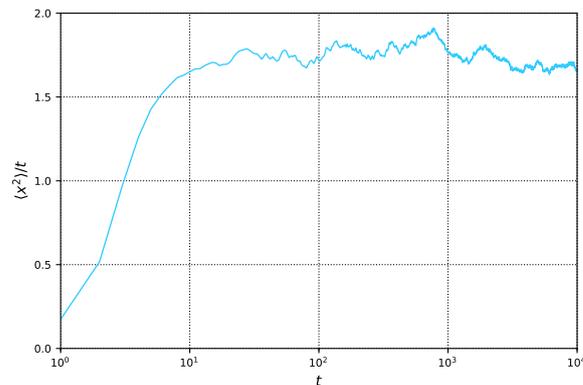
## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS

---

En las figuras 5.4 y 5.5 se muestran algunas de las gráficas obtenidas al visualizar el desplazamiento cuadrático medio entre el tiempo de vuelo como función del tiempo de vuelo (en escala semilogarítmica) correspondientes a los radios de giro 50 y 10/6.

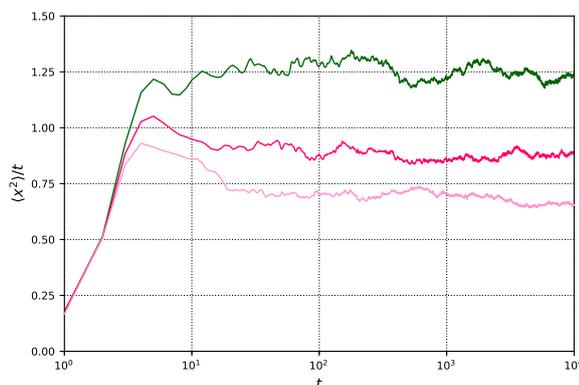


**Figura 5.4:** Desplazamiento cuadrático medio entre tiempo de vuelo (eje Y) contra tiempo de vuelo (eje X) en escala semilogarítmica para una partícula con radio de giro igual a 50 unidades en un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.10 unidades. Cada punto de la gráfica se obtuvo promediando 1,000 partículas.



**Figura 5.5:** Desplazamiento cuadrático medio entre tiempo (eje Y) de vuelo contra tiempo de vuelo (eje X) en escala semilogarítmica para una partícula con radio de giro igual a 10/6 unidades en un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.10 unidades. Cada punto de la gráfica se obtuvo promediando 1,000 partículas.

En la figura 5.6 se muestran las gráficas obtenidas para los radios de giro  $10/8$ ,  $10/9$  y  $1$ .

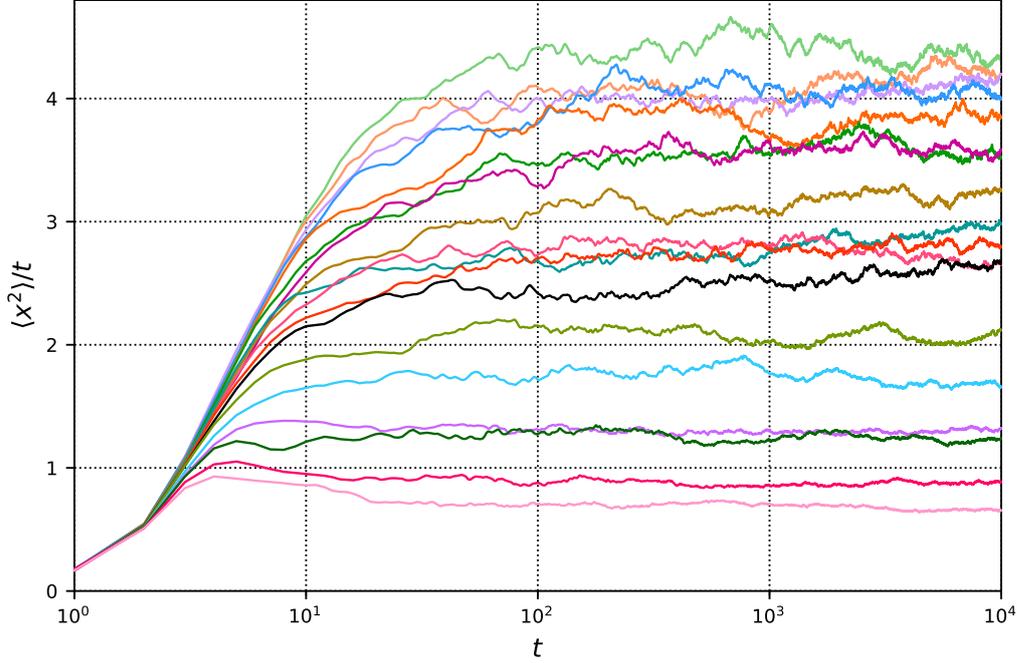


**Figura 5.6:** Desplazamiento cuadrático medio entre tiempo (eje  $Y$ ) de vuelo contra tiempo (eje  $X$ ) en escala semilogarítmica para tres partículas con radios de giro igual a  $10/8$ ,  $10/9$  y  $1$  unidades en un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a  $0.10$  unidades. Cada punto de la gráfica se obtuvo promediando  $1,000$  partículas.

De las gráficas contenidas en 5.6 nótese cómo el valor de  $\langle x^2 \rangle / t$  alcanza un máximo local para tiempos de vuelo relativamente bajos y eventualmente se estabiliza tras una ventana temporal en la que  $\langle x^2 \rangle / t$  decae, intervalo temporal que parece aumentar conforme el radio de giro disminuye. Este comportamiento transitorio entre el máximo local y la estabilización de  $\langle x^2 \rangle / t$  a una recta horizontal nos indica que el sistema pasa de ser subdifusivo en esta ventana temporal a presentar una difusión normal.

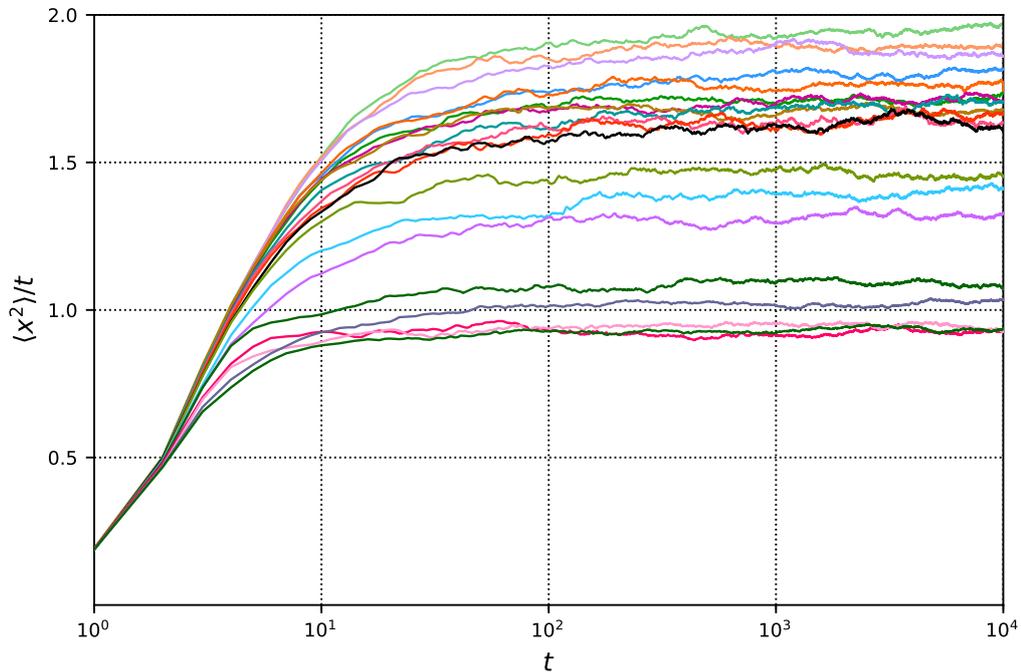
En la gráfica 5.7 se muestran las 18 curvas obtenidas para cada uno de los diferentes radios de giro en una escala semilogarítmica. Nótese que existen curvas que se intersectan entre ellas y que presentan un comportamiento bastante ruidoso, sobre todo para radios de giro grandes es decir, campos magnéticos pequeños. Lo anterior puede deberse a una falta de estadística causada por el número de partículas (trayectorias) empleadas para obtener el desplazamiento cuadrático medio. Se espera que considerando un mayor número de partículas dichas curvas sean más suaves y no se intersecten entre ellas, sin embargo por cuestiones de capacidad de cómputo disponible al momento de realizar dichas simulaciones no es posible alcanzar una mejor estadística. Sin embargo a grandes rasgos todas las gráficas parecen tender a una recta horizontal hacia el final de los tiempos de vuelo considerados.

## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS



**Figura 5.7:** Desplazamiento cuadrático medio entre tiempo de vuelo (eje Y) contra tiempo de vuelo (eje X) en escala semilogarítmica para una partícula en un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.10 unidades. Cada curva corresponde a los diferentes valores del radio de giro de la partícula, siendo esta relación: 50, 100/3, 25, 20, 10, 20/3, 10/2, 20/5, 10/3, 3, 20/7, 10/4, 2, 10/6, 10/7, 10/8, 10/9 y 1. Cada punto de cada curva se obtuvo promediando 1,000 partículas.

Para el segundo caso analizado el cilindro central se eligió con un eje de simetría paralelo al vector  $(1, \sqrt{2}, \pi)$  con radio de la base igual a 0.2 unidades. Para esta configuración particular se tomaron en cuenta 20 valores diferentes para el radio de giro de las partículas en dicho sistema, siendo estos  $\{\frac{100}{2}, \frac{100}{3}, \frac{100}{4}, \frac{100}{5}, \frac{100}{6}, \frac{100}{7}, \frac{100}{8}, \frac{100}{9}, 10, \frac{10}{2}, \frac{10}{3}, \frac{10}{4}, \frac{10}{5}, \frac{10}{6}, \frac{10}{7}, \frac{10}{8}, \frac{10}{9}, 1, \frac{10}{11}, \frac{10}{12}\}$  asociados a los campos magnéticos (salvo constantes)  $\{0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06, 0.07, 0.08, 0.09, 1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.1, 1.2\}$  respectivamente; para cada uno de los diferentes valores de radio de giro de las partículas se realizó la simulación de 10,000 partículas, cada una con un tiempo de vuelo igual a 10,000 unidades, con los cuales se realizó el cálculo del desplazamiento cuadrático medio del sistema para cada valor de radio de giro de la partícula considerado como función del tiempo de vuelo de las partículas. En la gráfica 5.8 se exhiben las 20 curvas obtenidas al graficar el desplazamiento cuadrático medio entre el tiempo de vuelo como función del tiempo de vuelo para cada uno de los diferentes radios de giro en una escala semilogarítmica.



**Figura 5.8:** Desplazamiento cuadrático medio entre tiempo de vuelo (eje Y) contra tiempo de vuelo (eje X) en escala semilogarítmica para una partícula en un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.20 unidades. Cada curva corresponde a los diferentes valores del radio de giro de la partícula, siendo esta relación:  $100/2$ ,  $100/3$ ,  $100/4$ ,  $100/5$ ,  $100/6$ ,  $100/7$ ,  $100/8$ ,  $100/9$ ,  $10$ ,  $10/2$ ,  $10/3$ ,  $10/4$ ,  $10/5$ ,  $10/6$ ,  $10/7$ ,  $10/8$ ,  $10/9$ ,  $1$ ,  $10/11$  y  $10/12$ . Cada punto de cada curva se obtuvo promediando 10,000 partículas.

### 5.3. Coeficientes de Difusión

Para el primer caso, de la gráfica 5.7 se observa que para tiempos de vuelo cercanos a las 10,000 unidades las curvas se aproximan bastante bien a rectas horizontales, lo que nos indica que el sistema presenta una difusión normal para tiempos de vuelo grandes. Para cada una de estas curvas se tomó el promedio de los últimos 1,000 valores, asociando el valor numérico obtenido de dicha forma al coeficiente de difusión ( $D$ ) del sistema bajo las características que definen al sistema en cada curva.

Los valores obtenidos para el coeficiente de difusión del sistema como función del campo magnético  $B = 1/r$  con  $r$  el radio de giro de la partícula, así como su error porcentual asociado se exponen en la tabla 5.1.

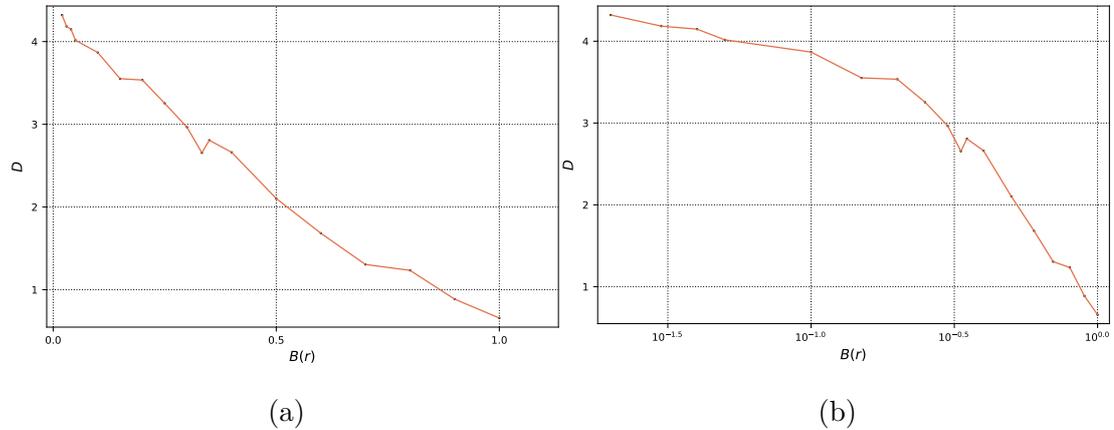
## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS

---

Campo magnético $B = 1/r$	Coefficiente de difusión $D$	Error porcentual [%]
0.02	4.32024	1.8364
0.03	4.18419	2.2085
0.04	4.14768	2.3557
0.05	4.01692	1.2709
0.10	3.86752	2.0572
0.15	3.55158	2.9800
0.20	3.53531	2.6372
0.25	3.25399	1.0935
0.30	2.96480	2.0680
0.33	2.65559	1.4802
0.35	2.80717	0.9677
0.40	2.66139	1.8407
0.50	2.10343	1.4003
0.60	1.68281	1.6643
0.70	1.30543	0.7441
0.80	1.23399	0.4868
0.90	0.88591	0.3848
1.00	0.65774	0.4210

**Tabla 5.1:** Tabla con los valores correspondientes a los coeficientes de difusión y sus errores porcentuales como función del campo magnético para un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.10 unidades.

En las gráficas 5.9 se muestran los valores del coeficiente de difusión como función del campo magnético para diferentes configuraciones de los ejes coordenados.



**Figura 5.9:** Coeficientes de difusión  $D$  (eje  $Y$ ) contra campo magnético  $B = \frac{1}{r}$  (eje  $X$ ) donde  $r$  corresponde al radio de giro de la partícula generado por el arreglo  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.10 unidades. (a) En escala normal. (b) Escala logarítmica sobre el eje  $x$ . Las barras de error en este caso se han omitido debido a la magnitud de las mismas.

De la gráfica 5.9(b) nótese lo que parecen ser dos regiones diferentes para el comportamiento del coeficiente de difusión como función del campo magnético. El primero de ellos corresponde al intervalo de  $B = (0.02, 0.15)$  donde a grandes rasgos el comportamiento parece ser lineal mientras que el segundo de ellos está asociado al intervalo de  $B = (0.2, 1)$  donde se puede apreciar otro comportamiento similar.

Para el segundo caso, de la gráfica 5.8 se observa que para tiempos de vuelo cercanos a las 10,000 unidades las curvas se aproximan bastante bien a rectas horizontales, lo que nos indica que el sistema presenta una difusión normal para tiempos de vuelo grandes. Para cada una de estas curvas se tomó el promedio de los últimos 1,000 valores, asociando el valor numérico obtenido de dicha forma al coeficiente de difusión ( $D$ ) del sistema bajo las características que definen al sistema en cada curva.

Los valores obtenidos para el coeficiente de difusión del sistema como función del campo magnético  $B = 1/r$  con  $r$  el radio de giro de la partícula, así como su error porcentual asociado se exponen en la tabla 5.2.

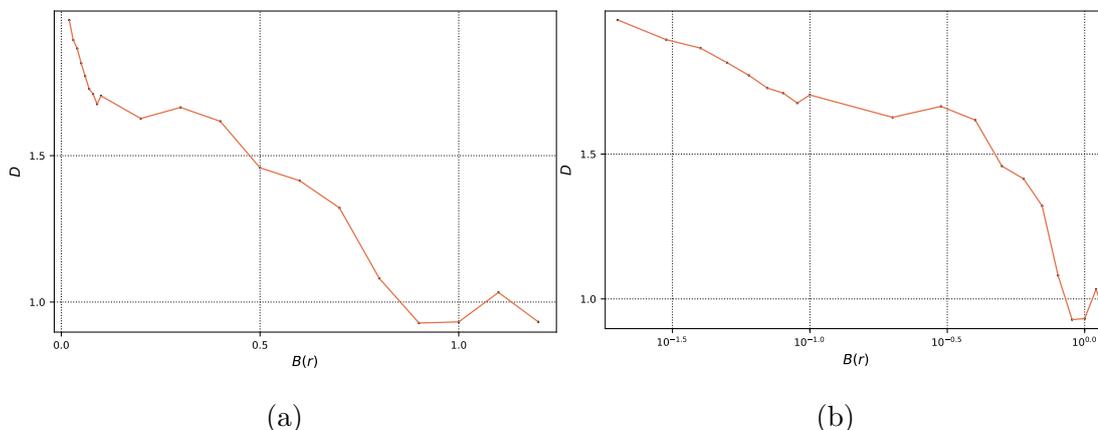
## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS

---

Campo magnético $B = 1/r$	Coefficiente de difusión $D$	Error porcentual [%]
0.02	1.96281	0.1919
0.03	1.89497	0.1347
0.04	1.86578	0.1797
0.05	1.81542	0.1301
0.06	1.77183	0.1998
0.07	1.72798	0.2311
0.08	1.71036	0.1958
0.09	1.67611	0.1463
0.10	1.70409	0.0972
0.20	1.62675	0.3199
0.30	1.66466	0.1597
0.40	1.61722	0.2185
0.50	1.45848	0.2741
0.60	1.41426	0.3344
0.70	1.32146	0.2952
0.80	1.08123	0.3976
0.90	0.92842	0.1910
1.00	0.93221	0.3181
1.10	1.03301	0.1808
1.20	0.93246	0.1796

**Tabla 5.2:** Tabla con los valores correspondientes a los coeficientes de difusión y sus errores porcentuales como función del campo magnético para un gas de Lorentz cuasi-periódico determinado por el arreglo  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.20 unidades.

En las gráficas 5.10 se muestran los valores del coeficiente de difusión como función del campo magnético para diferentes configuraciones de los ejes coordenados.



**Figura 5.10:** Coeficientes de difusión  $D$  (eje  $Y$ ) contra campo magnético  $B = \frac{1}{r}$  (eje  $X$ ) donde  $r$  corresponde al radio de giro de la partícula para un gas de Lorentz cuasi-periódico generado por el arreglo  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  con radio de los obstáculos igual a 0.20 unidades. (a) En escala normal. (b) Escala logarítmica sobre el eje  $x$ . Las barras de error en este caso se han omitido debido a la magnitud de las mismas.

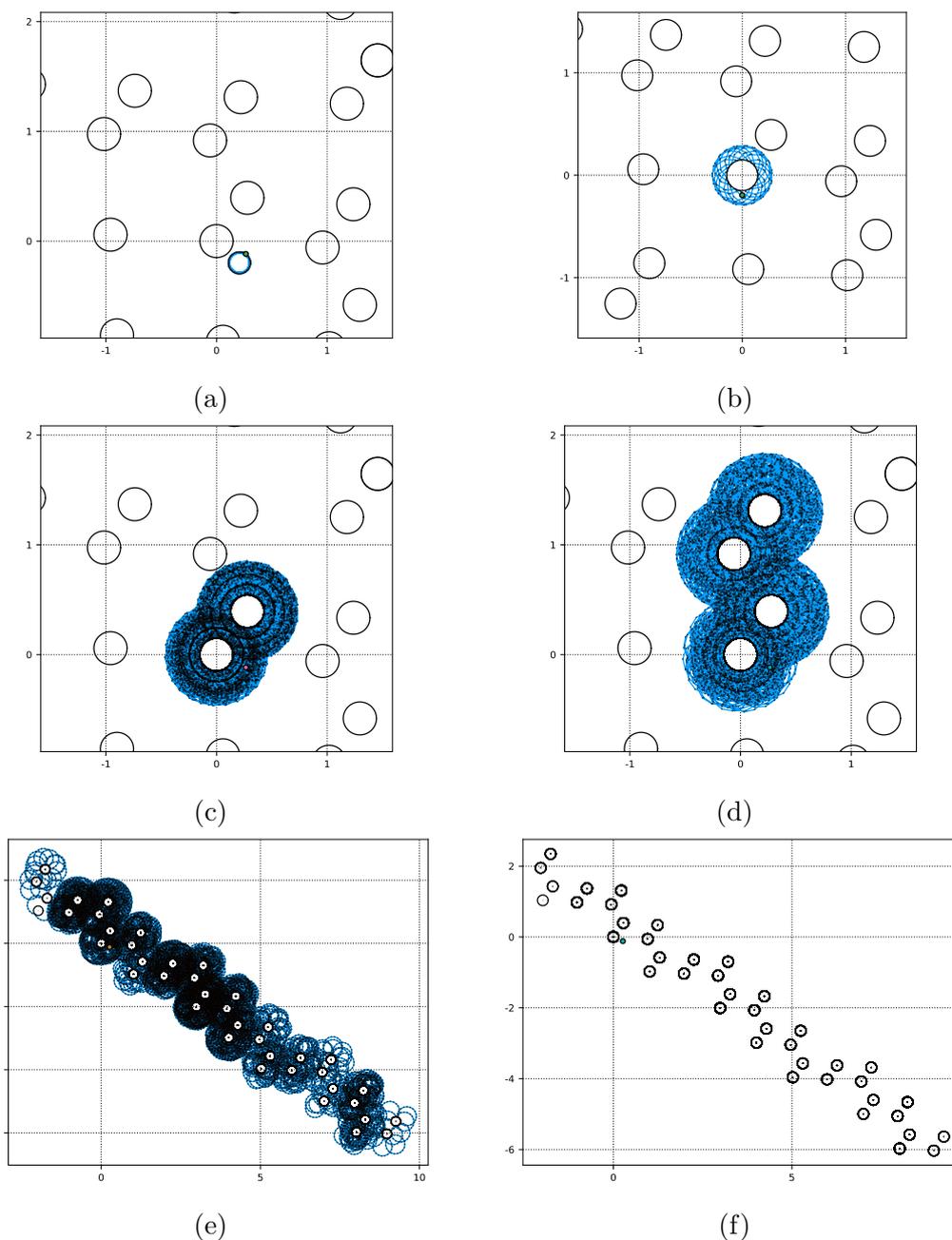
De la gráfica 5.10(b) nótese lo que nuevamente parecen ser dos regiones diferentes para el comportamiento del coeficiente de difusión como función del campo magnético. El primero de ellos corresponde al intervalo de  $B = (0.02, 0.09)$  donde a grandes rasgos el comportamiento parece ser lineal mientras que el segundo de ellos está asociado al intervalo de  $B = (0.4, 0.9)$  donde se puede apreciar otro comportamiento similar. Es digno de resaltarse el pico que surge en el valor de  $B = 1.1$  así como la región  $B = (0.1, 0.3)$  donde la curva se muestra aproximadamente plana.

## 5.4. Cálculo analítico del límite de localización

Al incrementar el campo magnético en un gas de Lorentz cuasi-periódico con una densidad de obstáculos baja ( $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ ), las trayectorias de las partículas reducen su radio hasta el punto de formar trayectorias que se pueden delimitar a una región fija. En algunos casos sin colisionar con ningún obstáculo, como en la figura 5.11 (a) o bien, que colisione con un solo obstáculo como el caso de la figura 5.11 (b), con 2 obstáculos como en el caso de la figura 5.11 (c), con 4 obstáculos como en el caso de la figura 5.11 (d) o que la partícula sólo colisione con algunos obstáculos dentro de una franja unidireccional como en el caso de las figuras 5.11 (e) y 5.11 (f).

En particular nótese que la trayectoria exhibida en 5.11 (e) no parece estar localizada aunque colisiona una cantidad de tiempo considerable entre cuatro obstáculos como en el caso 5.11 (d) antes de colisionar con otro par de obstáculos diferentes.

## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS



**Figura 5.11:** Ejemplos de trayectorias delimitadas en una región fija para una partícula en un gas de Lorentz cuasi-periódico, para las gráficas (a)-(d) se muestran los obstáculos que conforman al gas de Lorentz cuasi-periódico, mientras que para las gráficas (e) y (f) sólo se muestran los obstáculos del gas de Lorentz cuasi-periódico con los que la partícula colisiona. En este caso en particular se empleó un arreglo  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  y un radio de obstáculos  $R_c = 0.15$  unidades. (a)  $r_t = 0.10$  unidades. (b)  $r_t = 0.17$  unidades. (c)  $r_t = 0.16$  unidades. (d)  $r_t = 0.19$  unidades. (e)  $r_t = 0.30$  unidades. (f) Obstáculos con los que colisionó la partícula en el caso (e).

Estos comportamientos se deben a las distancias que existen entre los obstáculos las cuales son función del vector de dirección del cilindro y el radio de los obstáculos, por ejemplo, si el radio de giro de la partícula es menor que la mínima distancia entre dos obstáculos cualesquiera del gas de Lorentz cuasi-periódico, entonces la trayectoria que describa dicha partícula será cerrada sobre si misma sin colisionar con ningún obstáculo o bien será una trayectoria similar a la mostrada en 5.11 (b), mientras que al ir aumentado dicho radio de giro la trayectoria de la partícula puede adoptar otros comportamientos, como el expuesto en 5.11 (c), 5.11 (d), etc.

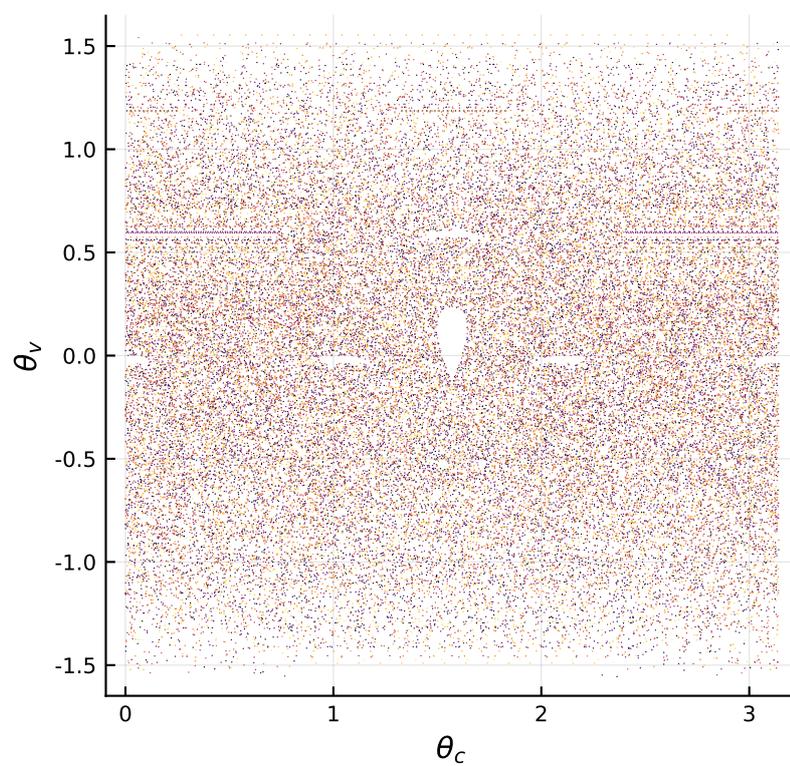
Debido al papel que juegan dichas distancias en el comportamiento que pueden adoptar las trayectorias de algunas partículas en el gas de Lorentz cuasi-periódico, procedemos a describir el método para determinar dichas distancias:

Sea  $P_0 = (0, 0, 0)$  el centro geométrico de la caja central y  $P_i$  el centro geométrico del cubo  $i$ -ésimo adyacente a la caja central, con  $i = \{1, 2, 3, \dots, 26\}$ . Sea  $W = P_0 - P_i$  el vector que conecta ambos centros y  $V$  un vector paralelo al eje de simetría del cilindro que atraviesa la caja central. Sea  $W_V = \frac{W \cdot V}{\|V\|^2} V$  la componente de  $W$  sobre el eje de simetría del cilindro, de modo que  $W_\perp = W - W_V$  es la componente de  $W$  ortogonal al eje de simetría del cilindro. Como  $W$  es el vector que conecta ambos centros de las cajas y cada caja contiene un cilindro que la atraviesa cuyo eje de simetría pasa por el centro geométrico de dicha caja, la norma de  $W_\perp$  corresponde a la distancia entre ambos ejes de simetría de los cilindros; como los cilindros tienen un radio de la base igual a  $R_c$ , la distancia entre ambos cilindros está dada por  $d_c = \|W_\perp\| - 2R_c$ . Iterando este proceso para los 26 centros geométricos de los cubos adyacentes a la caja central se puede determinar las distancias mínimas entre obstáculos.

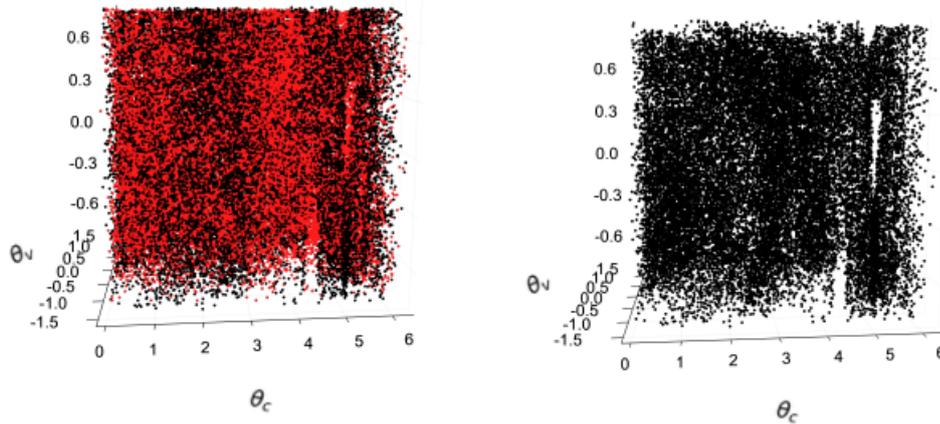
## 5.5. Mapeo de Poincaré

Como se mencionó previamente, para el caso periódico de un gas de Lorentz con campo magnético externo existen trayectorias balísticas, lo cual en un mapeo de Poincaré del sistema se aprecian como islas dentro del mismo. Con el objetivo de corroborar el buen funcionamiento de nuestro código se replicó el mapeo de Poincaré para un gas de Lorentz periódico en presencia de campo magnético, obteniéndose la gráfica 5.12 donde se aprecia claramente una de estas islas.

Con el fin de revisar si existen trayectorias estables de tipo balístico como en el caso periódico para el caso cuasi-periódico, se hizo un mapeo de Poincaré 3-dimensional para el sistema generado con  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ ,  $r_t = 10/11$  y  $R_c = 0.23$  tomando el ángulo de la velocidad con respecto al plano tangente al cilindro con el que colisiona la partícula, el ángulo entre el radio que une al eje del cilindro con el punto de colisión entre la partícula y el cilindro y un plano fijo que contenga al eje del cilindro y finalmente la



**Figura 5.12:** Mapeo de Poincaré para un gas de Lorentz periódico en presencia de un campo magnético externo.



**Figura 5.13:** Mapeo de Poincaré para un gas de Lorentz cuasi-periódico generado por el arreglo  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  y los parámetros  $r_t = 10/11$  y  $R_c = 0.23$  en presencia de un campo magnético externo. Los puntos negros corresponden a una trayectoria con condiciones iniciales aleatorias. Los puntos rojos corresponde a una trayectoria con las siguientes condiciones iniciales:  $\theta_c = 4.5$ ,  $\theta_v = 3.9415927$  y  $h = -0.4$ , donde  $\theta_c$ ,  $\theta_v$  y  $h$  son el ángulo inicial alrededor del cilindro, el ángulo de la velocidad inicial y la altura inicial sobre el cilindro.

altura a la que colisiona la partícula sobre el cilindro. Esto se puede ver en la figura 5.13.

Nótese que en la gráfica 5.13 con puntos negros correspondiente a condiciones iniciales aleatorias se puede apreciar la existencia de una isla en el mapeo de Poincaré, con lo cual existen condiciones iniciales para el sistema descrito en el párrafo anterior tal que no llena por completo el espacio fase, con lo cual el sistema no es ergódico en dichas condiciones.

Por otro lado, en la gráfica 5.13 con puntos rojos asociados a condiciones iniciales dentro de las islas en los mapeos de Poincaré previos parece que estos últimos llenan de manera densa el espacio fase, lo que indica la existencia de dos comportamientos esencialmente diferentes para el sistema considerado. Debido a que el sistema es reversible en el tiempo, los conjuntos de puntos en cada mapeo de Poincaré parecen ser ajenos entre sí (al menos para los tiempos finitos considerados, en caso de que no fueran ajenos el mapeo mostrado en 5.13 con puntos negros no debería exhibir las islas que presenta), aunque existe la probabilidad de que la intersección de ambos conjuntos de puntos generados por los mapeos de Poincaré sea distinta del vacío, en cuyo caso dicha pro-

## 5. RESULTADOS NUMÉRICOS Y ANALÍTICOS

---

bilidad debe ser muy pequeña. En este sentido hace falta realizar una investigación más detallada al respecto, la cual escapa de los alcances de este trabajo.

---

## Capítulo 6

# Conclusiones

---

El gas de Lorentz cuasi-periódico dos dimensional generado por el vector  $EjeCil = [1, 2, \pi]$  con radio de obstáculos  $R_c = 0.1$  presenta una difusión normal para campos magnéticos cuya magnitud está en el intervalo  $[0.02, 1]$  tras tiempos largos. Para campos magnéticos cuya magnitud es cercana a  $B = 1.0$  ( $B = \{0.8, 0.9, 1.0\}$ ) existe una ventana temporal en la cual el sistema presenta subdifusión, dicha ventana temporal parece aumentar conforme la magnitud del campo magnético aumenta.

El coeficiente de difusión como función del campo magnético parece dividirse en dos regiones, cada una de ellas semejantes a un comportamiento lineal al visualizar dicha gráfica en una escala semilogarítmica.

El gas de Lorentz cuasi-periódico dos dimensional generado por el vector  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  con radio de obstáculos  $R_c = 0.2$  presenta una difusión normal para campos magnéticos cuya magnitud está en el intervalo  $[0.02, 1.2]$  tras tiempos largos. El caso particular de  $B = 1.1$  presenta una anomalía respecto al comportamiento esperado para el coeficiente de difusión asociado a dicha intensidad del campo magnético aumentando con respecto a sus vecinos, esta anomalía llama demasiado la atención y queda como posible trabajo futuro el entender su existencia.

El coeficiente de difusión como función del campo magnético parece dividirse en dos regiones lineales y una región con una pendiente cercana a cero al visualizar dicha gráfica en una escala semilogarítmica.

Queda como posible trabajo a futuro explorar el comportamiento de la difusión del sistema para intervalos de campos magnéticos más amplios, así como diferentes configuraciones que den lugar a densidades de obstáculos más altas.

Para un gas de Lorentz cuasi-periódico dos dimensional generado por los parámetros  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$  y  $R_c = 0.15$  se observó la existencia de 6 posibilidades para las trayectorias que presenta una partícula en dicho sistema. Estas posibilidades están

## 6. CONCLUSIONES

---

asociadas al radio de giro de las partículas y son, de menor a mayor radio de giro:

- Trayectorias cerradas sobre sí mismas sin colisionar con ningún obstáculo.
- Trayectorias colisionando con un único obstáculo (flores).
- Trayectorias colisionando alrededor de dos obstáculos.
- Trayectorias colisionando alrededor de cuatro obstáculos.
- Trayectorias acotadas por una franja.
- Trayectorias tipo caminante aleatorio por todo el sistema.

De estas posibilidades las primeras cuatro están localizadas, es decir, el sistema no presenta difusión para dichas trayectorias. Respecto a la trayectoria acotada por una franja conjeturamos que su difusión debe ser equivalente a la de un caminante aleatorio si se reescala el tiempo de vuelo, pues en dichas trayectorias la partícula pasa mucho tiempo colisionando alrededor de cuatro obstáculos antes de tener un movimiento hacia otros obstáculos. Determinar dicha conjetura queda abierto como un posible trabajo a futuro debido al tiempo de cómputo requerido para simular trayectorias con tiempos de vuelo elevados.

Considerando un gas de Lorentz cuasi-periódico dos dimensional generado por los parámetros  $EjeCil = [1, \sqrt{2}, \pi]$ ,  $r_t = 10/12$  y  $R_c = 0.23$  se observaron dos conjuntos de condiciones iniciales para el sistema, cada uno de los cuales genera mapeos de Poincaré esencialmente distintos. En uno de los casos el mapeo de Poincaré presentó islas, llenando de manera aparentemente densa el resto del espacio fase visualizado; el segundo caso correspondiente a condiciones iniciales dentro de las islas visualizadas en el caso anterior llenó de manera aparentemente densa todo el espacio fase considerado.

Debido a la reversibilidad temporal del sistema, ambos conjuntos deben ser ajenos entre sí pues, de lo contrario, un punto en el mapeo de Poincaré que presenta islas debería, eventualmente, ingresar a alguna de las islas presentes, lo que conllevaría a una contradicción pues dicha isla en realidad no existiría. Pese a lo anterior, es posible que exista una cierta probabilidad de que ambos conjuntos no sean ajenos, pero que dicha probabilidad sea lo suficientemente baja para que así lo parezca en los tiempos finitos considerados.

### 6.1. Trabajos futuros

De los resultados obtenidos en el capítulo anterior quedan abiertas varias cuestiones respecto al comportamiento de los gases de Lorentz cuasi-periódicos, entre las que destacan las siguientes:

- Estudiar el comportamiento dinámico de un gas de Lorentz cuasi-periódico generado por un método de corte y proyección desde una dimensión más alta.
- Revisar las propiedades de las islas presentes en el mapeo de Poincaré tales como el volumen de dichas regiones o la difusión que presenta el sistema si sólo se consideran condiciones iniciales dentro de una isla.
- Estudiar la difusión del sistema cuando la densidad de los obstáculos en el gas de Lorentz cuasi-periódico es alta.
- Estudiar el comportamiento dinámico del gas de Lorentz cuasi-periódico al permitir la interacción entre partículas bajo un potencial de esferas duras.
- Investigar la difusión del gas de Lorentz cuasi-periódico cuando la densidad de los obstáculos es muy baja.
- Comprobar que en el límite de  $B \rightarrow 0$  se recupera la difusión *tlogt* para los gases de Lorentz cuasi-periódicos.



# Bibliografía

---

- [1] G. Carmona, *Termodinámica clásica*. Facultad de Ciencias, UNAM, 2012. [1](#)
- [2] D. Szász, *Boltzmann's Ergodic Hypothesis, a Conjecture for Centuries?*, ch. Appendix, pp. 421–443. Springer, 2000. [2](#), [30](#), [32](#)
- [3] A. R. Cunha, “Understanding the ergodic hypothesis via analogies,” *Physicae*, vol. 10, pp. 9–12, mar 2013. [3](#)
- [4] N. Simányi, “Singularities and non-hyperbolic manifolds do not coincide,” *Nonlinearity*, vol. 26, pp. 1703–1717, 2013. [3](#), [37](#)
- [5] C. P. Dettmann, “The Lorentz gas: A paradigm for nonequilibrium stationary states.” July 1999. [3](#), [34](#)
- [6] H. A. Lorentz, “The motion of electrons in metallic bodies I,” *KNAW*, vol. 7, pp. 438–453, 1905. [3](#), [26](#)
- [7] R. B. Bird, *Fenómenos de transporte*. Limusa Wiley, 2006. [3](#)
- [8] J. Nickel, “Magnetoresistance Overview,” June 1995. <http://www.hpl.hp.com/techreports/95/HPL-95-60.pdf>. [5](#)
- [9] M. Flie\Ser, G. J. O. Schmidt, and H. Spohn, “Magnetotransport of the Sinai billiard,” *Physical Review E*, vol. 53, pp. 5690–5697, jun 1996. [5](#), [8](#), [38](#), [63](#)
- [10] A. Kuzmany and H. Spohn, “Magneto-Transport in the Two-Dimensional Lorentz Gas,” *Physical Review E*, vol. 57, 1998. [5](#), [8](#), [40](#)
- [11] M. Zeitz, K. Wolff, and H. Stark, “Active Brownian particles moving in a random Lorentz Gas,” *The European Physical Journal E*, vol. 40, no. 23, 2017. [6](#), [40](#)
- [12] S. Ramaswamy, “The Mechanics and Statistics of Active Matter,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 1, pp. 323–345, aug 2010. [6](#)
- [13] O. Chepizhko and F. Peruani, “Diffusion, Subdiffusion, and Trapping of Active Particles in Heterogeneous Media,” *Physical Review Letters*, vol. 111, 2013. [6](#), [40](#)

- [14] C. Reichhardt and C. J. O. Reichhardt, “Active matter transport and jamming on disordered landscapes,” *Physical Review E*, vol. 90, jul 2014. [6](#)
- [15] F. Kümmel, B. ten Hagen, R. Wittkowski, I. Buttinoni, R. Eichhorn, G. Volpe, H. Löwen, and C. Bechinger, “Circular motion of Asymmetric Self-Propelling Particles,” *Physical Review Letters*, vol. 110, may 2013. [6](#)
- [16] H. Löwen, “Chirality in microswimmer motion: From circle swimmers to active turbulence,” *The European Physical Journal Special Topics*, vol. 225, pp. 2319–2331, nov 2016. [6](#)
- [17] D. Levine and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals. I. Definition and structure,” *Physical Review B*, vol. 34, no. 2, pp. 596–616, 1986. [7](#), [15](#)
- [18] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, “Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry,” *Physical Review Letters*, vol. 53, no. 20, pp. 1951–1953, 1984. [7](#), [16](#)
- [19] E. Maciá, “The Role of aperiodic order in science and technology,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 69, no. 2, pp. 397–441, 2006. [7](#), [15](#), [17](#)
- [20] R. Tamura, A. Waseda, K. Kmura, and H. Ino, “Semiconductorlike transport in highly ordered Al-Cu-Ru quasicrystals,” *Physical Review B*, vol. 50, no. 13, pp. 9640–9642, 1994. [7](#), [17](#)
- [21] K. Kirihara and K. Kimura, “Covalency, semiconductor-like and thermoelectric properties of Al-based quasicrystals: icosahedral cluster solids,” *Science and Technology of Advanced Materials*, pp. 227–236, 2000. [7](#), [17](#)
- [22] D. Lutz and A. Goldman, “New Horizons in Quasicrystals: Research and Applications,” *Materials Technology*, vol. 11, no. 5, pp. 195–198, 1996. [7](#), [17](#), [18](#)
- [23] M. Kalman, “The Quasicrystal Laureate,” *MIT Technology Review*, 2011. [7](#), [17](#)
- [24] C. P. Dettmann, “New horizons in multidimensional diffusion: The Lorentz gas and the Riemann hypothesis,” *J. Stat. Phys.*, vol. 146, pp. 181–204, 2012. [7](#), [34](#)
- [25] D. P. Sanders, “Normal diffusion in crystal structures and higher-dimensional billiard models with gaps,” *Physical Review E*, vol. 78, dec 2008. [7](#), [34](#)
- [26] C. P. Dettmann, “Diffusion in the Lorentz gas,” *Commun. Theor. Phys.*, no. 62, pp. 521–540, 2014. [7](#), [27](#), [34](#), [36](#), [41](#)
- [27] N. J. Chernov, G. L. Eyink, J. L. Lebowitz, and Y. G. Sinai, “Steady-State Electrical Conduction in the Periodic Lorentz Gas,” *Commun. Math. Phys.*, vol. 154, pp. 569–601, 1993. [8](#), [37](#)
- [28] N. I. Chernov, “Sinai Billiards Under Small External Forces,” *Ann. Henri Poincaré*, vol. 2, pp. 197–236, 2001. [8](#), [38](#)

- 
- [29] F. Höfling, T. Munk, E. Frey, and T. Franosch, “Critical dynamics of ballistic and Brownian particles in a heterogeneous environment,” *The Journal of Chemical Physics*, vol. 128, 2008. [8](#), [39](#)
- [30] F. Höfling, T. Franosch, and E. Frey, “Localization Transition of the Three-Dimensional Lorentz Model and Continuum Percolation,” *Physical Review Letters*, vol. 9, 2006. [8](#), [39](#)
- [31] W. Breymann, Z. Kovács, and T. Tél, “Chaotic scattering in the presence of an external magnetic field,” *Physical Review E*, vol. 50, no. 3, 1994. [8](#), [41](#)
- [32] A. S. Kraemer and D. P. Sanders, “Embedding Quasicrystals in a Periodic Cell: Dynamics in Quasiperiodic Structures,” *Physical Review Letters*, vol. 111, 2013. [8](#), [19](#), [41](#)
- [33] A. S. Kraemer, M. Schmiedeberg, and D. P. Sanders, “Horizons and free-path distributions in quasiperiodic Lorentz gases,” *Physical Review E*, vol. 92, nov 2015. [8](#), [29](#), [30](#), [42](#)
- [34] “Period of a function.” Encyclopedia of Mathematics. URL: [http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Period\\_of\\_a\\_function&oldid=42321](http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Period_of_a_function&oldid=42321). [11](#)
- [35] A. S. Besicovitch, *Alomst Periodic Functions*. Dover, 1954. [13](#)
- [36] J. C. Hernández, “Funciones cuasi-periódicas de Bohr,” *Bol. Mat.*, vol. 16, no. 2, pp. 149–165, 2009. [13](#), [14](#)
- [37] Y. V. Komlenko and E. L. Tonkov, “Quasi-periodic function..” Encyclopedia of Mathematics. URL: [http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Quasi-periodic\\_function&oldid=14617](http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Quasi-periodic_function&oldid=14617). [14](#)
- [38] E. Schrödinger, “What is life? The Physical Aspect of the Living Cell.” Based on lectures delivered under the auspices of the Dublin Institute for Advanced Studies at Trinity College, Dublin, in February 1943, 1944. [15](#)
- [39] M. Senechal, *Quasicrystals and geometry*. Cambridge University Press, 1996. [16](#), [18](#)
- [40] D. Levine and P. J. Steinhardt, “Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures,” *Physical Review Letters*, vol. 53, no. 26, pp. 2477–2480, 1984. [16](#)
- [41] IUCR *Acta Cryst. A*, vol. 48, p. 922, 1992. <http://ww1.iucr.org/comm/capd/terms.html>. [17](#)
- [42] V. I. Sobolev, “Orthogonal projector.” Encyclopedia of Mathematics. URL: [http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Orthogonal\\_projector&oldid=14998](http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Orthogonal_projector&oldid=14998). [20](#)
-

- [43] “Penrose tiling.” Wikipedia. URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Penrose\\_tiling](https://en.wikipedia.org/wiki/Penrose_tiling). 21
- [44] P. Gaspard, *Chaos, scattering and statistical mechanics*. Cambridge University Press, 1998. 25
- [45] S. A. Cannas, “Termodinámica y Mecánica Estadística II.” URL: <http://www.famaf.unc.edu.ar/cannas/notas.html>, 2010. Notas de clase. Capítulo 4: Fundamentos de la Mecánica Estadística. 32
- [46] E. Caglioti and F. Golse, “On the Distribution of Free Path Lengths for the Periodic Lorentz Gas III,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 236, pp. 199–221, 2003. 35
- [47] N. Simányi, “The complete hyperbolicity of cylindric billiards,” *Ergod. Theor. Dyn. Sys.*, vol. 22, pp. 281–302, 2002. 37
- [48] N. I. Chernov and D. Dolgopyat, “The Galton Board: Limit Theorems and Recurrence,” *Journal of the American Mathematical Society*, vol. 22, no. 3, pp. 821–858, 2008. 38
- [49] D. I. Dolgopyat and N. I. Chernov, “Anomalous current in periodic Lorentz gases with infinite horizon,” *Russian Math. Surveys*, vol. 64, no. 4, pp. 651–699, 2009. 38
- [50] H. van Beijeren, “Transport properties of stochastic Lorentz models,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 54, pp. 195–232, 1982. 39
- [51] B. Wennberg, “Free Path Lengths in Quasi Crystals,” *Journal of Statistical Physics*, vol. 147, no. 5, pp. 981–990, 2012. 39, 41
- [52] G. Cristadoro, M. Lenci, and M. Seri, “Recurrence for quenched random Lorentz tubes,” *Chaos*, vol. 20, 2010. 40
- [53] M. Seri, M. Lenci, M. D. Esposti, and G. Cristadoro, “Recurrence and higher ergodic properties for quenched random Lorentz tubes in dimension bigger than two,” *J. Stat. Phys.*, vol. 144, pp. 124–138, 2011. 40
- [54] W. Schirmacher, B. Fuchs, F. Höfling, and T. Franosch, “Anomalous magneto-transport in disordered structures: classical edge-state percolation,” *Physical Review Letters*, vol. 115, 2015. 41
- [55] J. Marklof and A. Strömbergsson, “Free Path Lengths in Quasicrystals,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 330, no. 2, pp. 723–755, 2014. 41
- [56] J. Marklof and A. Strömbergsson, “Power-law distributions for the free path length in Lorentz gases,” *J. Stat. Phys.*, vol. 155, no. 6, pp. 1072–1086, 2014. 41