

44
243

UNIVERSIDAD AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS



LA DIFUSION EN UN SOLIDO AMORFO

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A

MALAQUIAS PEÑA MENDEZ



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 está 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.

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

INDICE

Capítulo 1.- SÓLIDOS AMORFOS.

1.0	Introducción	1
1.1	Definiciones	2
1.2	Estructura del sólido amorfo	5
1.3	Caracterización de la estructura del s.a.	8
1.4	Aplicaciones de los s.a.	10

Capítulo 2.- LA DIFUSIÓN.

2.0	Introducción	11
2.1	La difusión en un medio continuo	12
2.2	El problema del camino aleatorio	20
2.3	El movimiento Browniano y la ecuación de Langevin.	26

Capítulo 3.- LA DIFUSIÓN EN UN SÓLIDO AMORFO Y EL GRUPO DE RENORMALIZACIÓN DINÁMICO.

3.0	Introducción	34
3.1	Difusión en un material amorfo	35
	-El modelo	35
	-Características del ruido $F(k)$	41
	-Análisis dimensional	43
3.2	El grupo de renormalización dinámico	46
	-Diagramas	47
	-Corrección de los parámetros	51
3.3	Cálculo de los coeficientes intermedios	56
	-Cálculo de D_1	56
	-Cálculo de λ_1	58
	-Cálculo de γ_1	60
3.4	Relaciones de recurrencia	63
	-Comportamiento asintótico de Λ_f y Λ_v	67
	-Cálculo del coeficiente de difusión	69

CONCLUSIONES Y COMENTARIOS 75

APÉNDICES 77

BIBLIOGRAFÍA 88

CAPITULO 1

LOS SOLIDOS AMORFOS

Uno de los campos de mayor actividad en la Física del Estado Sólido en los últimos años ha sido el estudio de los sólidos no cristalinos, los sólidos cuyo arreglo de sus átomos pierde los vestigios del orden de largo alcance. Los avances que se han hecho en la Física y Química de estos materiales, que son conocidos como Sólidos Amorfos se han apreciado ampliamente por la comunidad de investigación (N.F. Mott, P.W. Anderson, y P.J. Flory ganadores del premio Nobel 1977). No puede ser de otra manera ya que estos materiales son los que más abundan en la Naturaleza.

La investigación científica en los sólidos amorfos resulta ser desafiante ya que no se puede contar con las herramientas matemáticas que acompañan a la periodicidad en los sólidos cristalinos, por ejemplo las zonas de Brillouin, Estados de Bloch, reglas de selección de la teoría de grupos, etc.; sin embargo, algunas viejas aproximaciones permanecen útiles para los sólidos amorfos (más notablemente el punto de vista de enlace químico, que se enfoca en el orden de corto alcance). Este desafío ha sido encausado por nuevas aproximaciones tales como la teoría de Localización y de Percolación.

Desde otro punto de vista, mucho del intenso interés en la investigación en sólidos amorfos se debe a la importancia tecnológica de estos materiales. Los ejemplos incluyen el uso de fibras ópticas ultratransparentes en telecomunicaciones, el uso de xerografía y células solares, y el uso cotidiano de vidrios orgánicos como materiales de estructura.

El estudio en este terreno es reciente y sigue en continuo desarrollo. La sociedad moderna está muy relacionada con este avance tecnológico, y es por ello que la aplicación de estos materiales está teniendo y tendrá un gran efecto sobre ella en el futuro.

DEFINICIONES

Los materiales no cristalinos o amorfos son aquellos que poseen algún grado de aleatoriedad. Esta aleatoriedad puede ocurrir de muchas maneras, de las cuales las más importantes son los desordenes topológicos, espinoriales, sustitucionales o vibracionales. Estos tipos de desorden son ilustrados a continuación (Fig. 1.1).

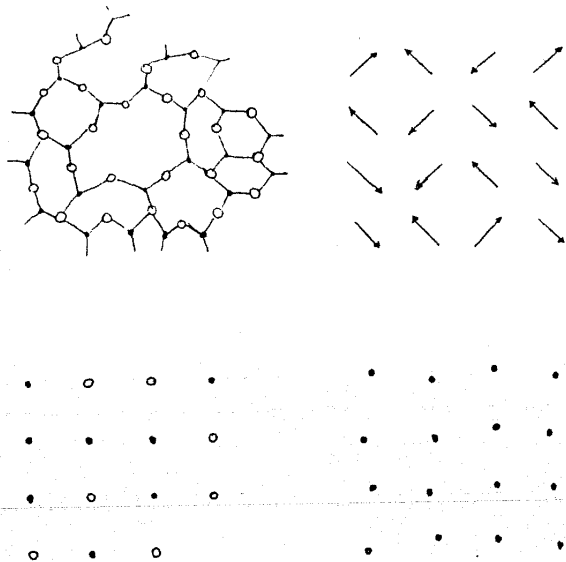


Fig. 1.1 Tipos de desorden:

- (a) Desorden topológico (no hay orden de largo alcance)
- (b) Desorden espinoidal (sobre una red regular)
- (c) Desorden sustitucional (sobre una red regular)
- (d) Desorden vibracional (alrededor de la posición de equilibrio de una red regular).

El patrón ordenado con el cual comparamos las imperfecciones es el cristal perfecto que se puede definir como sigue:

Un **cristal perfecto** es aquel material en el cual los átomos (o grupos de átomos o 'motifs'), están arreglados de un modo que se repite periódicamente en tres dimensiones en una extensión infinita.

Con esta definición un cristal imperfecto puede ser simplemente uno que sea finito en extensión o uno que posea defectos, e.g. vacancias o átomos intersticiales, o dislocaciones (no periodicidad), etc.

El desorden topológico o también llamado geométrico es esa forma de aleatoriedad en la que no hay periodicidad translacional (fig. 1.1a), en otras palabras, no hay orden de largo alcance.

Otra variedad de aleatoriedad es la del desorden de espín (o magnético) en el que la red cristalina se preserva, pero cada sitio atómico posee un espín o momento magnético que está orientado aleatoriamente. Esta situación ocurre en algunas aleaciones magnéticas diluidas tales como Cu-Mn o Au-Fe. Estos, y aquellos materiales que son topológicamente desordenados y poseen espines aleatoriamente orientados se llaman 'vidrios de espín' ('Spin glasses'), y no se deben confundir con los verdaderos vidrios que se definen abajo.

Una clase más de aleatoriedad es el desorden substitutional en el que la red cristalina se preserva, en este caso el material es de hecho una aleación (por decir Cu-Au) con un tipo de átomo sustituyendo a otro aleatoriamente en la red. Estos sistemas son de gran importancia en metalurgia y otras ramas de la ciencia de materiales, y en el caso de aleaciones binarias son descritas por la teoría de campo medio de Bragg-Williams (ver ref. 3).

La categoría final de aleatoriedad considerada anteriormente es el desorden vibracional de una red cristalina. Por supuesto, el concepto de un cristal perfecto es solamente válido a la temperatura del cero absoluto (si el movimiento del punto cero es ignorado), y a cualquier temperatura finita el movimiento aleatorio de átomos alrededor de su posición de equilibrio destruye la periodicidad perfecta. Es importante notar, sin

embargo, que el desorden vibracional no es otra forma de desorden topológico, puesto que aunque los átomos están vibrando, lo hacen alrededor de sus posiciones cristalinas de equilibrio que por supuesto no están desordenadas topológicamente.

Sin embargo, los desórdenes en los que nos ocuparemos no serán las pequeñas perturbaciones a la cristalinidad del material, sino al mencionado desorden topológico.

Hay mucha confusión en la literatura concerniente al término 'amorfo', 'no-cristalino' y 'vidrio' y todavía no hay definiciones universalmente aceptadas. Las definiciones que aquí emplearemos son : Un material amorfo no posee el orden de largo alcance ni la periodicidad característica de un cristal.

Un vidrio es un sólido amorfo que exhibe una transición vítrea.

Con la primera definición los términos 'amorfo' y 'no-cristalino' son sinónimos. La definición del término amorfo dado aquí no excluye a los líquidos por lo que para definir un sólido amorfo debemos decir que un sólido es un material cuya viscosidad de corte exceda $10^{14.6}$ poise (o $10^{13.6}$ Nsm⁻²).

Esta división algo arbitraria corresponde a un tiempo de relajación de un día. Este se puede ver como sigue. La expresión para la viscosidad de corte se puede escribir como

$$\eta = G_x / (dv_x/dz)$$

La aplicación de una fuerza de corte G_x en la dirección x causa un gradiente de velocidad dv_x/dz , donde dz es el grosor de un elemento perpendicular a la dirección del esfuerzo aplicado. Una fuerza de 100N aplicado durante un día a 1cm³ de un material que tiene una viscosidad de $10^{13.6}$ Nsm⁻² conduce a una deformación de 0.02mm, un valor que apenas es visible. Entonces diremos que un material es un sólido si la aplicación de una pequeña fuerza durante un día produce, para fines prácticos, una deformación despreciable. Para darnos una idea y poder comparar, la viscosidad de la mayoría de líquidos comunes a temperatura ambiente son del orden de 10^{-2} Poise.

ESTRUCTURA DEL SOLIDO AMORFO

Para entender las propiedades físicas y químicas de una sustancia sólida es requisito esencial conocer el arreglo estructural de sus átomos. Como ya hemos mencionado, el aspecto esencial con el que la estructura difiere respecto al sólido cristalino es la ausencia de orden de largo alcance. No hay periodicidad translacional, ver fig. 1.2.

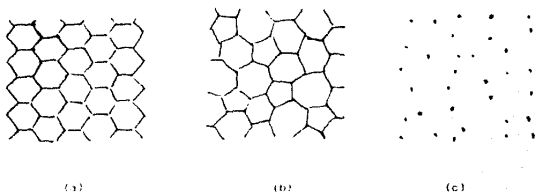


Fig 1.2 Un esquema de arreglos atómicos en (a) un sólido cristalino, (b) un sólido amorfo y (c) un gas.

Las posiciones atómicas en el sólido amorfo tampoco están, sin embargo, distribuidas aleatoriamente en el espacio, la aleatoriedad está asociada mas proplamente a la figura 1.2c., al menos en el limite de densidad baja en el que los atomos que componen el gas pueden considerarse como particulas independientes. Para tal gas diluido (el gas de la teoria cinética) las posiciones de las particulas están totalmente descorrelacionadas. Cada atomo se puede localizar donde sea, independientemente de las posiciones de los demas atomos. Sin embargo en la figura 1.2b. se ve un alto grado de correlación 'local'. Cada atomo tiene (en el ejemplo usado aqui para la ilustracion) tres primeros vecinos a 'casi' la misma distancia de él. Los primeros vecinos están conectados por líneas en la figura y los angulos de enlace (que se forma donde estas líneas se encuentran en una posición atómica) son también 'aproximadamente' iguales.

En el caso cristalino de la figura 1.2a la separación de los primeros vecinos y sus ngulos son 'exactamente' iguales a

diferencia del sólido amorfo. El grado de correlación local es bastante alto en los sólidos amorfos, esto es también común en los cristales, pues poseen un alto grado de orden de cierto alcance. Un experimento pensado nos servirá para ilustrar la presencia de orden local. Supongamos que un átomo es sacado de cada panel de las figuras 1.2 por un hombre de mala memoria. Si más tarde desea insertar cada átomo en su posición original, no debería tener dificultad para hacerlo en las figuras 1.2a. y 1.2b. No así, sin embargo, para la figura 1.2c, puesto que es completamente aleatoria, ya que las posiciones atómicas que no fueron modificadas no dan información acerca de la falta de una.

El segundo tópico es el tema de solidez. Para esto consideremos cómo se modifica la configuración representada en la fig. 1.2 al transcurrir el tiempo. En 1.2(c) una estructura particular dada cambia instantáneamente al hacer correr el reloj, el movimiento de las partículas que componen al gas son efectos aleatorios que, en la escala de dimensiones atómicas, son totalmente diferentes en cada instante del arreglo específico de la fig. 1.2c (En la escala macroscópica, por supuesto el efecto es el de pequeñas fluctuaciones estadísticas por ejemplo en la densidad). Este movimiento atómico para un gas diluido, consiste de trayectorias de líneas rectas que son desviadas ocasionalmente por algunas deflexiones correspondientes a las colisiones de los átomos unos con otros y con las paredes del recipiente.

El efecto del tiempo en las figuras 1.2(a) y 1.2(b) no es tan drástico. Aunque haya movimiento (aun cercano a 0 K, el movimiento del punto cero permanece), este no es traslacional, es decir, no consiste en "cruzar" la estructura de un cristal o de un vidrio. Si vieramos a un átomo dado como una partícula clásica con una trayectoria definida, su movimiento lo podríamos esquematizar como en la fig. 1.3(a), en este caso el átomo permanece cerca de una posición de equilibrio bien definida, y realiza movimientos oscilatorios o vibratoriales alrededor de él. Este efecto de localización está en contraste con el movimiento traslacional a escala atómica realizado por el fluido de la figura 1.2(c).

Macroscópicamente esto no es otra cosa que la diferencia entre solidez y fluidez. En un sólido los átomos oscilan alrededor de

sus posiciones de equilibrio, lo cual constituye una estructura permanente. Tal endurecimiento no existe en un fluido, en la que el movimiento atómico se caracteriza por movimientos traslacionales extensivos y parcialmente oscilatorios (fig. 1.3(b)).

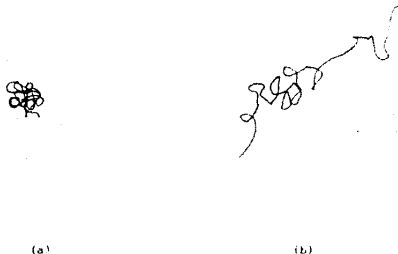


Fig 1.3 Bosquejo del estado de movimiento de una partícula (a) en un sólido y (b) en un fluido.

Un sólido amorfo es metaestable con respecto a una fase cristalina, esta fase forma el estado de equilibrio termodinámico de más baja energía, sin embargo la experiencia enseña que el estado base cristalino es a veces cinéticamente inaccesible. Una vez formado el vidrio puede persistir prácticamente sin límite. Un ejemplo es el diamante, el arquetipo del cristal covalente, el cual es metaestable. La configuración de energía más baja de una colección de átomos de carbón no es el diamante sino el grafito, que es la fase termodinámica estable a presión y temperatura normales.

CARACTERIZACION DE LAS ESTRUCTURAS

Los datos sobre la estructura de las sustancias amorfas se obtienen principalmente a través de la difracción ya sea de rayos X, de electrones o de neutrones. Para caracterizar estas estructuras es conveniente usar el concepto de densidad $\rho(r)$ de átomos a la distancia r a partir de un cierto átomo de referencia. El número de átomos en cada capa esférica de espesor dr desde la distancia r hasta $r + dr$ de un átomo de referencia, es igual a $4\pi r^2 \rho(r) dr$. Esta expresión recibe el nombre de **función de distribución radial de los átomos**. La función $4\pi r^2 \rho(r)$ tiene máximos en las distancias correspondientes a las distancias interatómicas. El área que hay debajo de cada punta de la curva de la función de distribución radial determina el **número de coordinación**, el cual es el número de átomos que hay a esa distancia. La relación de la función de densidad $\rho(r)$ para la estructura atómica real se muestra esquemáticamente en la fig. 1.4 en una representación bidimensional de una estructura amorfa

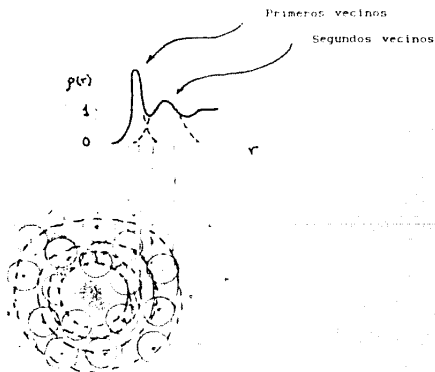


fig 1.4 Ilustración esquemática del origen estructural de ciertas formas en la función de densidad $\rho(r)$ para un sólido amorfo.

La función de distribución radial para el cristal perfecto dará, por supuesto, picos agudos en los lugares en que están colocados los átomos; sin embargo, en los casos desordenados el problema se complica más y no es tan fácil interpretar los picos puesto que en general la respuesta se va haciendo más ancha de tal manera que a partir del tercero no se puede precisar exactamente el área comprendida, es aquí donde se aprecia el llamado orden de corto alcance. Para estudiar la estructura del material amorfo no se cuenta solamente con los experimentos de difracción mencionados, sino que existen técnicas espectroscópicas que proporcionan una información muy valiosa, no solo del orden local, sino también del de las configuraciones de enlaces.

APLICACIONES DE LOS SÓLIDOS AMORFOS

La tabla 1 presenta una lista representativa de las aplicaciones de los sólidos amorfos.

Tabla 1. Algunos ejemplos de aplicaciones de sólidos amorfos.

<i>Tipo de sólido amorfo</i>	<i>Material Representativo</i>	<i>Aplicación</i>	<i>Propiedad especial Utilizada</i>
Vidrio Oxido	$(\text{SiO}_2)_8 (\text{Na}_2\text{O})_2$	Ventanas de vidrio, etc.	Transparencia, solidez.
Vidrio Oxido	$(\text{SiO}_2)_9 (\text{GeO}_2)_1$	Fibras Ópticas	Ultra-transparencia, pureza
Polímeros orgánicos	Poliestireno	Materiales estructurales 'plásticos'.	
Vidrio calcogenido	$\text{Se, As}_2\text{Se}_3$	Xerografía	Fotoconductividad películas.
Semiconductor amorfo	$\text{Te}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$	Elementos de memoria de computadora	Transformación Cristalino-Amorfo Por campo E inducido
Semiconductor amorfo	$\text{Si}_{0.9}\text{H}_{0.1}$	Celdas Solares	Propiedades Ópticas fotovoltaicas.
Vidrio metálico	$\text{Fe}_{0.8}\text{B}_{0.2}$	Transformadores Ferromag. de núcleos	Baja pérdida

LA DIFUSION

En física, la palabra difusión se refiere a un proceso por el cual la materia es transportada de una parte del sistema a otra debido al movimiento aleatorio de las partículas que lo componen. Si tenemos un cierto número de partículas inicialmente distribuidas en una configuración dada, estas llegarán a redistribuirse con el tiempo como resultado de los movimientos aleatorios. Esta nueva distribución de probabilidad se puede obtener teóricamente ya sea por una ecuación de difusión (propuesta por Fick en 1855), en la que se considera que tanto el medio como el material que se difunde son continuos; por la teoría del camino aleatorio donde el medio y el difundiente son discretos, o por métodos en donde se utilizan ambos puntos de vista, el continuo y el discreto.

Es evidente que en el segundo modelo, en donde se considera que la materia está compuesta por muchas partículas determinadas por las leyes de la mecánica, las ideas estadísticas juegan un papel muy importante. La situación física de partida es que si tenemos una sustancia diluida difundiéndose, cada una de las partículas que la componen se comportan independientes unas de otras, y cada una sufre colisiones con las moléculas del solvente, el resultado de estas colisiones es que la partícula se mueve hacia regiones de alta o baja concentración sin tener preferencia. Sin embargo, aunque el movimiento molecular aleatorio no da una dirección preferente en el movimiento, se observa de hecho que las moléculas se desplazan desde la región de mas alta densidad a la de mas baja, se mueven irreversiblemente hacia el equilibrio termodinámico, casi sin importar la condición con la que empieza el sistema. La reconciliación de estas dos situaciones se ha encontrado en el Teorema H de Boltzmann y en las derivaciones de la Ecuación Maestra por Pauli, Van Hove, Prigogine y muchos otros.

La difusión es un arquetipo de los procesos irreversibles, sin embargo, los modelos que describen este proceso, y en

particular el que utilizaremos, se restringen a describirlo cuando el sistema está cerca del equilibrio termodinámico, ya que cuando se está muy apartado de él, las cosas son extremadamente complicadas.

LA DIFUSION EN UN MEDIO CONTINUO

Empecemos analizando la difusión en un medio continuo, que históricamente fue el primer método que se propuso para analizar este fenómeno. Aquí la teoría de la difusión se apoya en dos resultados físicos fenomenológicos:

(i) *Ley de Fick*. "El transporte neto de material a través de una unidad de superficie j es proporcional al gradiente de densidad del material en una dirección perpendicular a la unidad de área,

$$j = -D\nabla\rho \quad (2.1.1)$$

(ii) *La ecuación de continuidad*. "El material se conserva durante el proceso, las unidades difusoras no son creadas ni destruidas,

$$(\partial\rho/\partial t) + \nabla \cdot j = 0 \quad (2.1.2)$$

En donde $\rho \equiv \rho(\mathbf{r}, t)$ es la densidad de la sustancia de interés en la posición \mathbf{r} al tiempo t , D es el coeficiente de difusión, que puede también ser una función de \mathbf{r} y ρ , y $j \equiv j(\mathbf{r}, t)$ es la rapidez de flujo de la sustancia, que se define en términos de la velocidad local de sus elementos de masa, $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$, a través de

$$j = \rho\mathbf{v} \quad (2.1.3)$$

A partir de estas tres ecuaciones uno puede derivar dos ecuaciones diferenciales básicas, una para la densidad de partículas y la otra para la velocidad local. La teoría tradicional obtiene la ecuación de difusión al sustituir (2.1.1) en (2.1.2)

$$\partial\rho/\partial t = \nabla \cdot (D\nabla\rho) \quad (2.1.4)$$

Cuando el coeficiente de difusión es constante, independiente del tiempo y de la posición, esta ecuación se convierte en

$$\partial \rho / \partial t = D \nabla^2 \rho \quad (2.1.5)$$

Una manera alternativa de describir la difusión es encontrar la ecuación diferencial para el campo de velocidades \mathbf{v} . Una vez que \mathbf{v} se conoce, la densidad de la partícula se obtiene al combinar (2.1.1) y (2.1.3). Restringiéndonos al caso de un coeficiente de difusión constante. Entonces

$$\mathbf{v} = -D \nabla \ln \rho \quad (2.1.7)$$

Una ecuación diferencial para \mathbf{v} se obtiene de (2.1.2) y (2.1.3)

$$\partial_t \mathbf{v} = -D \nabla \cdot (\nabla \ln \rho) = D \nabla \cdot \{ \rho^{-1} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \} \quad (2.1.8)$$

$$= D \nabla \cdot \{ \nabla \cdot \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \ln \rho \} \quad (2.1.9)$$

Incorporando la ecuación (2.1.7) en esta última obtenemos la ecuación diferencial para el campo de velocidades

$$\partial_t \mathbf{v} = \nabla \cdot \{ D \nabla \cdot \mathbf{v} - \mathbf{v}^2 \} \quad (2.1.10)$$

Con esto se observa que, aun la teoría de difusión elemental es no lineal si no está en términos de las variables adecuadas. Este punto de vista alternativo ha sido discutido por algunos autores durante muchos años. Sin embargo esto se tomo como investigación matemática mas que como un método alternativo para describir un proceso físico.

La ecuación (2.1.5), llamada la *segunda ley de Fick*, es una ecuación diferencial parcial parabólica cuya característica principal es que no es simétrica en el tiempo, es decir, su solución cambia al cambiar t por $-t$, es por ello que esta es una ecuación apropiada para describir a un proceso irreversible. Debemos observar, además, que la solución de esta ecuación depende

tanto de la geometría del problema como de la distribución inicial de la sustancia que se difunde. Esta ecuación también es referida como la ecuación del calor (Ley de Fourier, 1822), sin embargo, en este contexto nos referiremos a ella como la ecuación de difusión clásica.

Un problema comúnmente discutido en la teoría de difusión es el problema de valor inicial; i.e., determinar la distribución de concentración $\rho(x,t)$ al tiempo t cuando la distribución es conocida inicialmente $\rho(x,0)$. Presentamos el caso en una dimensión con dominio infinito. El problema completo queda expresado como

$$[\partial_t - D\partial_x^2] \rho(x,t) = 0 \quad (2.1.11)$$

donde $-\infty < x < \infty$, para $t > 0$ y con $\rho(x,0) = f(x)$

El método que utilizaremos para resolverlo es a través de las transformadas de Fourier. Definimos entonces la transformada de Fourier de la distribución de concentración como

$$\rho(k,t) = \int \rho(x,t) e^{-ikx} dx \quad (2.1.12)$$

y a su inversa como

$$\rho(x,t) = (2\pi)^{-1} \int \rho(k,t) e^{ikx} dk \quad (2.1.13)$$

El símbolo \int denota integración sobre todo el dominio, para una dimensión.

Multiplicando por $\exp[-ikx]$ la ecuación (2.1.11) e integrando en todo el dominio de x tenemos

$$\partial_t \rho + Dk^2 \rho = 0 \quad (2.1.14)$$

cuya solución es

$$\rho(k,t) = \rho(k,0) \exp[-Dk^2 t] \quad (2.1.15)$$

con $\rho(k,0)$ la transformada de Fourier de $\rho(x,0)$. Aplicando la transformada de Fourier inversa a la ecuación (2.1.15) tenemos

$$\rho(x,t) = (2\pi)^{-1} \iint f(s) \exp[-ik(x-s) - Dk^2 t] ds dk \quad (2.1.16)$$

resolviendo se obtiene

$$p(x,t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \int f(s) \exp[-(x-s)^2/4Dt] ds \quad (2.1.17)$$

observamos que si $f(s) = \delta(\xi-s)$

$$G(x-\xi,t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp[-(x-\xi)^2/4Dt] \quad (2.1.18)$$

Esta última ecuación (la función de Green) es conocida como la *solución fundamental* de la ecuación de difusión que corresponde a una fuente puntual que al instante $t = 0$ se encuentra en el punto $x = \xi$. La figura 2.1 muestra este comportamiento para diferentes tiempos. La ecuación (2.1.17) es simplemente la convolución de la función de Green con la condición inicial y se puede pensar como una superposición de soluciones debidas a fuentes puntuales distribuidas sobre el eje x , con densidad $f(x)$.

```
Plot[Evaluate[Table[Exp[-x^2 /t] /Sqrt[t], {t,1,6}]], {x,-5,5}]
```

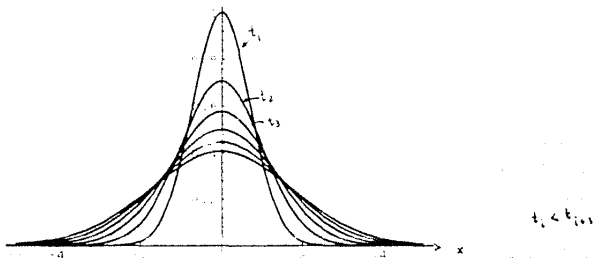


Fig.2.1 Perfil de la concentración como una función del tiempo para una sustancia difundiendo la cual está originalmente localizada en $x=\xi$.

Con respecto a las restricciones para $f(x)$, el teorema de Fourier garantiza su validez si $\int |f(x)| dx < \infty$; sin embargo esta restricción puede ser relajada, de hecho la ecuación (2.1.17) es válida si $|f(x)| \leq M \cdot \exp[-Nx^2]$. Las pruebas rigurosas de la

existencia y unicidad de (2.1.17) se encuentran en la mayoría de los libros de ecuaciones diferenciales parciales.

Como un ejemplo que nos servirá mas adelante, consideremos el proceso de difusión unidimensional en que el flujo de partículas no solo depende de la diferencia de concentración, sino que además las partículas son arrastradas hacia una dirección particular a velocidad constante, entonces la ecuación (2.1.1) es modificada por

$$J = -D\delta_x \rho + \rho v_0 \quad (2.1.19)$$

donde v_0 es constante. Esta ecuación puede representar por ejemplo la difusión de una partícula cargada sometida a un campo eléctrico uniforme ocasionando una velocidad de arrastre v_0 .

Resolviendo como en el caso anterior obtenemos

$$\rho(x,t) = (4\pi Dt)^{-1/2} \int f(s) \exp -[(x - v_0 t) - s]^2 / 4Dt \, ds \quad (2.1.20)$$

La figura 2.2 muestra varios perfiles de la difusión para el caso $f(s) = \delta(s)$.

Plot[Evaluate[Table[Exp[-(x-t)^2 / t]/Sqrt[t], {t,1,6}]], {x,-2, 8}]

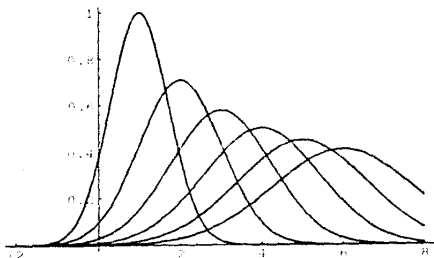


Fig. 2.2 Perfil de una concentración difundiéndose y moviéndose con una velocidad de arrastre v_0 .

Busquemos ahora una solución fundamental, como la ecuación (2.1.17), para un espacio de dimensión arbitraria d . Supongamos que D es una constante, entonces la ecuación de difusión viene dada por

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) = D \nabla^2 \rho(\mathbf{r}, t) \quad (2.1.21)$$

ahora \mathbf{r} y ∇ son $\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ y $\nabla^2 = (\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2 + \dots + \partial_{x_d}^2)$ con la condición inicial $\rho(\mathbf{r}, 0) = f(\mathbf{r})$, y \mathbf{r} en todo el espacio $\Omega_{\mathbf{r}}$ ($\Omega_{\mathbf{r}} = \mathbb{R}^d$).

Generalizamos las transformaciones (2.1.12) y (2.1.13) como

$$\rho(\mathbf{k}, t) = \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

y

$$\rho(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-d} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \rho(\mathbf{k}, t) d\mathbf{k}$$

con $\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots, k_d)$.

La ecuación (2.1.21) en el espacio de momentos es entonces

$$\partial_t \rho(\mathbf{k}, t) + Dk^2 \rho(\mathbf{k}, t) = 0$$

cuya solución es

$$\rho(\mathbf{k}, t) = \rho(\mathbf{k}, 0) e^{-Dk^2 t}$$

y la transformada de Fourier inversa, suponiendo que el sistema es isotrópico, viene dada por

$$\rho(\mathbf{r}, t) = (4\pi Dt)^{-d/2} \int f(\mathbf{s}) \exp[-(\mathbf{r}-\mathbf{s})^2/4Dt] d\mathbf{s} \quad (2.1.22)$$

Para el caso particular en que $f(\mathbf{s}) = \delta(\mathbf{s})$, obtenemos:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = (4\pi Dt)^{-d/2} \exp[-r^2/4Dt] \quad (2.1.23)$$

que es la solución fundamental en d dimensiones.

Otro punto importante es determinar el desplazamiento cuadrático promedio del radio vector de un elemento de volumen de la sustancia que se difunde, a partir de la solución (2.1.23) tenemos

$$\langle r^2(t) \rangle = \int r^2 \rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle &= (4\pi Dt)^{-d/2} \int_0^\infty r^2 \exp[-r^2/4Dt] dr \\ &= (4\pi Dt) \int_0^\infty r^2 \exp[-r^2/4Dt] C_d r^{d-1} dr \end{aligned}$$

Donde $C_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$ es la superficie de una hipersfera en d dimensiones (ver apéndice 3). El desplazamiento cuadrático promedio es entonces

$$\langle r^2(t) \rangle = 2dDt \quad (2.1.24)$$

en donde se observa la dependencia lineal con el tiempo t y la dimensión d

En esta aproximación fenomenológica de la difusión, el coeficiente D de difusión puede ser determinado a partir de experimentos dados en donde la naturaleza atómica del proceso no se considera. Este coeficiente generalmente no es una constante, e.g. en la interdifusión de metales o la difusión de vapores orgánicos en sustancias poliméricas, D depende de la concentración de la sustancia difusora ρ en estos casos y también cuando el medio es inhomogéneo, D varía de punto a punto por lo que la ecuación de difusión se debe expresar sólo como (2.1.4), es decir

$$\partial_t \rho - \nabla \cdot (D \nabla \rho) = 0 \quad (2.1.26)$$

donde D puede depender de x, y, z y ρ .

Si D depende únicamente del tiempo t durante el cual ha tomado lugar la difusión, i.e.

$$D = f(t) \quad (2.1.27)$$

entonces introduciendo una nueva escala de tiempo T tal que

$$dT = f(t) dt \quad (2.1.28)$$

la ecuación de difusión llega a ser

$$\partial_T \rho - \nabla^2 \rho = 0 \quad (2.1.29)$$

que es parecida a (2.1.5) con $D = 1$.

Cuando el medio es anisotrópico, es decir, cuando las propiedades de difusión son diferentes en distintas direcciones, por ejemplo en los cristales, las fibras textiles, cristales líquidos, etc., la ecuación (2.1.1) dada para el flujo j , debe ser reemplazada por

$$j = - D \cdot \nabla \rho \quad (2.1.30)$$

Si los elementos del tensor D son constantes la ecuación (2.1.5) nos queda

$$\begin{aligned} \partial_t \rho = & D_{11} \partial_{xx}^2 \rho + D_{22} \partial_{yy}^2 \rho + D_{33} \partial_{zz}^2 \rho + \\ & + (D_{23} + D_{32}) \partial_{yz}^2 \rho + (D_{31} + D_{13}) \partial_{zx}^2 \rho + (D_{12} + D_{21}) \partial_{xy}^2 \rho \end{aligned} \quad (2.1.31)$$

Se puede encontrar una transformación hacia las coordenadas rectangulares ξ, η y ζ parecida a la que se hace en geometría analítica con el elipsoide de revolución y obtener

$$\partial_t \rho = D_1 \partial_{\xi\xi}^2 \rho + D_2 \partial_{\eta\eta}^2 \rho + D_3 \partial_{\zeta\zeta}^2 \rho \quad (2.1.32)$$

a su vez, haciendo

$$\xi' = \xi (D/D_1)^{1/2}, \quad \eta' = \eta (D/D_2)^{1/2}, \quad \zeta' = \zeta (D/D_3)^{1/2}$$

con D arbitraria, obtenemos

$$\partial_t \rho = D (\partial_{\xi'\xi'}^2 \rho + \partial_{\eta'\eta'}^2 \rho + \partial_{\zeta'\zeta'}^2 \rho) \quad (2.1.33)$$

Podemos ver entonces que ciertos problemas anisotrópicos se pueden reducir a la misma ecuación para medios isotrópicos. El que se pueda o no, en un caso dado, depende de las condiciones de frontera.

Por último, debemos mencionar que la difusión tratada aquí (a partir de la ley de Fick) a pesar de resolver una gran cantidad de problemas, es una clase particular de los procesos de difusión, es decir, existen procesos difusivos que no obedecen la ecuación

(2.1.1) y son llamados procesos de difusión no fickianos, por ejemplo cuando los gradientes de concentración de la sustancia difusora son muy grandes, o cuando los componentes de esta sustancia están correlacionados, en este caso se ha mostrado [6] que la difusión en el régimen estacionario se aparta de la ley de Fick y esta desviación se presenta a través de una dependencia en la posición para el coeficiente de difusión, es decir, $D = D(x)$.

El problema de la difusión considerado hasta ahora se ha reducido básicamente a resolver la ecuación (2.1.21) bajo condiciones iniciales y de frontera dadas, sin embargo, al tomar en cuenta los detalles tanto del medio (por ejemplo en problemas de difusión en medios desordenados, porosos, etc.) como de la sustancia (por ejemplo los fenómenos de reacción-difusión), es necesario tomar en cuenta la naturaleza corpuscular de este fenómeno por lo que la configuración dependiente del tiempo del sistema estará relacionada con las probabilidades de los procesos atómicos elementales. Como se verá más adelante, este punto de vista más general nos permite recuperar los mismos resultados que para el caso continuo en el límite termodinámico.

EL PROBLEMA DEL CAMINO ALEATORIO UNIDIMENSIONAL

El propósito de esta sección y la siguiente es analizar el fenómeno de la difusión desde el punto de vista discreto. Para introducirnos a los conceptos básicos probabilísticos empezamos con el ejemplo más simple, pero importante, de los procesos aleatorios o estocásticos, el llamado 'Problema del Camino Aleatorio' [7].

Consideremos una partícula que se mueve a lo largo de una cadena unidimensional donde puede saltar de un punto a otro hacia cualquiera de sus dos puntos vecinos. Nos preguntamos entonces por la probabilidad de que después de N pasos la partícula alcance una cierta distancia x , desde el punto de partida.

Definimos a $W(m, N)$ como la probabilidad de que la partícula llegue al punto m después de N desplazamientos sobre una misma línea, de esto se sigue inmediatamente que el número de pasos dados a la izquierda y a la derecha son $(N+m)/2$ y $(N-m)/2$ respectivamente. Si la probabilidad de dar un paso a la derecha es

'p' y a la izquierda es 'q', entonces

$$W(m, N) = p^{(N+m)/2} q^{(N-m)/2} N! / [(N+m)/2]! [(N-m)/2]! \quad (2.2.1)$$

en el caso particular $p = q = 1/2$ la ecuación (2.2.1) se convierte en

$$W(m, N) = 2^{-N} N! / [(N+m)/2]! [(N-m)/2]! \quad (2.2.2)$$

De la ecuación (2.2.1), el valor esperado del número total de pasos dados a la derecha y la desviación cuadrática promedio vienen dados como

$$\langle (N+m)/2 \rangle = N/2 \quad (2.2.3)$$

$$\langle [(N+m)/2 - N/2]^2 \rangle = N/4$$

respectivamente, tomando en cuenta que el promedio de la suma es igual a la suma de los promedios en las últimas dos expresiones se tiene,

$$\langle m \rangle = 0 ; \quad \langle m^2 \rangle = N \quad (2.2.4)$$

la desviación cuadrática promedio es $(N)^{1/2}$ (ver figura 2.3).

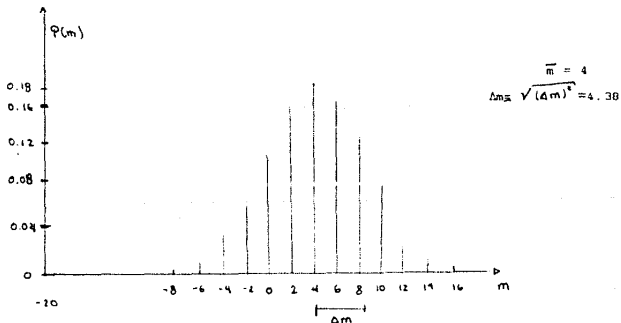


Fig. 2.3. Distribución de probabilidad para $p=0.6$ y $q=0.4$, cuando $N=20$ pasos. La gráfica muestra la probabilidad $W(n_i)$ de dar n_i pasos a la derecha, o equivalentemente, la probabilidad $P(m)$ de un desplazamiento neto de $\frac{m}{2}$ unidades a la derecha. También se indican el valor promedio \bar{m} y $(\Delta \bar{m})^2$.

El caso de más interés es para N grande y $m \ll N$, que es justamente el límite continuo (o termodinámico), por lo que al usar la fórmula de Stirling [6]

$$\ln n! = (n + 1/2)\ln n - n + (1/2)\ln 2\pi + O(n^{-1}); \quad n \rightarrow \infty$$

en la ecuación (2.2.2) obtenemos

$$W(m, N) = (2/\pi N)^{1/2} \exp[-m^2/2N] \quad (2.2.5)$$

como N es grande, es conveniente introducir la distancia x desde el punto de origen como la variable en lugar de m .

$$x = ml$$

donde l es la longitud de un paso.

Además si consideramos intervalos Δx grandes comparados con la longitud de cada paso nos podemos preguntar por la probabilidad $W(x)\Delta x$ de que la partícula se encuentre entre x y $x+\Delta x$ después de N desplazamientos, y puesto que m toma valores pares o impares dependiendo de si N es par o impar

$$W(x, N)\Delta x = W(m, N)(\Delta x/2l) \quad (2.2.6)$$

y

$$W(x, N) = (2\pi Nl^2)^{-1/2} \exp[-x^2/2Nl^2] \quad (2.2.7)$$

Definiendo $D = nl^2/2$ donde n es el número de desplazamientos por unidad de tiempo, obtenemos finalmente

$$W(x, t)\Delta x = (4\pi Dt)^{-1/2} \exp[-x^2/4Dt] \Delta x. \quad (2.2.8)$$

Se observa que este resultado es muy parecido al obtenido en la ecuación (2.1.18) para el caso continuo.

Existe otro modo de resolver el problema y que para nosotros será muy útil ya que nos conduce a la ecuación de difusión en el límite continuo y nos da una expresión para la ecuación de difusión en medios anisotrópicos.

Consideremos un conjunto de puntos sobre una recta, escojamos un origen arbitrario, y etiquetemos estos puntos por números

enteros $i=0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Ahora atribuyamos un número N_i de partículas al sitio i . Supongamos que cada una de estas partículas pueden saltar a sitios adyacentes con una frecuencia Γ que no depende del sitio i . Los saltos hacia la derecha son en promedio muy parecidos a los de la izquierda, así que $\Gamma N_i / 2$ partículas saltan del sitio i al $i+1$ por unidad de tiempo. La transición inversa $i+1$ a i ocurre con la rapidez $\Gamma N_{i+1} / 2$. El flujo neto de partículas que saltan del sitio i al $i+1$ por unidad de tiempo es

$$J_{i+1/2} = \Gamma(N_i - N_{i+1})/2 \quad (2.2.9)$$

análogamente, el flujo de $i-1$ a i es

$$J_{i-1/2} = \Gamma(N_{i-1} - N_i)/2 \quad (2.2.10)$$

Estos flujos desaparecen cuando $N_i = N_{i+1}$ para toda i ; en otras palabras, cuando la masa está uniformemente distribuida no hay flujo de materia. El cambio en el número de partículas hacia y desde el sitio i es

$$\dot{N}_i = (\Gamma/2)(N_{i+1} + N_{i-1} - 2N_i) \quad (2.2.11)$$

Esta ecuación expresa un balance de población de partículas. El sitio i recibe $(\Gamma/2)N_{i+1}$ partículas provenientes del sitio $i+1$, y $(\Gamma/2)N_{i-1}$ del sitio $i-1$, a su vez el sitio i cede $(\Gamma/2)N_i$ partículas (siendo esta la razón del signo negativo en (2.2.11)), a la izquierda y lo mismo a la derecha. Sustituyendo (2.2.9) y (2.2.10) la última expresión nos queda

$$\dot{N}_i = -(J_{i+1/2} - J_{i-1/2})$$

Para pasar a la parte continua asumamos, para facilitar el cálculo, que los sitios son equidistantes, siendo a la longitud del salto. El i -ésimo sitio tiene coordenada $x_i = ia$. Introducimos $\underline{N}(x, t)$ una función continua y bien comportada que interpole a $N_i(t)$. Necesariamente $\underline{N}(x_i, t) = N_i(t)$ en $x = x_i$, aunque puede tomar cualquier otro valor en puntos diferentes a los sitios.

Desarrollando en serie de Taylor las funciones \underline{N} y N_1 obtenemos

$$\underline{N}(x_1 \pm 1) = \underline{N}(x_1) \pm a \partial_x \underline{N}|_{x_1} + (1/2)a^2 \partial_x^2 \underline{N}|_{x_1} + O(a^3) \quad (2.2.12)$$

$$N_{1\pm 1} = N_1 \pm a \partial_x N|_{x_1} + (1/2)a^2 \partial_x^2 N|_{x_1} + O(a^3) \quad (2.2.13)$$

Introduciendo esta última expresión en (2.2.11)

$$\partial_t \underline{N} = (1/2)\Gamma a^2 \partial_x^2 \underline{N} + O(a^4) \quad (2.2.14)$$

Esta ecuación diferencial ya tiene la forma parabólica que describe a un proceso irreversible. Para reescribir esto último en términos de los flujos J introducimos (2.2.13) en (2.2.9) obteniendo

$$J_{1\pm 1/2} = -(1/2)\Gamma [a \partial_x \underline{N} \pm (a^2/2) \partial_x^2 \underline{N}]|_{x_1} + O(a^3) \quad (2.2.15)$$

observemos que ambos flujos convergen a $-(a/2)\Gamma \partial_x \underline{N}|_{x_1}$. Definiendo a $\underline{J} = -(a/2)\Gamma \partial_x \underline{N}$ como la función que interpola al flujo obtenemos

$$\partial_t \underline{N} = -a \partial_x \underline{J} + O(a^3) \quad (2.2.16)$$

Si definimos a la concentración promedio por celda a $\rho = \underline{N}/a$ y $D = \Gamma a^2/2$ como la difusividad la última expresión se transforma en la ecuación de difusión.

$$\partial_t \rho = -D \partial_x^2 \rho \quad (2.2.17)$$

donde hemos despreciado el término $O(a^3)$.

CAMINO ALEATORIO UNIDIMENSIONAL ANISOTROPICO

Ahora pasamos a discutir el caso en el que las partículas no tienen la misma frecuencia de salto a la derecha que a la izquierda, para expresar esta diferencia de frecuencias definimos a Γ^+ y a Γ^- como la frecuencia de transición de un sitio adyacente hacia la derecha y hacia la izquierda respectivamente. El número de partículas que saltan del sitio i al $i+1$ por unidad de tiempo

viene dado por

$$J_{1+1/2} = \Gamma^+ N_1 - \Gamma^- N_{1+1} \quad (2.2.18)$$

y de 1-1 a 1

$$J_{1-1/2} = \Gamma^+ N_{1-1} - \Gamma^- N_1 \quad (2.2.19)$$

Estos flujos no desaparecen cuando $N_1 = N_{1+1}$. El cambio de población en el tiempo en el sitio 1 es entonces

$$\begin{aligned} \dot{N}_1 &= \Gamma^- N_{1+1} + \Gamma^+ N_{1-1} - (\Gamma^+ + \Gamma^-) N_1 \\ &= (J_{1+1/2} - J_{1-1/2}) \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

Interpolando esta función como lo hicimos para la difusión en el medio isotrópico nos resulta

$$\partial_t \underline{N} = (1/2) \Gamma a^2 \partial_x^2 \underline{N} - \Delta a \partial_x \underline{N} + O(a^3) \quad (2.2.21)$$

donde $\Gamma = \Gamma^+ + \Gamma^-$ y $\Delta = \Gamma^+ - \Gamma^-$. Definimos al flujo como el promedio aritmético de la ec. (2.2.21)

$$\underline{j}(x,t) = \Delta \underline{N} - (1/2) \Gamma a \partial_x \underline{N} \quad (2.2.22)$$

Manteniendo las mismas definiciones para ρ , D y a , definimos la velocidad de arrastre $v \equiv (\Gamma^+ - \Gamma^-) a = \Delta a$ obteniendo

$$J(x,t) = -D \partial_x \rho + v \rho \quad (2.2.23)$$

Finalmente

$$\partial_t \rho = D \partial_x^2 \rho - v \partial_x \rho \quad (2.2.24)$$

Estas ecuaciones escritas en una dimensión se pueden generalizar directamente. Por ejemplo

$$J(\mathbf{x},t) = -D \nabla \rho + v \rho \quad (2.2.25)$$

es el vector de flujo en un cuerpo isotrópico de cualquier dimensión. Discutamos un poco el sentido físico de la velocidad de

arrastre. Puesto que v , por definición es proporcional a la diferencia de la frecuencia de saltos, es entonces la medida de "tendencia" dentro del sistema, una tendencia que está presente aunque las partículas estén uniformemente distribuidas entre los sitios. En este caso no se puede aplicar un modelo de salto (hopping) simple. La velocidad de arrastre se interpreta simplemente como el campo de velocidades promedio del fluido. Al primer término de la ecuación (2.2.25) se le llama flujo difusional y al segundo término flujo convectivo, este mide el transporte de masa debido a un movimiento completo.

En un sólido cristalino no hay flujo convectivo debido a que la red no se mueve significativamente. Si embargo, un potencial de campo de fuerza $V(\mathbf{x}, t)$ puede actuar sobre la partícula aplicándole una fuerza $\mathbf{F} = -\nabla V$. Estos campos pueden ser internos (e.g. tensiones debido a dislocaciones) o externos (e.g., campos eléctricos que actúan sobre partículas cargadas, como en electromigración). Las partículas que se mueven en medios densos sufren colisiones que tienden a volver aleatorias sus velocidades instantáneas. La velocidad de arrastre v es un promedio estadístico sobre estas velocidades instantáneas.

El problema del camino aleatorio se ha utilizado como un modelo para entender mejor la tendencia de un sistema termodinámico a alcanzar su estado de equilibrio, por ello puede describir una gran cantidad de procesos físicos, entre ellos al movimiento Browniano y es este el problema que discutiremos a continuación debido a la importancia fundamental en las ideas y método involucrados.

EL MOVIMIENTO BROWNIANO Y LA ECUACION DE LANGEVIN

Fue Einstein [4], el primero en explicar adecuadamente el movimiento Browniano en una serie de artículos que publicó entre 1905 y 1908. Introducimos aquí, sin embargo, una formulación más moderna, debida a Langevin [5], que hace la dinámica de la partícula, mucho más simple.

Cuando una partícula se mueve dentro de un fluido, actúa una fuerza de fricción sobre ella, la expresión más simple para tal

fricción o fuerza de amortiguamiento esta dada por la ley de Stokes:

$$F_a = -\alpha v \quad (2.3.1)$$

Entonces la ecuación de movimiento para la partícula en ausencia de fuerzas adicionales es

$$m \frac{d}{dt} v + \alpha v = 0 \quad (2.3.2)$$

$$\text{ó} \quad \frac{d}{dt} v + \gamma v = 0 \quad (2.3.3)$$

donde $\gamma = \alpha/m = 1/\tau$, y cuya solución dice que si la velocidad inicial es $v(0)$, esta disminuye a cero exponencialmente con un tiempo de relajación $\tau = 1/\gamma$ de acuerdo a

$$v(t) = v(0) \exp[-t/\tau] = v(0) \exp[-\gamma t] \quad (2.3.4)$$

La física detras de la fricción es que las moléculas colisionan con la partícula, el momento de la partícula se transfiere a las moléculas del fluido y la velocidad de la partícula tiende a cero. La ecuación diferencial (2.3.4) es una ecuación determinista, i.e., la velocidad $v(t)$ al tiempo t esta completamente determinada por su valor inicial de acuerdo a (2.3.4). La ecuación determinista (2.3.2) es valida solamente si la masa de la partícula es grande de modo que su velocidad debido a las fluctuaciones termicas sea despreciable. Segun el principio de equipartición, la energia promedio de la partícula en una dimension es

$$m \langle v^2 \rangle / 2 = kT/2 \quad (2.3.5)$$

donde k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura. A medida que 'm' es más pequeña la velocidad termica $v_{\text{term}} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{kT/m}$ aumenta más por lo que puede ser observada y entonces la velocidad de una partícula pequeña no se puede describir exactamente por (2.3.3) con la solución (2.3.4). Si la masa de la partícula es un poco más grande comparada con la masa de las moléculas del fluido uno espera que (2.3.2) sea aproximadamente

válida. La ecuación (2.3.2) debe, sin embargo, ser corregida para incluir la velocidad producida por la energía térmica dada en (2.3.5). La modificación consiste en añadir una fuerza fluctuante $F_f(t)$ al lado derecho de (2.3.2), i.e., la fuerza total que las moléculas ejercen sobre la partícula se descompone en una fuerza de amortiguamiento $F_a(t)$ y una fuerza fluctuante $F_f(t)$ de acuerdo con [5]

$$F(t) = F_a(t) + F_f(t) = -\alpha v(t) + F_f(t) \quad (2.3.6)$$

Esta fuerza $F_f(t)$ es una fuerza aleatoria o estocástica, cuyas propiedades las conocemos solo en promedio. Discutamos el porqué de la fuerza estocástica. Si quisiéramos tratar el problema completo y exactamente, deberíamos resolver las ecuaciones de movimiento para todas las moléculas del fluido así como de la partícula misma, y no aparecería ninguna fuerza estocástica. Debido al gran número de moléculas en el fluido (10^{23}), sin embargo, no podemos resolver las ecuaciones de movimiento acopladas. Además, puesto que no conocemos los valores iniciales de las moléculas no podemos calcular el movimiento exacto, en particular de la partícula inmersa en el fluido. Si usáramos otro sistema (partícula y fluido) idéntico al primero excepto en las condiciones iniciales de las partículas del fluido, resultará un movimiento diferente para la partícula. Como usualmente se hace en mecánica estadística, consideremos un ensemble de tales sistemas. La fuerza $F_f(t)$ varía de sistema a sistema y lo único que podemos considerar son los promedios de estas fuerzas en el ensemble.

La ecuación de movimiento para una partícula afectada por una fuerza $F(t)$ dada en (2.3.6) es

$$\ddot{x} v = -\alpha v(t) + F_f(t)$$

o

$$\dot{v} + \gamma v = \Gamma(t) \quad (2.3.7)$$

donde se han introducido, la fuerza fluctuante por unidad de masa

$$\Gamma(t) = F_f(t)/m \quad (2.3.8)$$

la cual es llamada la fuerza de Langevin, y la constante $\gamma = \alpha/m$.

La ecuación (2.3.7) es la ecuación de Langevin y pertenece al conjunto de ecuaciones diferenciales estocásticas por contener a la fuerza estocástica $\Gamma(t)$. Para proceder a resolver el problema de la partícula que se mueve dentro del fluido uno debe conocer algunas propiedades de esta fuerza $\Gamma(t)$. Primero asumimos que su promedio sobre el ensemble sea cero

$$\langle \Gamma(t) \rangle = 0 \quad (2.3.9)$$

(aquí el símbolo $\langle \dots \rangle$ significa un promedio sobre el ensemble) y esto es debido a que la ecuación de movimiento de la velocidad promedio $\langle v(t) \rangle$ debe estar dada por (2.3.2).

El efecto de cada colisión sobre la partícula browniana es el de una impulsión, de duración muy corta, impartiendo así una cierta velocidad a la partícula. La fricción amortigua esta velocidad, de manera que a un tiempo suficientemente largo después de la colisión, la partícula ya no es influenciada por ese impulso (figura 2.4).

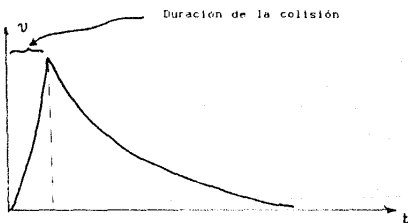


Fig.2.4 los efectos de una colisión.

Entonces, la partícula adquiere una velocidad debido a una serie de impulsos que ocurren en instantes de tiempo aleatorios, constituyendo así lo que llamamos un proceso estocástico.

Para describir esta situación matemáticamente definimos la función de correlación dependiente del tiempo como

$$K(\tau) = \langle f(t) \cdot f(t+\tau) \rangle$$

o por

$$K(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(t) \cdot f(t+\tau) dt$$

Si promediamos el producto de dos fuerzas de Langevin cada una a un tiempo diferente t y t' , vamos a proponer que el valor promedio sea cero si la diferencia $t'-t$ es mayor que el tiempo de duración τ_0 de una colisión, es decir

$$\langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = 0 \quad \text{para } |t-t'| \geq \tau_0 \quad (2.3.10)$$

Esta suposición parece ser correcta, porque las colisiones de diferentes moléculas del fluido con la partícula pequeña son aproximadamente independientes. Generalmente el tiempo de duración τ_0 de una colisión es mucho menor que el tiempo de relajación $\tau = 1/\gamma$ de la velocidad de la partícula pequeña. Podemos entonces tomar el límite $\tau_0 \rightarrow 0$ como una aproximación razonable dando

$$\langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = \gamma \delta(t-t') \quad (2.3.11)$$

La función Delta de Dirac, δ , aparece porque de otro modo la energía promedio de la partícula pequeña no puede ser finita como debería ser de acuerdo a la ley de equipartición (2.3.5). El miembro izquierdo de (2.3.11) se llama la función de correlación dependiente del tiempo de la función Γ o simplemente la de correlación de la función Γ . Para determinar correlaciones más altas como $\langle v(t_1) v(t_2) \dots v(t_n) \rangle$ deben ser conocidas correlaciones más altas para $\Gamma(t)$ generalmente uno asume que $\Gamma(t)$ tenga una distribución gaussiana con correlación δ porque además de ser la que más frecuentemente se encuentra en los fenómenos naturales, se puede describir en términos del promedio $\langle v(t) \rangle$ y de la primera función de correlación $\langle v(t_1) v(t_2) \rangle$.

Después de haber hecho estas suposiciones procedamos a resolver la ecuación (2.3.7), para ello multiplicamos (2.3.7) por 'exp[λt]'

$$e^{\lambda t} \partial_t v + \gamma e^{\lambda t} v = \Gamma(t) e^{\lambda t}$$

y reconocemos que el primer miembro es $\partial_t (v e^{\lambda t})$, por lo que al

integrar ambos miembros desde un tiempo inicial $t=0$ hasta t obtenemos

$$v(t) = v(0) e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t \Gamma(s) e^{\gamma s} ds \quad (2.3.12)$$

veamos ahora la relación entre las velocidades a distintos tiempos t_1 y t_2

$$\begin{aligned} \langle v(t_1)v(t_2) \rangle &= \langle v^2(0) \rangle e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \\ &+ \left\langle \int \Gamma(s_1) e^{\gamma s_1} ds_1 \int \Gamma(s_2) e^{\gamma s_2} ds_2 \right\rangle e^{-\gamma(t_1+t_2)} + \\ &+ 2 \langle v(0) e^{-\gamma(t_1+t_2)} \int_0^{t_1} \Gamma(s_1) e^{\gamma s_1} ds_1 \rangle \end{aligned}$$

asumiendo que Γ es delta correlacionada (ecuación (2.3.11)) con media cero (ecuación (2.3.9)) tenemos

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = v^2(0) e^{-\gamma(t_1+t_2)} - (q/2\gamma) \left(e^{\gamma(t_1+t_2)} - e^{-\gamma|t_1-t_2|} \right) \quad (2.3.13)$$

Es fácil ver que esta ecuación no cambia si intercambiamos t_1 por t_2 . Para tiempos grandes, es decir, $\gamma t_1 \gg 1$ y $\gamma t_2 \gg 1$, la función de correlación es independiente de la velocidad inicial $v(0)$ y solo es función de la diferencia de tiempos t_1-t_2 , es decir

$$\langle v(t_1)v(t_2) \rangle = (q/2\gamma) e^{-\gamma|t_1-t_2|} \quad (2.3.14)$$

En el estado estacionario la energía promedio de la partícula Browniana está dada entonces por

$$\langle E \rangle = (m/2) \langle v^2(t) \rangle = mq/4\gamma \quad (2.3.15)$$

y usando (2.3.5) la energía promedio es $kT/2$, por lo que la intensidad q de la correlación de la fuerza de Langevin es

$$q = 2\gamma kT/m \quad (2.3.16)$$

Para el movimiento Browniano de una partícula es difícil

medir la función de correlación de la velocidad (2.3.13). Es mucho más fácil medir el valor cuadrático promedio de su desplazamiento. Si suponemos que la partícula empieza al tiempo $t=0$ en una posición x_0 y con una velocidad v_0 el desplazamiento cuadrático promedio al tiempo t es

$$\langle (x(t) - x_0)^2 \rangle = \int_0^t \int_0^{t_1} \langle v(t_1) v(t_2) \rangle dt_1 dt_2 \quad (2.3.17)$$

pero

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_0^{t_1} e^{-\gamma|t_1 - t_2|} dt_1 dt_2 &= 2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} e^{-\gamma(t_1 - t_2)} dt_2 \\ &= 2(t + e^{-\gamma t} / \gamma - 1 / \gamma) / \gamma. \end{aligned}$$

entonces

$$\langle x(t) - x_0 \rangle = (v_0 - q/2\gamma) \left((1 - e^{-\gamma t}) / \gamma \right)^2 + qt/\gamma^2 - q(1 - e^{-\gamma t}) / \gamma^3 \quad (2.3.18)$$

v_0 es la distribución de velocidades para el estado estacionario, por lo que al utilizar (2.3.15) el primer término del miembro derecho se anula. Para t muy grande ($\gamma t \gg 1$), $e^{-\gamma t} \approx 1 - \gamma t$, y

$$\langle x(t) - x_0 \rangle = 2Dt \quad (2.3.19)$$

con

$$D = q/2\gamma^2 = kT/m\gamma \quad (2.3.20)$$

Esta ecuación fue primero obtenida por Einstein [4], quien inició el término de la teoría del Movimiento Browniano.

A la fuerza de Langevin con correlación δ (2.3.11) se le llama ruido blanco porque la distribución espectral, que está dada por la transformada de Fourier de (2.3.11), es entonces independiente de la frecuencia ω . Si las fuerzas estocásticas $\Gamma(t)$ no son δ correlacionadas, es decir, si la densidad espectral depende de la frecuencia, uno usa el término de ruido coloreado.

Una ecuación de Langevin del tipo

$$\partial_t \xi_j + \sum_j \gamma_{ij} \xi_j = \Gamma_i(t); \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad (2.3.21)$$

con una distribución de fuerzas de Langevin δ -correlacionadas

$$\begin{aligned} \langle \Gamma_i(t) \rangle &= 0, \\ \langle \Gamma_i(t) \Gamma_j(t') \rangle &= q_{ij} \delta(t-t'), \quad q_{ij} = q_{ji} \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

describe un proceso llamado proceso de Orstein-Uhlenbeck. La característica esencial es que las ecuaciones homogéneas son lineales y que los coeficientes q_{ij} que indican la intensidad del ruido no dependen de la variable ξ_k . Para $N = 1$ la ecuación de Langevin describe el movimiento Browniano unidimensional.

LA DIFUSION EN MATERIALES AMORFOS Y EL GRUPO DE RENORMALIZACION DINAMICO

El problema de la difusion en medios con movimiento aleatorio ('Random drift') ha sido un topico clasico dentro de la Fisica Estadística. Recientemente ha habido un interes creciente en estos temas debido a la amplia conexión reconocida en procesos fisicos (fluidos turbulentos, difusion a traves de medios porosos), químicos y biológicos, y el profundo conocimiento ganado en cuanto a la naturaleza fractal y jerárquica de los mismos [1]. Son varias las maneras en que se ha tratado este problema ; e.g. el modelo de saltos ('Hopping Model') [2], Integrales de trayectoria [3], teoría de fluctuaciones en hidrodinámica etc.

El problema de la caminata al azar en medios desordenados ha sido resuelto para el caso unidimensional por Sinai [4] y se ha mostrado que el promedio de los cuadrados de los desplazamientos de las partículas para tiempos largos es $\langle r^2 \rangle \sim (\ln t)^4$, i.e., la ley para el desplazamiento de las partículas no es gaussiano. Marinari *et al* [5] discutieron la posible conexión del caminante al azar con el problema del ruido $1/f$ para $d=1$ y $d=2$; en este artículo se mencionan los experimentos llevados a cabo, pero los resultados no son lo bastante definidos debido al carácter sensitivo del 'camino al azar' a los grados de inhomogeneidad. Hay varias generalizaciones del modelo de Sinai ([6] y [7]) , en particular Havlin [6] ha mostrado que las correlaciones en el desorden espacial alteran fuertemente las propiedades de transporte.

El método del Grupo de Renormalización (GR) ha sido aplicado recientemente al problema de la difusión de partículas clásicas con correlaciones de corto alcance y a escalas de tiempo largos ([8-13]). Esto permite analizar el comportamiento asintótico de la difusión en diferentes dimensiones, en particular en la dimensión crítica d_c ($d_c=2$); se le ha llamado así a esta dimensión debido a que las correcciones de la influencia de fuerzas aleatorias no son relevantes en $d > d_c$, pero sí, en cambio para $d < d_c$ modificando

la ley de difusión típica a una subdifusional. Las investigaciones del caso cuando $d=2$, y la generalización al caso $1 < d \leq 2$ con la utilización del método de desarrollo en ϵ ($d = 2 - \epsilon$) ya han sido realizados ([9-11]) obteniéndose que para el caso $d=2$ hay solo correcciones logarítmicas a la ley de difusión clásica desapareciendo estas en el límite $t \rightarrow \infty$.

3.1. DIFUSION EN UN MATERIAL AMORFO

Estamos ahora en condiciones para analizar la difusión de partículas dentro de un material amorfo, para esto recordemos que en un medio isomorfo las ecuaciones básicas son

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (3.1.1)$$

$$\text{y} \quad \mathbf{J} = -D_0 \nabla \rho \quad (3.1.2)$$

donde ρ es la densidad de partículas y D_0 el coeficiente de difusión. Mientras que la ecuación (3.1.1) es válida en general, siempre y cuando haya conservación de materia, la ecuación constitutiva (3.1.2) es una expresión particular para el flujo. Como vimos en el capítulo anterior, el flujo puede ser producido tanto por el gradiente de concentración, que incluso puede ser diferente en cada dirección teniendo entonces que cambiar la constante D_0 por un tensor \mathbf{D} , como por flujos convectivos dentro del material.

Para poder generalizar el análisis de la difusión a medios desordenados, en donde el flujo se ve afectado por el desorden en la estructura, será necesario añadir a la ecuación (3.1.2) un término que represente el flujo ocasionado por la influencia del medio sobre las partículas que se difunden. De la definición de flujo de materia, la forma natural es proponer

$$\mathbf{J} = \mathbf{f}(\rho, \mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t) \quad (3.1.3)$$

en donde el vector $\mathbf{f}(\rho, \mathbf{x}, t)$ contiene la información, adicional a

la contenida en D_0 , de como actúa el medio sobre las partículas. supondremos que f no cambia al variar la densidad de partículas ρ , esto será válido mientras el número de estas sea pequeño comparado con el número de partículas del medio. Entonces, el flujo de partículas debido tanto a la diferencia de concentración como a la acción del medio está dada por

$$J_{\text{tot}} = -D_0 \nabla \rho + f(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}, t). \quad (3.1.4)$$

Un ejemplo sencillo, resuelto ya en el capítulo 2, es considerar a $f(\mathbf{x}, t) = v_0 \hat{e}_x$, lo cual físicamente significa que hay un flujo convectivo constante en la dirección \mathbf{x} , además de la difusión producida por el gradiente de concentración. De la ecuación (3.1.4) se puede observar que en general existe una competencia entre la difusión producida por el gradiente de concentración y la corriente inducida por $f(\mathbf{x}, t)$. Este hecho se destacará más adelante cuando entre en juego la dimensión del espacio de físico de nuestro sistema.

Ya que el proceso de la difusión se realiza en un 'sólido' podemos suponer que f no depende del tiempo y sólo dependerá de la posición, i.e.,

$$f = f(\mathbf{x}). \quad (3.1.5)$$

Además, puesto que se trata de un medio desordenado, esta función vectorial tendrá un carácter aleatorio o estocástico, por lo que la única información acerca de f será de tipo estadística. Recordemos que un conjunto de variables aleatorias f_1, f_2, \dots, f_n se dice que son independientes unas de otras si $P(f_1 = x_1, f_2 = x_2, \dots, f_n = x_n) = \prod_{i=1}^n P(f_i = x_i)$. Si las variables aleatorias no son tan independientes, una medida del grado de dependencia está dada por la función de correlación.

De la misma manera que para la ecuación de Langevin del movimiento Browniano postulamos $\langle \Gamma(t) \Gamma(t') \rangle = q \delta(t-t')$ (ec. (2.3.11)), lo cual significa que las Γ 's son independientes excepto en $t=t'$, es razonable suponer para $f(\mathbf{x})$ que

$$\langle f_i(\mathbf{x}) f_j(\mathbf{x}') \rangle = \phi_{ij}(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|), \quad (3.1.6)$$

donde f_i, f_j son dos componentes de f , y ϕ es una función que depende tanto de las componentes i, j , como de la distancia entre los puntos \mathbf{x} y \mathbf{x}' . Físicamente esperamos que ϕ sea una función parecida a la función delta de Dirac δ .

Para dar condiciones iniciales y de frontera que nos permitan obtener soluciones simples al problema (principalmente para poder hacer uso de la transformada de Fourier), pongamos a nuestro conjunto de partículas dentro de un medio isomorfo, isotrópico y de extensión infinita. Una vez establecido el equilibrio entre las partículas y el medio, el sistema estará caracterizado entre otros parámetros termodinámicos, por la densidad ρ_0 constante en todo punto (fig.3.1). durante todo este tiempo $f(\mathbf{x}) = 0$. En un cierto instante (que designaremos por $t=0$) nuestro medio deja de ser homogéneo e isotrópico para deformarse y constituir lo que llamamos un medio amorfo (fig.3.2), el efecto del medio sobre las partículas se puede escribir entonces como $f(\mathbf{x},t) = f(\mathbf{x})H(t)$, donde $H(t)$ es la función escalon.

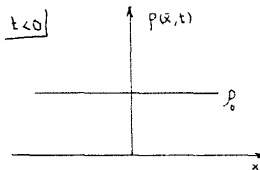


Fig. 3.1.- La densidad en un medio ISOMORFO ($t < 0$)

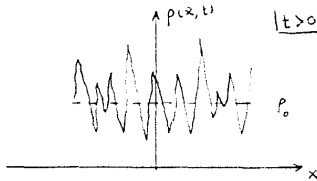


Fig. 3.2.- La densidad en un medio AMORFO ($t > 0$).

Consecuentemente, para $t > 0$ la densidad dependerá tanto de la posición como del tiempo.

$$\rho_0 \longrightarrow \rho(\mathbf{x}, t)$$

este cambio lo podemos escribir como

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_0 + \delta\rho(\mathbf{x}, t), \quad (3.1.7)$$

donde $\delta\rho$ es la fluctuación alrededor de la densidad promedio ρ_0 ;

consideramos entonces que $\delta\rho(\mathbf{x}, t < 0) = 0$.

Sustituyendo el flujo total de partículas J_{tot} dado por la ecuación (3.1.4) en la ecuación de continuidad (3.1.1), y considerando que f no depende del tiempo (ec. (3.1.5)) obtenemos:

$$\partial_t \rho(\mathbf{x}, t) - D_0 \nabla^2 \rho(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \rho(\mathbf{x}, t). \quad (3.1.8)$$

Finalmente, tomando en cuenta (3.1.7), la dinámica de las fluctuaciones en el sólido amorfo está dada por

$$\partial_t \delta\rho(\mathbf{x}, t) - D_0 \nabla^2 \delta\rho(\mathbf{x}, t) = -\rho_0 \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \nabla \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}) \delta\rho(\mathbf{x}, t). \quad (3.1.9)$$

Esta ecuación es lineal en $\delta\rho$; sin embargo, el último término acopla dos funciones dependientes de \mathbf{x} , una de ellas de origen estocástico, por lo que la ecuación diferencial es no lineal y estocástica en \mathbf{x} (llamada también de Langevin no lineal).

Para resolver formalmente esta ecuación utilizaremos el método de la Transformada de Fourier. La convención que usaremos para la transformada directa es

$$\delta\rho(\mathbf{k}, \omega) = \int dt \int d\mathbf{x} \delta\rho(\mathbf{x}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + i\omega t} \quad (3.1.10)$$

y para la inversa

$$\delta\rho(\mathbf{x}, t) = \int_{\omega} \int_{\mathbf{k}} \delta\rho(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t} \quad (3.1.11)$$

donde los límites de integración para t y para cada componente x_i del vector \mathbf{x} son

$$\int \equiv \int_{-\infty}^{\infty}$$

para la frecuencia ω :

$$\int_{\omega} \equiv (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega,$$

y para el momento \mathbf{k}

$$\int_{\mathbf{k}} \equiv (2\pi)^{-d} \int d\mathbf{k}.$$

Ahora bien, debido a que el sistema es esencialmente isotrópico, la dependencia de las fluctuaciones en los ángulos es nula por lo que la integral para los momentos \mathbf{k} se puede transformar en una que depende solo de la magnitud k (ver apéndice 3). $k = |\mathbf{k}|$

$$\int_{\mathbf{k}} = (2\pi)^{-d} \int d\mathbf{k} = (2\pi)^{-d} S_d \int_0^{\Delta} k^{d-1} dk \quad (3.1.12)$$

donde S_d es la superficie de una esfera en d dimensiones y Δ el límite superior, $k = \Delta = 2\pi/\lambda$, que corresponde a distancias muy pequeñas (pero grandes comparadas con el camino libre medio de las partículas), debajo de las cuales el límite de una teoría continua deja de ser válido.

La ecuación (3.1.9) en términos del momento \mathbf{k} y de la frecuencia ω queda dada por

$$-i\omega\delta\rho(\mathbf{k},\omega) + D_0 k^2 \delta\rho(\mathbf{k},\omega) = -i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(\omega) - i\mathbf{k} \cdot \int_{\mathbf{q}} \mathbf{F}(\mathbf{q}) \delta\rho(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega)$$

y al despejar $\delta\rho(\mathbf{k},\omega)$:

$$\delta\rho(\mathbf{k},\omega) = -[\rho_0 i\mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(\omega)] / (-i\omega + D_0 k^2) - [i\mathbf{k} / (-i\omega + D_0 k^2)] \cdot \int_{\mathbf{q}} \mathbf{F}(\mathbf{q}) \delta\rho(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega) \quad (3.1.13)$$

Observemos que la no linealidad de nuestra ecuación se convierte ahora en una convolución de \mathbf{F} con $\delta\rho$, esto indica el acoplamiento que hay entre los modos de las fluctuaciones espaciales de \mathbf{F} y de $\delta\rho$. Introduciremos aquí un parámetro adimensional λ , $\lambda=1$, con el fin de marcar estos acoplamientos no lineales que acabamos de mencionar. Definiendo al propagador de partículas libres, $G_0(\mathbf{k},\omega)$ como

$$G_0(\mathbf{k},\omega) = (-i\omega + D_0 k^2)^{-1}, \quad (3.1.14)$$

la ecuación (3.1.13) se puede escribir entonces como

$$\delta\rho(\mathbf{k},\omega) = -i\rho_0 G_0(\mathbf{k},\omega) \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(\omega) - i\lambda G_0(\mathbf{k},\omega) \mathbf{k} \cdot \int_{\mathbf{q}} \mathbf{F}(\mathbf{q}) \delta\rho(\mathbf{k}-\mathbf{q},\omega) \quad (3.1.15)$$

Antes de intentar resolver esta ecuación consideremos el caso en que $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ no es nula, pero eliminando el acoplamiento entre los modos \mathbf{q} , es decir $\lambda=0$. Esto define el caso lineal y la ecuación (3.1.13) se convierte en

$$\delta\rho(\mathbf{k},\omega) = -i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(\omega) G_0(\mathbf{k},\omega) \quad (3.1.16)$$

sustituyendo G_0 obtenemos

$$-i\omega\delta\rho(\mathbf{k},\omega) + D_0 k^2 \delta\rho(\mathbf{k},\omega) = -i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(\omega)$$

la cual es la transformada de Fourier respecto a t de

$$\partial_t \delta\rho(\mathbf{k},t) + D_0 k^2 \delta\rho(\mathbf{k},t) = -i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(t) \quad (3.1.17)$$

cuya solución es

$$\delta\rho(\mathbf{k},t) = \delta\rho(\mathbf{k},0) \exp[-D_0 k^2 t] - (i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) / D_0 k^2) \left[1 - \exp[-D_0 k^2 t] \right] \quad (3.1.18)$$

Obsérvese que hay una semejanza formal entre la ecuación (3.1.17) y la ecuación (2.3.7), la ecuación de Langevin, si identificamos a la fuerza fluctuante Γ con el término $-i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k})$. Sin embargo, también hay diferencias puesto que en (2.3.7) Γ es dependiente del tiempo, $\Gamma = \Gamma(t)$.

Por otro lado, la ecuación (3.1.18) para tiempos largos, $t \rightarrow \infty$, no depende de la condición inicial $\delta\rho(\mathbf{k},0)$, sino de las fluctuaciones \mathbf{F} en la dirección \mathbf{k} :

$$\delta\rho(\mathbf{k},t) \Big|_{t \rightarrow \infty} = - \left(i\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) / D_0 k^2 \right) \quad (3.1.19)$$

por lo que el promedio sobre un ensemble de sólidos amorfo a tiempos largos es proporcional al promedio $\langle \mathbf{F}(\mathbf{k}) \rangle$.

CARACTERISTICAS DEL RUIDO $F(k)$

Para proseguir es necesario tener información explícita sobre F . Primero nótese que como $F(k)$ es un campo vectorial, por el teorema de Helmholtz podemos descomponer a F como

$$F = F^l + F^t \quad (3.1.20)$$

en la que la parte longitudinal de F , F^l cumple con $\nabla \times F^l = 0$ y la parte transversal, F^t , satisface $\nabla \cdot F^t = 0$.

Segundo, con el fin de simplificar el modelo consideraremos a F como una distribución estocástica Gaussiana con media cero. Para dar una imagen pictórica del significado de esta suposición consideremos el caso unidimensional, que más tarde se generalizará a más dimensiones.

Una partícula de prueba se encuentra en un punto x dentro de un sólido amorfo S_1 . Esta partícula se verá afectada por el medio que le produce una velocidad $f(x)$. Si consideramos un conjunto representativo de sólidos S_i similares al primero y promediamos las velocidades que afectaron a esa partícula de prueba situada en el punto x de cada sólido, obtendremos $\langle f(x) \rangle = 0$, donde $\langle \rangle$ representa un promedio sobre ese conjunto (fig 3.3) o en más dimensiones $\langle f_i(x) \rangle = 0$, donde las f_i son las componentes del vector $f(x)$

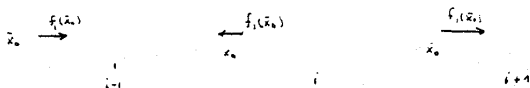


Fig. 3.3. Una partícula de prueba en los puntos x_0 de cada sólido del conjunto

Si tenemos ahora dos partículas una en x y otra en x' y medimos qué tanto es afectada la partícula en x dado que en x' se le imprimió una velocidad $f(x')$ veremos que en promedio $\langle f(x)f(x') \rangle = (cte)\delta(x-x')$. Para d dimensiones

$$\langle f_i(x)f_j(x') \rangle = \Gamma_{ij}(x)\delta(x-x') \quad (3.1.21)$$

donde las $\Gamma_{ij}(x)$ es la intensidad de correlación.

Si graficamos la probabilidad de que la partícula en el punto x sea afectada por $f(x)$ adquiere una forma Gaussiana (fig.3.4). Los resultados dados para $f(x)$, se pueden transcribir a $F(k)$ al aplicar la transformada de Fourier (ec. (3.1.10))

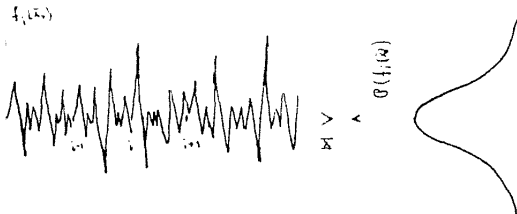


Fig.3.4 Esquema de la distribución de probabilidades gaussiana de f .

Para describir esta función de distribución nos basta entonces solo conocer los dos primeros momentos,

$$\langle F_i(k) \rangle = 0. \quad (3.1.22)$$

$$\langle F_i^{\ell,t}(k)F_j^{\ell,t}(k') \rangle = (2\pi)^d \frac{\ell,t}{\gamma} P_{ij}^{\ell,t}(k)\delta(k+k') \quad (3.1.23)$$

$$\langle F_i^t(k)F_j^{\ell}(k) \rangle = \langle F_i^{\ell}(k)F_j^t(k) \rangle = 0 \quad (3.1.24)$$

donde $P_{ij}^{\ell}(k) = k_i k_j / k^2$ y $P_{ij}^t(k) = \delta_{ij} - k_i k_j / k^2$, son los proyectores longitudinal y transversal, $\frac{\ell,t}{\gamma}$ y $\frac{\ell,t}{\gamma}$ miden la

intensidad de las fluctuaciones longitudinales y transversales respectivamente. Supondremos que las γ 's son constantes.

Los proyectores P_{ij}^f y P_{ij}^t provienen de la transformada de Fourier de la función de correlación $\langle f(\mathbf{x})f(\mathbf{x}') \rangle$, tomando en cuenta las propiedades que tienen la parte longitudinal y la parte transversal de f , y suponiendo en ambos casos que son delta-correlacionadas, como lo indica la ecuación (3.1.21).

La expresión que se propone para el segundo momento $\langle FF \rangle$ está respaldada en los resultados obtenidos por Derrida y Luck [14] y de proposiciones similares en otros problemas físicos de interés (8-12).

ANÁLISIS DIMENSIONAL

Una técnica que nos permite analizar cuando aparecerán cantidades que divergen es el llamado "Power Counting" a través de un análisis dimensional. Para introducirlo escalaremos las variables involucradas en la ecuación (3.1.9) de la siguiente manera, sean

$$(a) t = \alpha \cdot t', \quad (b) \delta\rho = \beta \cdot \delta\rho', \quad (c) f = \epsilon f' \quad (3.1.25)$$

en donde $t', \delta\rho'$ y f' son variables adimensionales. En el problema que estamos estudiando las divergencias dependerán de las dimensiones del espacio físico en el que está inmerso el sólido y por ello no se escalan las longitudes, la ecuación (3.1.9) es entonces

$$(\beta/\alpha) \partial_{t'} \delta\rho' - D_0 \beta \nabla^2 \delta\rho' = -\rho_0 \epsilon \nabla \cdot f' - \lambda \epsilon \beta \nabla \cdot (f' \delta\rho'). \quad (3.1.26)$$

Multiplicando por α/β ,

$$\partial_{t'} \delta\rho' - D_0 \alpha \nabla^2 \delta\rho' = -(\epsilon\alpha/\beta) \rho_0 \nabla \cdot f' - \lambda \epsilon \alpha \nabla \cdot (f' \delta\rho')$$

y haciendo $D_0 = 1/\alpha$ (esto significa que estamos tomando a las unidades del tiempo como las unidades del recíproco de D_0), $\rho_0 \epsilon \alpha = \beta$, y usando las ecuaciones (3.1.23) y (3.1.25c) $\epsilon^2 = [\gamma]$, la

ecuación (3.1.9) queda finalmente como

$$(\partial_t - \nabla^2)\delta\rho' = -\nabla \cdot \mathbf{f}' - \Lambda \nabla \cdot (\mathbf{f}'\delta\rho') \quad (3.1.27)$$

con

$$\Lambda = \lambda_2^{1/2}/D_0. \quad (3.1.28)$$

Observemos que la constante Λ , que es el verdadero parámetro de acoplamiento, contiene toda la información de los coeficientes.

Veamos ahora las dimensiones de Λ , para ello obtengamos las dimensiones de cada coeficiente, comencemos con el parámetro λ el cual fue introducido para marcar los acoplamientos, por lo que $[\lambda] = 1$. Para hallar la dimensión del coeficiente de difusión desnudo D_0 (llamamos un coeficiente de difusión desnudo al que corresponde al problema lineal desacoplado, ec. (3.1.16)), usemos los dos primeros términos de la ecuación (3.1.9) cuyas unidades son $N/L^d - [D_0] \cdot N/L^{d+2}$, donde ya hemos usado $[\delta\rho] = N/L^d$. Puesto que ambos términos deben tener las mismas unidades, necesariamente

$$[D_0] = L^2/t. \quad (3.1.29)$$

Para obtener las dimensiones de γ recordemos que $F(\mathbf{k})$ es la transformada de Fourier de $f(\mathbf{x})$, entonces $[F] = [f] \cdot L^d = L^{d+1}/t$ por otro lado $[\delta^d(\mathbf{k} + \mathbf{k}')] = [\mathbf{k}^{-d}] = L^d$ y como

$$[\gamma] = [\langle FF \rangle / \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}')],$$

entonces

$$[\gamma] = L^{d+2}/t^2. \quad (3.1.30)$$

Sustituyendo las dimensiones correspondientes a λ_0, D_0 y γ_0 en (3.1.28) tenemos

$$[\Lambda] = L^{(d-2)/2} \quad (3.1.31)$$

De esta forma el análisis dimensional nos lleva a que Λ tiene dimensiones de longitud a la potencia $(d-2)/2$. Entonces, al obtener la corrección de las constantes como resultado de las no linealidades, la razón adimensional D_r/D_0 , donde D_r es el coeficiente de difusión renormalizado a frecuencia y momentos bajos, deberá incluir términos de la forma

$$D_R/D_0 = 1 + \text{const} \cdot \Lambda^2 \int_{\mathbf{q}} q^{-2} + \dots \quad (3.1.32)$$

El segundo término del miembro derecho aparece por consistencia en el desarrollo ya que los términos son adimensionales.

Al resolver la integral $\int_{\mathbf{q}} q^{-2}$ desde $|\mathbf{q}|=0$ hasta $|\mathbf{q}|=\Delta$ obtenemos (ver apéndice 3)

$$\int q^{-2} d^d q = S_d \Delta^{d-2} / (d-2), \quad d > 2$$

donde $S_d = 2\pi^{d/2} / \Gamma(d/2)$ es la superficie de una esfera en d dimensiones. Observemos que aparecerán divergencias en la región de modos bajos, $q \rightarrow 0$, cuando la dimensión sea $d \leq 2$. Es decir, hay divergencia en el llamado infra-rojo, y debido a esto es que se aplicará el Grupo de Renormalización, para así manipular estas divergencias.

3.2. EL GRUPO DE RENORMALIZACION

Hemos encontrado a través del análisis dimensional que el término no-lineal de nuestra ecuación de difusión (que en el espacio de Fourier es una convolución) introduce un acoplamiento de unos modos sobre otros conduciendo a divergencias en la corrección del coeficiente D_0 en $d=2$.

Ya que el acoplamiento no lineal introduce el efecto de muchos modos, vamos a ver el efecto selectivo de unos modos sobre otros. Es decir, podemos seleccionar un intervalo de momentos que contenga a los momentos más altos, al que llamaremos la cáscara superior de momentos:

$$\Delta e^{-\eta} < |k| < \Delta$$



para después determinar el efecto dinámico de éstos sobre los modos restantes,



siempre que esa banda sea tan delgada como se quiera, la determinación de estos efectos los conseguiremos a través del método del Grupo de Renormalización Dinámico.

A continuación se expresan las ideas generales del método del grupo de renormalización dinámico.

Notemos que la ecuación (3.1.13), la cual es la solución formal a la ecuación de difusión dada por nuestro modelo en el espacio de Fourier, está especificada por un conjunto de parámetros $\mu(\lambda_0, \rho_0, D_0, \beta_0^t, \beta_0^t)$, y todas las cantidades físicas calculadas usando esa ecuación son funciones de este conjunto de parámetros. El procedimiento que seguiremos consta de los siguientes dos pasos

- 1) Introducimos el efecto de los modos altos, $\delta\rho^>(k, \omega)$, (los cuales se encuentran en la cáscara superior $\Delta e^{-\eta} < |k| < \Delta$),

en los parámetros que aparecen en (3.1.13). Esto se hace al resolver formalmente las ecuaciones para $\delta\rho'(\mathbf{k},\omega)$ como una serie de potencias en λ_0 . La solución debido a las no linealidades depende de los modos restantes, altos y bajos. Estas soluciones formales son entonces sustituidas en las ecuaciones para los modos bajos de $\delta\rho$, que denotaremos por $\delta\rho''(\mathbf{k},\omega)$, para así eliminar la dependencia explícita en las $\delta\rho'(\mathbf{k},\omega)$. Finalmente, el conjunto reducido de ecuaciones se promedia sobre la parte de la fuerza estocástica asociada a los modos altos $F''(\mathbf{k},\omega)$ que actúa en la celda $\Delta e^{-\eta} < |\mathbf{k}| < \Delta$, con objeto de eliminar detalles de la escala asociada al intervalo. Esto redefinirá los coeficientes que entran en las ecuaciones de movimiento reducidas, y también modificará las propiedades estadísticas de $F(\mathbf{k},\omega)$. El parámetro η nos mide la fracción de los modos que han sido eliminados.

2) La segunda etapa consiste en reescalar el espacio, el tiempo, las magnitudes de las variaciones de la densidad y las F 's con objeto de hacer parecida la nueva ecuación, tanto como sea posible, a la ecuación original (3.1.13). Este método es análogo al llamado Decimación en Mecánica Estadística.

Los nuevos acoplamientos que se generan con este procedimiento suelen ser más complicados, sin embargo examinaremos ahora solo la primera aproximación. El resultado de este cálculo se expresa en términos de relaciones de escalamiento recursivas.

DIAGRAMAS

Para obtener las correcciones a las constantes del problema como se expuso en la sección anterior será necesario introducir una simbología que relacione las expresiones matemáticas con diagramas que faciliten los cálculos y el análisis.

Representemos a la solución formal como

$$\delta\rho(\mathbf{k},\omega) = \Rightarrow$$

al propagador libre G_0 por

$$G_0 = \longrightarrow$$

el efecto estocástico del medio

$$F_1(\mathbf{k}) = \sim \underset{i}{\circ}$$

al factor

$$\rho_0 \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta(\omega) = -0$$

y al parámetro o vértice de acoplamiento por

$$-i\lambda_0 \mathbf{k} = \text{---} \circ \text{---}$$

entonces la solución (3.1.4) la podemos escribir como:

$$\text{---} \Rightarrow \text{---} = \text{---} \rightarrow \circ \text{---} + \text{---} \rightarrow \text{---} \Rightarrow \text{---} \quad (3.2.1)$$

A partir de estos diagramas se puede apreciar mejor cómo la solución formal $\delta\rho(\mathbf{k}, \omega)$, depende de la solución misma. La manera típica de resolver ecuaciones no lineales como la (3.2.1) es buscando una solución perturbativa en potencias del vértice λ_0 [15]. Puesto que la solución perturbativa se desarrollará en términos de la solución lineal, que llamaremos de orden cero en λ , analicemos primero el problema lineal (ec. 3.1.16)

$$\delta\rho^0(\mathbf{k}, \omega) = G_0(\mathbf{k}, \omega) [-i\rho_0 \delta(\omega)] \mathbf{k} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{k})$$

$$\left(\text{---} \Rightarrow \text{---} \right)^0 = \text{---} \rightarrow \circ \text{---} \quad (3.2.2)$$

Dado que los campos $\delta\rho(\mathbf{x}, t)$ y $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ son reales se sigue que

$$\delta\rho(\mathbf{k}, \omega) = \delta\rho(-\mathbf{k}, -\omega)$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{k}) = \mathbf{F}(-\mathbf{k})$$

y

entonces

$$\begin{aligned} \delta\rho^0(\mathbf{k}, \omega) &= \delta\rho^0(-\mathbf{k}, -\omega) \\ &= G_0(-\mathbf{k}, -\omega) [i\rho_0 \delta(-\omega)] (-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{F}(-\mathbf{k}) \end{aligned}$$

$$\left(\text{---} \Leftarrow \text{---} \right)^0 = \text{---} \leftarrow \circ \text{---} \quad (3.2.3)$$

Con las ecuaciones (3.2.2) y (3.2.3) podemos construir la función de correlación a orden cero,

$$C_{\rho\rho}^0(\mathbf{k}\mathbf{k}, \omega^2) = \langle \delta\rho^0(\mathbf{k}, \omega) \delta\rho^0(-\mathbf{k}, -\omega) \rangle$$

$$C_{\rho\rho}^0(\mathbf{k}\mathbf{k}, \omega^2) = \langle \begin{array}{c} \longrightarrow \bigcirc \quad \bigcirc \longleftarrow \\ \hline \langle \bigcirc \bigcirc \rangle \end{array} \rangle \quad (3.2.4)$$

$$C_{\rho\rho}^0(\mathbf{k}\mathbf{k}, \omega^2) = \begin{array}{c} \hline \bigcirc \\ \hline \end{array} \quad (3.2.5)$$

donde $\bigcirc = \langle \bigcirc \bigcirc \rangle$.

La expresión matemática de este símbolo es, según (3.1.23-24),

$$= \langle F_i(\mathbf{k}) F_j(\mathbf{k}') \rangle = (2\pi)^d \delta_{i,j}^{\ell,t} P_{i,j}^{\ell,t}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad (3.2.6)$$

Teniendo ya todos los elementos para realizar el desarrollo perturbativo, procederemos a la realización de cada uno de los pasos del Grupo de Renormalización. Para ello definiremos los campos escalares $\delta\rho(\mathbf{k}, \omega)$ para bajos y altos momentos respectivamente:


$$\delta\rho^<(\mathbf{k}, \omega) = \begin{array}{c} \longrightarrow \\ \longleftarrow \end{array}, \text{ donde } |\mathbf{k}| \text{ está en el intervalo } 0 < |\mathbf{k}| \ll e^{-\eta\Delta}$$

$$\delta\rho^>(\mathbf{k}, \omega) = \begin{array}{c} \longleftarrow \\ \longrightarrow \end{array}, \text{ donde } |\mathbf{k}| \text{ está en el intervalo } e^{-\eta\Delta} < |\mathbf{k}| < \Delta$$



La diagonal indicará siempre que se trata de los momentos que están en la cáscara $e^{-\eta\Delta} < |\mathbf{k}| < \Delta$.

Dado que la solución final de la ecuación de difusión (3.1.13) es una colección de ecuaciones acopladas, una para cada modo \mathbf{k} , el término de acoplamiento conecta a $\delta\rho^<$ con $\delta\rho^>$. Exhibiremos explícitamente este acoplamiento.

Recordemos que  representa una convolución de F con δp , esto es, una integración de momentos de manera que se conserven en el vertice.

De la ecuación completa (3.2.1) tenemos entonces:

$$\Rightarrow_c = \text{---} \circ + \text{---} \text{---} \Rightarrow + \text{---} \text{---} \text{---} \Rightarrow \quad (3.2.7)$$

y

$$\not\Rightarrow = \text{---} \text{---} \circ + \text{---} \text{---} \not\Rightarrow + \text{---} \text{---} \not\Rightarrow \quad (3.2.8)$$

en estas ecuaciones hemos eliminado ya algunos terminos debido a que violan la conservación del momento, por ejemplo

$$\text{---} \text{---} \Rightarrow = \text{---} \text{---} \text{---} \Rightarrow \begin{matrix} q^c \\ k^c \\ p^c = (k-q)^c \end{matrix} = 0$$

pues no es posible obtener una $|q| = q^c$ por la suma o resta de k^c y p^c . Similarmente los diagramas

$$\text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \Rightarrow, \quad \text{---} \text{---} \text{---} \not\Rightarrow, \quad \text{etc.}$$

son cero.

Notemos que realmente estas ecuaciones son válidas siempre que los modos k^c estén lejos de la cáscara superior que eliminaremos, pues si estamos cerca podrá ser posible que $k^c - p^c = q^c$



En este sentido las ecuaciones (3.2.7) y (3.2.8) son aproximaciones, sin embargo, esta condición no es muy relevante ya que queremos examinar el comportamiento a grandes distancias

$$k = 2\pi/\lambda \rightarrow 0$$

y la cáscara se encuentra lejos de esta región.

CORRECCION DE LOS PARAMETROS

Los diagramas que acabamos de presentar no involucran una nueva física sino solo una herramienta que evitará trabajos innecesarios. Nuestra intención es hacer uso de estos diagramas para obtener la influencia de los momentos en la cáscara sobre el campo $\delta\rho(\mathbf{k},\omega)$ de bajos momentos, esto se manifestará en las correcciones a las constantes $D_0, \lambda_0, \beta_0^L$ y λ_0^L , así que procederemos a desarrollar la ecuación para altos momentos (3.2.8) en potencias de λ_0 . Explícitamente nos queda

$$\begin{aligned} \Rightarrow &= \text{---} \circ + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \{ \text{---} \circ \} + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \{ \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow \} \\ &+ \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \{ \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \text{---} \} + O(\lambda^3) \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

Sustituyamos en (3.2.7) la aproximación a primer orden en λ_0 para altos momentos. Lo que estamos haciendo entonces es introducir los efectos de los momentos altos en los momentos bajos. Esquemáticamente tenemos:

$$\begin{aligned} \Rightarrow_{\curvearrowright} &= \text{---} \circ + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \text{---} \circ + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow \\ &+ \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \overset{\circ}{\curvearrowright} \text{---} \circ + O(\lambda^3) \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Despreciando los términos $O(\lambda^3)$ vemos cómo se modifica el propagador G_0 . Al promediar la ecuación (3.2.10) sobre las F^{\curvearrowright} .

$$\begin{aligned} \langle \Rightarrow_{\curvearrowright} \rangle &\equiv \Rightarrow = \langle \text{---} \circ + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \text{---} \circ + \\ &+ \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow - \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \overset{\circ}{\curvearrowright} \text{---} \circ \rangle \\ &= \text{---} \circ + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow + \text{---} \overset{\circ}{\curvearrowright} \Rightarrow \end{aligned} \quad (3.2.11)$$

reescribiendo esta última expresión en términos de un nuevo propagador $G(\mathbf{k},\omega)$, que llamaremos propagador vestido y definido como

$$\text{---} \Rightarrow \equiv \text{---} \Rightarrow$$

la ecuación (3.2.11) nos queda

$$\overset{\circ}{\Rightarrow} = \Rightarrow + \Rightarrow \text{ (loop) } \Rightarrow$$

$$G(\mathbf{k}, \omega) = G_0 + G_0 \Sigma G(\mathbf{k}, \omega) \quad (3.2.12)$$

donde $\Sigma = \text{ (loop) }$ es usualmente denominada la autoenergía.

Despejando Σ de la ecuación (3.2.12) obtenemos

$$\Sigma = G_0^{-1} - G_0^{-1} = (i\omega + D_0 k^2) - (i\omega + D(\mathbf{k}, \omega) k^2) \quad (3.2.13)$$

$$= -\delta D = D(\mathbf{k}, \omega) - D_0 \quad (3.2.14)$$

Esta última expresión nos indica que Σ es la corrección al coeficiente de difusión D_0 (en la aproximación $O(\lambda^2)$), es decir, lo vestirá con las interacciones provenientes de la cáscara de altos momentos.

Corresponde, ahora, obtener la corrección a los vértices, para esto será necesario introducir la contribución de los momentos altos (3.2.8) hasta $O(\lambda_0^2)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \Rightarrow &= \cancel{\Rightarrow \Rightarrow} - \cancel{\Rightarrow \Rightarrow}^{\circ} + \cancel{\Rightarrow \Rightarrow}^{\circ} + \cancel{\Rightarrow \Rightarrow}^{\circ} + \cancel{\Rightarrow \Rightarrow}^{\circ} \\ &+ \cancel{\Rightarrow \Rightarrow}^{\circ} \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Sustituyendo en (3.2.7) y nuevamente promediando sobre las F^* tenemos

$$\langle \Rightarrow \Rightarrow \rangle = \left[\Rightarrow \Rightarrow \right]_D + \text{ (loop) } \Rightarrow \Rightarrow + \text{ (loop) } \Rightarrow \Rightarrow$$

$$+ \text{ (triangle) } + \text{ (triangle) } \quad (3.2.16)$$

donde el paréntesis $[]_D$ representa los términos que ya han sido tomados en cuenta para la corrección de D_0 , el último término de (3.2.16) contiene la primera corrección al vértice (último

término de la ec. (3.2.11)). Esto es,

$$(\lambda \delta \rho F) = \text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + O(\lambda^4)$$

factorizando

$$= \text{diagrama 1} \left[\bullet + \text{diagrama 2} \right] + O(\lambda^4) \quad (3.2.17)$$

Si hacemos el desarrollo hasta $O(\lambda^5)$ encontraremos diagramas que comparten las mismas características topológicas a la primera corrección de λ_0 . De esta manera el vertice se vera corregido, debido a las interacciones de la cascara, por los términos

$$O(\lambda^1) \quad O(\lambda^3) \quad O(\lambda^5)$$

$$\text{diagrama 1} = \text{diagrama 2} + \text{diagrama 3} + \text{diagrama 4} + \dots \quad (3.2.18)$$

El último diagrama que necesitamos obtener es el que corresponde a la corrección de la intensidad de correlación γ , para ello volvamos a la ecuación (3.2.1), y procedamos como lo hicimos para llegar a (3.2.5) en el caso lineal. Consideremos la función de correlación de $\delta \rho$ completa

$$\langle \delta \rho(\mathbf{k}, \omega) \delta \rho^*(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle$$

$$= \left\langle \left[\text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} \right] \left[\text{diagrama 3} + \text{diagrama 4} \right] \right\rangle \quad (3.2.19)$$

Al realizar el producto de los terminos no lineales y promediar no obtendremos alguna información concreta a menos que hagamos un desarrollo en serie de potencias del parámetro λ .

$$\langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle = \left\langle \left[\text{diagrama 1} + \text{diagrama 2} + \dots \right] \left[\text{diagrama 3} + \text{diagrama 4} + \dots \right] \right\rangle \quad (3.2.20)$$

Observemos primero que se ha tomado la solución completa para $\delta \rho(\mathbf{k}, \omega)$ y no se ha hecho una separación de altos y bajos momentos así que cuando hagamos el promedio para F' todas las F que

aparezcan deberán cumplir la condición de que se trata de una función con distribución gaussiana con media igual a cero. Observemos también que por cada término que aumentemos en la aproximación de $\delta\rho$ se traducirá en una corrección doble para la función de correlación $C_{\rho\rho}$, por ejemplo, si aproximamos a $\delta\rho$ a primer orden en λ obtenemos la función $C_{\rho\rho}$

$$\langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle_{1er.} = \langle | \rightarrow \circ + \rightarrow \circ \rangle \langle | \circ \leftarrow + \circ \leftarrow \rangle$$

$$= \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow \quad (3.2.21)$$

que es una aproximación hasta $O(\lambda^2)$.

Hagamos ahora la aproximación de $\delta\rho$ a segundo orden en λ , lo cual es aproximar a $C_{\rho\rho}$ a $O(\lambda^4)$:

$$\langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle_{2o} = \langle \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow$$

$$+ \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow$$

$$+ \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow$$

$$+ \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow \quad (3.2.22)$$

en este desarrollo vemos que existen términos de la forma \bullet . los cuales, como vimos, son términos que corrigen a G_0 . Reagrupemos de una manera más sugestiva

$$\langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle_{2o} = \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \bullet \leftarrow \quad (3.2.23)$$

en donde

$$\bullet = \circ + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \rightarrow \circ \leftarrow + \text{etc.}$$

En la aproximación que hemos tomado despreciaremos las segundas correcciones para γ , las cuales son de $O(\lambda^4)$ así que

$$\bullet = \circ + \text{Diagrama A} + \text{Diagrama B} \quad (3.2.24)$$

Hemos puesto los subíndices A y B en estos diagramas solo para dar identificarlos más adelante.

En resumen, las expresiones

$$\Sigma = \text{Diagrama} \quad (3.2.13)$$

$$\text{Diagrama} = \text{Diagrama} + \text{Diagrama} \quad (3.2.17)$$

$$\bullet = \circ + \text{Diagrama A} + \text{Diagrama B} \quad (3.2.24)$$

dan las primeras correcciones a los coeficientes desnudos $D_0, \gamma_0^t, \gamma_0^l, \lambda_0$ proporcionando los valores para $D_I, \gamma_I^t, \gamma_I^l$ y λ_I respectivamente, renormalizados por las interacciones no lineales provenientes de la cascara ($e^{-\eta\Delta, \Delta}$). Estas nuevas constantes les hemos puesto el subíndice I indicando que son valores intermedios pues para obtener el valor final requeriremos dar el segundo paso del método que consiste en rescalar. Evaluemos entonces las integrales que corrigen a nuestros coeficientes.

3.3. CALCULO DE LOS COEFICIENTES INTERMEDIOS

CALCULO DE D_1

Según la ecuación (3.2.11) la primera corrección al coeficiente de difusión D_0 es

$$\Sigma = \text{Diagrama} \quad (3.3.1)$$

este diagrama proviene del promedio en la parte de momentos altos en F, F^c :

$$\rightarrow \Sigma \rightarrow = \rightarrow \left\langle \frac{0}{2} \rightarrow \frac{0}{2} \right\rangle \rightarrow$$

que expresado explícitamente es

$$\begin{aligned} &= G_0(k, \omega) \left\langle (-i\lambda_0 k_i) \int F_1(q) G_0(k-q, \omega) \cdot (-i\lambda_0(k-q)_j) \int F_j(p) G_0(k-p-q, \omega) \right\rangle \\ &= G_0(k, \omega) \left[-\lambda_0^2 k_i \int_{qp} \langle F_1(q) F_j(p) \rangle (k-q)_j G_0(k-q, \omega) G_0(k-p-q, \omega) \right] \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

ya diagonal en la integral. \int significa, como se dijo, integración sobre la cáscara, es decir para los momentos o modos altos. Recordemos que el símbolo de la integral sobre q o p es

$$\int_p = (2\pi)^{-d} \int d^d p$$

y la función de correlación está dada, según (3.1.23-24), por

$$\langle F_1^t(q) F_j^t(p) \rangle = (2\pi)^d \Gamma_{1j}(q) \delta^d(p+q)$$

donde

$$\Gamma_{1j}(q) = \gamma_0^t q_i q_j / q^2 + \gamma_0^t (\delta_{1j} - q_i q_j / q^2) \quad (3.3.3)$$

Sustituyendo el valor de la correlación en la ecuación (3.3.2) obtenemos

$$\rightarrow \Sigma \rightarrow = G_0(k, \omega) \left[-\lambda_0^2 \int_q k_1 \Gamma_{11}(q) \cdot (k-q)_j G_0(k-q, \omega) \right] G_0(k, \omega)$$

"Amputemos" esta expresión, es decir, eliminemos los propagadores que se encuentran a cada lado del paréntesis cuadrado, pues no dependen de la variable interna de integración q .

$$\Sigma = \left[-\lambda_0^2 \int_q k_1 \Gamma_{11}(q) \cdot (k-q)_j G_0(k-q, \omega) \right]$$

Sustituyendo el valor de Γ (ec. 3.3.3) en esta expresión:

$$\begin{aligned} \Sigma &= -\lambda_0^2 \int_q k_1 \left(\gamma_0^t q_1 q_j / q^2 + \gamma_0^t (\delta_{1j} - q_1 q_j / q^2) \right) \cdot (k-q)_j G_0(k-q, \omega) \\ &= -\lambda_0^2 \cdot \left(1/d (\gamma_0^t - \gamma_0^t) \int_q k^2 [D_0(k-q)^2 - 1\omega]^{-1} + \right. \\ &\quad \left. - \gamma_0^t \int_q k \cdot q [D_0(k-q)^2 - 1\omega]^{-1} + \gamma_0^t \int_q k^2 [D_0(k-q)^2 - 1\omega]^{-1} \right) \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Resolver esta ecuación significará entonces obtener la corrección al coeficiente de difusión; para calcular estas tres integrales, tomemos en cuenta que la integración se realiza en la cáscara. Entonces, podemos suponer que $k \ll q$; además, estamos interesados en longitudes y tiempos largos ($k \rightarrow 0, \omega \rightarrow 0$), así que al tomar en cuenta esta aproximación, los valores de las integrales son (apéndice 4):

$$\int_q k^2 / (k-q)^2 \approx k^2 \int_q q^{-2} \quad (3.3.5)$$

y

$$\int_q k \cdot q / (k-q)^2 \approx 2(k^2/d) \int_q q^{-2} \quad (3.3.6)$$

con lo cual la corrección para el coeficiente de difusión "desnudo" D_0 es:

$$\Sigma = -\delta D \cdot k^2 = (\lambda_0^2 / D_0) \left\{ \gamma_0^t (1/d) - \gamma_0^t (d-1)/d \right\} \cdot k^2 \int_q q^{-2} \quad (3.3.7)$$

por lo que el coeficiente de difusión intermedio D_1 queda expresado como

$$D_1 = D_0 + [(d-1)/d] (\lambda_0^2 \gamma_0^t / D_0) \int_q q^{-2} - (1/d) (\lambda_0^2 \gamma_0^t / D_0) \int_q q^{-d} \quad (3.3.8)$$

Recordemos que los coeficientes intermedios son los que se obtienen al introducir en los momentos bajos, las interacciones provenientes de los momentos que se encuentran en la cascara.

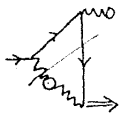
Antes de continuar con nuestro analisis veamos lo que sucede físicamente en el sistema a partir de esta ecuación. Note que las fluctuaciones transversales fomentan el mezclado (i.e., D aumenta) para $d > 1$, mientras que las fluctuaciones longitudinales ocasionan que D disminuya independientemente de la dimensión. Así como en turbulencia, las fluctuaciones transversales agitan al fluido, y favorece la difusión. En contraste, las fluctuaciones longitudinales tienden a disminuir la difusión, y esta disminución se puede explicar al considerar lo que sucede cuando un fluido compresible fluye dentro de un volumen restringido, por ejemplo en una red de tubos. Debido a que el fluido es compresible, su densidad aumentara produciendo el llamado "Traffic Jam" (embotellamiento). Como el fluido se estanca en el embotellamiento convectivo, el mezclado llega a ser menos eficiente y la constante de difusión se reduce. En resumen, la ecuación (3.3.5) nos muestra que la difusión total es el resultado de una competencia entre la difusión aumentada por la agitación y disminuida por el embotellamiento.

CALCULO DE λ_1

Para calcular la primera corrección al vértice λ_0 veamos como era el término original al cual introdujimos este parámetro (ec(3.1.11)) :

$$\rightarrow \overset{\circ}{\circ} \Rightarrow = -i \lambda_0 k_1 \int_q F_1(q) \delta \rho(k-q, \omega) \quad (3.3.9)$$

por otra parte, la expresión para la primera corrección de λ_0 (ec. (3.2.17)) es:



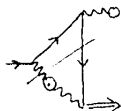
$$= -i\lambda_0 k_i \left\langle \int_p F_i(p) G_0(k-p, \omega) (-i\lambda_0(k-p))_j \int_q F_j(q) G(k-p-q, \omega) \cdot (-i\lambda_0(k-p-q))_k \int_r F_k(r) \delta\rho(k-p-q-r, \omega) \right\rangle \quad (3.3.10)$$

$$= -i\lambda_0 k_i \int_q \left[\int_j \int_r G_0(k-p, \omega) G_0(k-p-q, \omega) (-i\lambda_0)_j (k-p)_j \langle F_i(p) F_k(r) \rangle \cdot (k-p-q)_k (-i\lambda_0)_j \right] F_j(q) \delta\rho(k-p-q-r, \omega). \quad (3.3.11)$$

Si comparamos esta última expresión con la ecuación (3.3.9) lo que está dentro del paréntesis parece corresponder a la corrección de λ_0 , excepto porque se encuentra en el integrando. Al realizar la integral doble que se encuentra en el paréntesis con la aproximación $k \rightarrow 0$ y $\omega \rightarrow 0$, obtenemos:

$$\left[\right] \equiv [1/d] (\lambda_0^2 \gamma_0^2 / D_0^2) \delta(p+r) \delta_{ij} \int_p p^{-2} \quad (3.3.12)$$

y la ecuación (3.3.11) se convierte entonces en



$$= -1 \left[-[1/d] \lambda_0^3 \gamma_0^2 / D_0^2 \int_p p^{-2} \right] k_j \int_q F_j(q) \delta\rho(k-q, \omega) \quad (3.3.13)$$

Comparando con (3.3.9) se identifica la expresión para la corrección de λ_0 , que designaremos por $\delta\lambda$,

$$\delta\lambda = -[1/d] \lambda_0^3 \gamma_0^2 / D_0^2 \int_p p^{-2} \quad (3.3.14)$$

Si tomamos en cuenta que $\lambda_1 = \lambda_0 + \delta\lambda$ y que $\int_p p^{-2} = \int_q q^{-2}$, el vértice intermedio es

$$\lambda_1 = \lambda_0 - \lambda_0^3 \gamma_0^2 / D_0^2 \int_q q^{-2} \quad (3.3.15)$$

CALCULO DE γ_1

Por último, la corrección para el coeficiente que mide la intensidad de correlación de F viene dada en el diagrama (3.2.23). Sin embargo, así como lo hicimos para la obtención de $\delta\lambda$, recurramos ahora a la expresión lineal, que ya fué dada en las ecuaciones (3.2.5), con la cual podamos comparar.

$$C_{\rho\rho}(kk', \omega^2) = \langle \Rightarrow \Leftarrow \rangle$$

$$= G_0(k, \omega) (-i\rho_0 k_1 \delta(\omega)) \langle F_1(k) F_j(k') \rangle (-i\rho_0 k'_j \delta(\omega')) G_0(k', \omega')$$
(3.3.16)

y sustituyendo el valor de la correlación (ec.(3.3.3)):

$$= G_0(k, \omega) (-i\rho_0 \delta(\omega)) k_1 (2\pi)^d \delta(k+k') \left\{ (\gamma_0^\ell - \gamma_0^t) k_i k_j / k^2 + \gamma_0^t \delta_{ij} \right\} \cdot$$

$$\cdot k'_j (-i\rho_0 \delta(\omega')) G(k', \omega')$$
(3.3.17)

Ahora evaluemos la expresión (3.2.24A), la cual es la primera integral que corrige a γ_0

$$= G_0(k, \omega) \left\langle \left[-i\lambda_0 k_1 \int_q G_0((k-q), \omega) F_1(q) (k-q)_k F_k(k-q) \cdot \right. \right.$$

$$\cdot (-i\rho_0 \delta(\omega)) \left. \right] \left[-i\lambda_0 k'_j \int_p G_0(k'-p', \omega') F_j(p) (k'-p)_j \right.$$

$$\cdot F_1(k'-p) (-i\rho_0 \delta(\omega')) \left. \right] \rangle \cdot G_0(k', \omega')$$
(3.3.18)

Tomando en cuenta la aproximación $k \rightarrow 0$ y $\omega \rightarrow 0$, obtenemos

$$= G_0(k, \omega) (-i\rho_0 \delta(\omega)) (2\pi)^d \delta(k+k') k_1 \left(\alpha \right)$$

$$\cdot k'_j (-i\rho_0 \delta(\omega')) G_0(k', \omega').$$
(3.3.19)

donde

$$\left(\alpha \right) = [\lambda_0^2 / D_0] \left[(\gamma_0^\ell)^2 \delta_{ij} / d + \gamma_0^\ell \gamma_0^t \delta_{ij} (d-1) / d \right] \int_q q^{-2}$$

Análogamente, para la segunda integral (3.2.24B)

$$= G_0(k, \omega)(-i\rho_0\delta(\omega))(2\pi)^d \delta(k+k') k_1 \left[\beta \right] \cdot k'_j (-i\rho_0\delta(\omega')) G_0(k', \omega') \quad (3.3.20)$$

donde

$$\left[\beta \right] = [\lambda_0^2/D_0] \left[(\gamma_0^\ell)^2 \delta_{1j}/d \right] \int_q q^{-2}$$

De las ecuaciones (3.3.19) y (3.3.20) se sigue que la primera corrección para β es

$$= G_0(k, \omega)(-i\rho_0\delta(\omega)) k_1 (2\pi)^d \delta(k+k') \left\{ (\gamma_0^\ell - \gamma_0^t) k_1 k_j / k^2 + \gamma_0^t \delta_{1j} [\lambda_0^2/D_0] \left[\gamma_0^\ell \gamma_0^t \delta_{1j} (d-1)/d \right] \int_q q^{-2} \right\} \cdot k'_j (-i\rho_0\delta(\omega')) G_0(k', \omega') \quad (3.3.21)$$

Esta expresión podemos reagruparla como

$$= G_0(k, \omega)(-i\rho_0\delta(\omega)) k_1 (2\pi)^d \delta(k+k') \left\{ (\gamma_0^\ell - \gamma_0^t) k_1 k_j / k^2 + \left[\gamma_0^t + [\lambda_0^2/D_0] \gamma_0^\ell \gamma_0^t [(d-1)/d] \int_q q^{-2} \right] \delta_{1j} \right\} \cdot k'_j (-i\rho_0\delta(\omega')) G_0(k', \omega')$$

la cual al comparar con (3.3.17) término a término nos da

$$\gamma_1^t = \gamma_0^t + [\lambda_0^2/D_0] \gamma_0^\ell \gamma_0^t [(d-1)/d] \int_q q^{-2} \quad (3.3.22)$$

y

$$\gamma_1^\ell - \gamma_1^t = \gamma_0^\ell - \gamma_0^t \quad (3.3.23)$$

esto último resultado nos indica que aunque γ_0^t se corrija, la diferencia $\gamma_0^\ell - \gamma_0^t$ no lo hace. De estas dos últimas expresiones tenemos

$$\gamma_1^\ell = \gamma_0^\ell + [\lambda_0^2/D_0] \gamma_0^\ell \gamma_0^t [(d-1)/d] \int_q q^{-2} \quad (3.3.24)$$

Con esto finaliza la primera etapa, la renormalización, dándonos las relaciones entre las constantes desnudas $D_0, \gamma_0^i, \gamma_0^t, \lambda_0$ y las que se visten por los momentos eliminados de la cáscara: $D_1, \gamma_1^t, \gamma_1^i, \lambda_1$. Observemos que aunque hicimos un desarrollo en términos de λ_0 , las correcciones se generan proplamente en términos de Λ_t y Λ_i (obtenidos en el análisis dimensional), llamados los parametro verdaderos y definidos como (ec. (3.1.28)) $\Lambda_t^2 = \lambda_0^2 \gamma_0^t / D_0^2$ y $\Lambda_i^2 = \lambda_0^2 \gamma_0^i / D_0^2$.

En términos de los parametros verdaderos, el coeficiente de difusión intermedio se puede expresar como

$$D_1 = D_0 \left(1 + [(d-1)/d] \Lambda_t^2 \int_q q^{-2} - [1/d] \Lambda_i^2 \int_q q^{-2} \right) \quad (3.3.25)$$

la primera corrección del vertice como

$$\lambda_1 = \lambda_0 \left(1 - \Lambda_t^2 \int_q q^{-2} \right) \quad (3.3.26)$$

y las intensidades de las correlaciones fuerza-fuerza

$$\gamma_1^t = \gamma_0^t \left(1 + [(d-1)/d] \Lambda_t^2 \int_q q^{-2} \right) \quad (3.3.27)$$

$$\gamma_1^i = \gamma_0^i \left(1 + [(d-1)/d] \Lambda_i^2 \int_q q^{-2} \right) \quad (3.3.28)$$

Ahora bien, la integral sobre los momentos que se encuentran en la cáscara, $\int_q q^{-2}$, se puede evaluar descomponiendola en una integral angular y otra en la magnitud q confinada a la cáscara mencionada:

$$\int_q q^{-2} = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_{e^{\eta\Delta}}^{\Delta} \frac{q^{d-1}}{q^2} dq$$

donde S_d es la superficie de la hiperesfera en d dimensiones

$$\int_q q^{-2} = \{S_d / (2\pi)^d\} \Delta^{-(2-d)} (1 - e^{\eta(2-d)}) / (d-2) \quad (3.3.29)$$

podemos ver que depende del radio Δ de la cáscara (cuya medida está dada por η). Obsérvese que esta integral diverge logarítmicamente para $\eta \rightarrow \infty$ en $d=2$ y más lentamente en $d=1$.

Las correcciones estan dadas entonces en terminos del parámetro de interacción verdadero Λ , y del grosor de la celda.

3.4. RELACIONES DE RECURRENCIA

Para llevar a cabo el segundo paso del procedimiento del grupo de renormalización dinámico, reescalaremos las variables: por ejemplo, introduciremos un nuevo momento k' tal que $k' = |k'|$ cumple

$$k' = e^{\eta} k \quad (3.4.1)$$

donde la vieja k está definida en el intervalo $(0, e^{-\eta} \Delta)$ de manera que el intervalo para los nuevos momentos k' sea $(0, \Delta)$. Esto lo mostramos en el siguiente esquema



Con este escalamiento estamos compensando los grados de libertad eliminados en el primer paso del procedimiento. Análogamente como se hizo para los momentos, las demás variables se reescalán como

$$\omega' = e^{\alpha(\eta)} \omega \quad (3.4.2)$$

y

$$\delta\rho(k, \omega) = L(\eta) \delta\rho(k', \omega') \quad (3.4.3)$$

donde $L(\eta)$ y $\alpha(\eta)$ son funciones a determinar. Con estas definiciones el efecto estocástico del medio y el propagador se deberán reescalar como (ver apéndice 5):

$$F'(k') = e^{2\alpha - \eta} F^1(k) / L(\eta) \quad (3.4.4)$$

$$G'(k', \omega) = e^{-\alpha} G^1(k, \omega) \quad (3.4.5)$$

De la misma manera los coeficientes intermedios se deberán reescalar como

$$D' = D^1 e^{1 - 2\eta} \quad (3.4.6)$$

$$\gamma' = \gamma^1 e^{4\alpha - 2\eta + \eta d} / L^2(\eta) \quad (3.4.7)$$

$$\lambda' = \lambda^1 e^{-\alpha - \eta d} L(\eta) \quad (3.4.8)$$

De la ecuación (3.4.3) vemos que la función $L(\eta)$ es tal que $L(\eta) \rightarrow 1$ cuando $\eta \rightarrow 0$, además, $L(\eta) \neq 0$ para que no diverjan las ecuaciones (3.4.4) y (3.4.7). Para escoger una función $L(\eta)$ apropiada consideremos la condición (3.3.23) la cual nos muestra que la diferencia ($\gamma^l - \gamma^t$) no se renormaliza así que impongamos la condición de que tampoco se escale, con esto

$$L(\eta) = \exp(2a - (2-d)\eta/2) \quad (3.4.8)$$

Las variables escaladas (ecs. (3.4.4-8)), están definidas en el mismo intervalo de momentos y frecuencias que las variables desnudas $\{D_0, \lambda_0, \gamma_0^l, \gamma_0^t\}$, esto hace posible comparar los dos conjuntos al llevar a cabo el procedimiento repetidas veces. Debido a que el grupo de renormalización puede ser iterado, es conveniente reemplazar a η por un parámetro infinitesimal $\delta\eta$, que al hacerlo tender a cero nos permitirá obtener relaciones de recurrencia diferenciales. Estas relaciones nos indican como van evolucionando los parámetros $\{D, \lambda, \gamma^l, \gamma^t\}$ al ir introduciendo los efectos que producen los momentos de la cáscara infinitesimal $(\Delta e^{-\delta\eta}, \Delta)$ (por lo que los designaremos como $D(\eta)$ etc.), a partir de un conjunto de parámetro iniciales $\{D_0, \lambda_0, \gamma_0^l, \gamma_0^t\}$.

Los valores $D(\eta)$, $\lambda(\eta)$, $\gamma^l(\eta)$ y $\gamma^t(\eta)$ son entonces obtenidos al integrar estas ecuaciones diferenciales. Debemos recalcar que lo que se analiza no es la evolución del sistema cuando transcurre el tiempo, la evolución significa que a cada iteración el sistema tiene un conjunto distinto de parámetros (ver figs. 3.5-6).

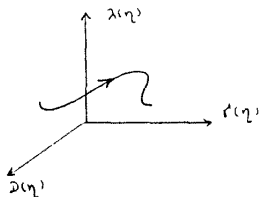


fig. 3.5 Espacio de parametros

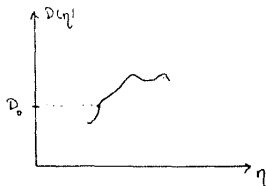


fig. 3.6 Evolución de D al irle introduciendo los efectos de los momentos que se encuentran en la cáscara infinitesimal.

Obtengamos ahora las relaciones de recurrencia a partir de la definición de derivada. Para el coeficiente de difusión

$$\frac{dD(\eta)}{d\eta} \equiv \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{D(\eta+\delta\eta) - D(\eta)}{\delta\eta}$$

Puesto que $D(\eta + \delta\eta)$ representa el valor del coeficiente de difusión cuando ya se le han introducido las interacciones de la cáscara entonces $D(\eta + \delta\eta) = D'$, y tomando en cuenta que un posible valor inicial es $D(\eta) = D_0$:

$$\frac{dD(\eta)}{d\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{D'(\eta) - D(\eta)}{\delta\eta}$$

de la expresión (3.4.5):

$$\frac{dD(\eta)}{d\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{D_1(\delta\eta) e^{\alpha(\delta\eta) - 2\delta\eta} - D(\eta)}{\delta\eta}$$

Esta última expresión contiene los dos pasos del GRD, renormalización y escalamiento. Al sustituir el valor de D_1 dado por (3.3.25) tenemos

$$= \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta\eta} \left\{ e^{\alpha(\delta\eta) - 2\delta\eta} D(\eta) \left[1 + \left(\frac{d-1}{d} \Lambda_\ell^2 - \frac{1}{d} \Lambda_t^2 \right) \frac{\Lambda_d}{d-2} \left(e^{(d-2)\delta\eta} - 1 \right) \right] - D(\eta) \right\}$$

y aproximando las exponenciales hasta primer orden en $\delta\eta$:

$$dD(\eta)/d\eta = D(\eta) \left(z(\eta) - 2 + \Lambda_d \left[(d-1)/d \right] \Lambda_\ell^2(\eta) - \Lambda_t^2/d \right), \quad (3.4.9)$$

donde $z(\eta) = \int_0^\eta \alpha(\eta') d\eta'$ es una función no determinada hasta ahora.

De forma análoga, para las intensidades de correlación γ^ℓ y γ^t las relaciones de recurrencia se pueden obtener como

$$\frac{d\gamma^\ell(\eta)}{d\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{\gamma^\ell(\eta+\delta\eta) - \gamma^\ell(\eta)}{\delta\eta}$$

$$\frac{dz^{\ell}(\eta)}{d\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{z^{\ell}(\eta) - z^{\ell}(\eta - \delta\eta)}{\delta\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{z_1^{\ell}(\eta) - z_1^{\ell}(\eta - \delta\eta)}{\delta\eta}$$

sustituyendo el valor de z_1 dado por (3.3.27)

$$\begin{aligned} &= z^{\ell}(\eta) \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta\eta} \left\{ 1 + \frac{(d-1)}{d} \Lambda_t^2 \frac{A_d}{(2-d)} (e^{(2-d)\delta\eta} - 1) \right\} \\ &= z^{\ell}(\eta) \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta\eta} \left\{ \frac{(d-1)}{d} \Lambda_t^2 \frac{A_d}{(2-d)} (2-d)\delta\eta \right\} \end{aligned}$$

$$\frac{dz^{\ell}(\eta)}{d\eta} = z^{\ell}(\eta) \frac{(d-1)}{d} \Lambda_t^2 \quad (3.4.10)$$

De la misma manera

$$\frac{dz^t(\eta)}{d\eta} = z^t(\eta) \frac{(d-1)}{d} \Lambda_d \Lambda_t^2 \quad (3.4.11)$$

y por último, la relación para el vértice λ :

$$\frac{d\lambda(\eta)}{d\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{\lambda(\eta + \delta\eta) - \lambda(\eta)}{\delta\eta}$$

usando que $\lambda' = \lambda_1 e^{\alpha(\eta) - \eta(d+2)/2}$, donde λ_1 esta dada por (3.3.26) tenemos

$$\frac{d\lambda(\eta)}{d\eta} = \lim_{\delta\eta \rightarrow 0} \frac{\lambda(\eta)}{\delta\eta} \left\{ \left(1 - \Lambda_t^2 \frac{1}{d} \frac{A_d}{(2-d)} (e^{(2-d)\delta\eta} - 1) \right) e^{\alpha(\delta\eta) - \delta\eta(d+2)/2} - 1 \right\}$$

tomando la aproximación hasta $O(\delta\eta^1)$ en las exponenciales y reduciendo obtenemos

$$d\lambda(\eta)/d\eta = \lambda(\eta) \left\{ z(\eta) - (d+2)/d - (A_d/d) \Lambda_t^2(\eta) \right\} \quad (3.4.12)$$

Para obtener las relaciones de recurrencia del verdadero parámetro de acoplamiento Λ , partamos de su definición.

$$\Lambda_{\ell,t} = \lambda_0 (z^{\ell,t})^{1/2} / D_0$$

asi que

$$\ln \Lambda_{f, \tau} = \ln \lambda_c + \frac{1}{z} \ln z^{\ell, \ell} - \ln D_c$$

entonces

$$\frac{1}{\Lambda} \frac{\delta \Lambda}{\delta \eta} = \frac{1}{\lambda} \frac{\delta \lambda}{\delta \eta} + \frac{1}{2z} \frac{\delta z}{\delta \eta} - \frac{1}{D} \frac{\delta D}{\delta \eta}$$

Sustituyendo las ecuaciones (3.4.9-12) obtenemos para la componente longitudinal

$$d\Lambda_f(\eta)/d\eta = -\Lambda_f(\eta) \left[-(2-d)/2 + A_d [(d-1)/2d] \Lambda_f^2 \right] \quad (3.4.13)$$

y para la transversal

$$d\Lambda_t(\eta)/d\eta = \Lambda_t(\eta) \left[(2-d)/2 - A_d [(d-1)/2d] (2\Lambda_t^2 - \Lambda_f^2) \right] \quad (3.4.14)$$

donde

$$A_d = \bar{S}_d \bar{\Delta}^{d-2} / (2\pi)^d \quad (3.4.15)$$

Observamos que la evolución de los coeficientes $\{D, \lambda, z^{\ell, \ell}\}$ en función de η (ecs. (3.4.9-12)), dependen de los verdaderos parámetros de acoplamiento Λ_f, Λ_t . Veamos entonces cuál es el comportamiento de estos a partir de las ecuaciones (3.4.13-14).

COMPORTAMIENTO ASINTOTICO DE LOS PARAMETROS Λ_f y Λ_t .

Las expresiones para Λ_f y Λ_t que satisfacen las ecuaciones (3.4.14-15) no tiene una forma manejable (ver apéndice 6) por lo que sera necesario tomar una aproximación adecuada. La aproximación que tomaremos consistira en suponer que el parámetro η es muy grande, recordemos que η nos mide la cantidad de grados de libertad eliminados, así que η grande significa que trabajamos con pocos grados de libertad. Para resolver la ecuacion (3.4.13), al menos formalmente, proponemos una solución

$$\Lambda_f(\eta) = B(\eta) e^{\epsilon\eta/2}, \quad \epsilon = 2-d \quad (3.4.16)$$

Notemos que $\Lambda_f(0)=B(0)$. Sustituyendo en (3.4.13) obtenemos

$$B(\eta) = \Lambda_{\xi}(0) \exp(-a_d/2) \int_0^{\eta} \Lambda_{\xi}^2(\eta') d\eta' \quad (3.4.17)$$

donde $a_d = \frac{d-1}{d} A_d$; por lo que

$$\Lambda_{\xi}(\eta) = \Lambda_{\xi}(0) \exp(\epsilon\eta/2 - (a_d/2) \int_0^{\eta} \Lambda_{\xi}^2(\eta') d\eta') \quad (3.4.18)$$

sustituyendo en (3.4.14) obtenemos

$$d\Lambda_{\xi}(\eta)/d\eta = \epsilon\Lambda_{\xi}(\eta)/2 - a_d\Lambda_{\xi}^3(\eta) + \psi[\epsilon, \Lambda_{\xi}(\eta)] \quad (3.4.19)$$

con

$$\psi[\epsilon, \Lambda_{\xi}(\eta)] = a_d\Lambda_{\xi}^2(0)\Lambda_{\xi}(\eta) \exp(\epsilon\eta - a_d \int_0^{\eta} \Lambda_{\xi}^2(\eta') d\eta') \quad (3.4.20)$$

Notemos que el integrando de la última expresión es siempre positivo así que para η grande al tomar el límite $\eta \rightarrow \infty$

$$\psi[\epsilon, \Lambda_{\xi}(\eta)] \rightarrow 0 \quad (3.4.21)$$

De la misma manera $\Lambda_{\xi} \rightarrow 0$ para $\eta \rightarrow \infty$.

Bajo esta aproximación la expresión (3.4.19) se convierte en

$$d\Lambda_{\xi}(\eta)/d\eta = \epsilon\Lambda_{\xi}(\eta)/2 - a_d\Lambda_{\xi}^3(\eta) \quad (3.4.22)$$

y la ecuación (3.4.13) en

$$d\Lambda_{\xi}(\eta)/d\eta = 0, \quad (3.4.23)$$

ya que la contribución de Λ_{ξ} la hemos tomado como despreciable. Veamos ahora como es el comportamiento solo de Λ_{ξ} . Proponemos, como anteriormente una solución

$$\Lambda_{\xi}(\eta) = C(\eta) e^{\epsilon\eta/2} \quad (3.4.24)$$

y sustituyendo en (3.4.22) obtenemos

$$dC(\eta)/d\eta = -a_d C^3(\eta) e^{\epsilon\eta} \quad (3.4.25)$$

Dividiendo entre C^3 , integrando y tomando en cuenta que $C(0) = \Lambda_{\xi}(0)$

$$C(\eta) = \Lambda_{\xi}(0) [1 + 2a_d \frac{e^{\epsilon\eta} - 1}{\epsilon} \Lambda_{\xi}^2(0)]^{-1/2} \quad (3.4.26)$$

y sustituyendo en (3.4.24)

$$\Lambda_t(\eta) = \Lambda_t(0)e^{\epsilon\eta/2} [1 + 2a_d \frac{e^{\epsilon\eta} - 1}{\epsilon} \Lambda_t^2(0)]^{-1/2} \quad (3.4.27)$$

Esta solución sólo es válida para η grande. Al tomar el límite $\eta \rightarrow \infty$ el comportamiento asintótico dependerá del parámetro ϵ , como se puede apreciar desde (3.4.27).

Para $\epsilon < 0$ (es decir, $d > 2$)

$$\Lambda_t(\eta) \rightarrow 0 \quad \text{si } \eta \rightarrow \infty \quad (3.4.28)$$

Para $\epsilon = 0$ ($d = 2$)

$$\Lambda_t(\eta) \rightarrow \Lambda_t(0) [1 + 2a_d \eta]^{-1/2} \quad (3.4.29)$$

es decir

$$\Lambda_t(\eta) \rightarrow 0 \text{ lentamente si } \eta \rightarrow \infty$$

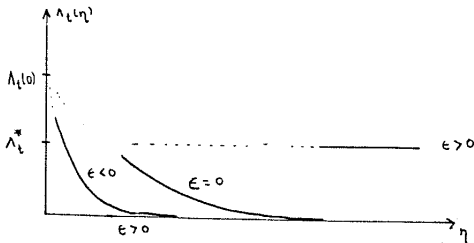
Para $\epsilon > 0$, las soluciones físicas que esperamos son aquellas donde $\Lambda_t(\eta)$ tienda a un valor constante, Λ_t^* , conforme $\eta \rightarrow \infty$. De la ecuación (3.4.22) esto implica dos soluciones

$$\Lambda_t(\eta) = 0 \quad (3.4.30)$$

$$\Lambda_t(\eta) = \sqrt{\epsilon/2a_d} \quad (3.4.31)$$

Se puede mostrar que este último punto, llamado punto fijo, es estable al sustituir $\Lambda_t(\eta) = \Lambda_t^* + \delta\Lambda_t$ en (3.4.22)

En resumen, el comportamiento asintótico de $\Lambda_t(\eta)$ para los diferentes casos se puede esquematizar como sigue



CALCULO DEL COEFICIENTE DE DIFUSION

Pasemos ahora a analizar el comportamiento del coeficiente de difusión renormalizado D . De la ecuación (3.4.6) la conexión entre D_I , el coeficiente de difusión intermedio o renormalizado, y D' , el coeficiente reescalado, es

$$D' = D^I e^{u-2\eta} \quad (3.4.32)$$

Impondremos la condición de que $D'(\eta)$ permanezca fijo en un valor dado D_0 . De la relación de recurrencia para D (ec (3.4.9)), esto implica que

$$z(\eta) = 2 - [A_d(d-1)/d] \Lambda_t^2(\eta) + [A_d/d] \Lambda_t^2 \quad (3.4.33)$$

pero de la aproximación dada anteriormente ($\Lambda_t=0$) haremos

$$z(\eta) = 2 - [A_d(d-1)/d] \Lambda_t^2(\eta) \quad (3.4.34)$$

Supongamos que de partida tenemos una densidad que depende de k y ω , es decir,

$$D_0 = D_R(k, \omega) \quad (3.4.35)$$

siguiendo el proceso del GR:

$$D_R(k, \omega; \Lambda_t) = e^{2\eta - \alpha(\eta)} D_R(k', \omega'; \Lambda_t) \quad (3.4.36)$$

Analicemos el comportamiento en las frecuencias (o en el tiempo) para $k=0$:

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = e^{2\eta - \alpha(\eta)} D_R(e^\eta k = 0, e^\alpha \omega; \Lambda_t) \quad (3.4.37)$$

y examinemos el comportamiento para η grande, η^* tal que

$$e^{\alpha(\eta^*)} \omega = 1 \quad (3.4.38)$$

que corresponde a frecuencias pequeñas (o tiempos largos). La ecuación (3.4.37) se convierte en

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = e^{2\eta - \alpha(\eta^*)} D_R(0, 1; \Lambda_t) \quad (3.4.39)$$

Para poder evaluar $e^{2\eta - \alpha(\eta^*)}$ será necesario obtener el valor

asintótico de α para η grande.

$$\alpha(\eta) = \int_0^\eta z(\eta') d\eta' = \int_0^\eta (2 - a_d \Lambda_t^2(\eta')) d\eta' \quad (3.4.40)$$

Caso I $\epsilon < 0$

Puesto que η es grande, el segundo termino del integrando dado en (3.4.40) es despreciable (ver el resultado obtenido en (3.4.28)) por lo que $\alpha(\eta)$ se puede aproximar como

$$\alpha(\eta) \cong 2\eta \quad (3.4.41)$$

y de la ecuación de recurrencia para Λ_t , ecuación (3.4.22)

$$\Lambda_t(\eta) \cong e^{c\eta/2} \quad (3.4.42)$$

Sustituyendo (3.4.41) en (3.4.38) obtenemos

$$e^\eta = \omega^{-1/2} \quad (3.4.43)$$

y de (3.4.42) y usando que $\epsilon = -|\epsilon|$

$$\Lambda_t(\eta) = \Lambda_t(0) \omega^{|\epsilon|/4} \quad (3.4.44)$$

ya que las frecuencias son pequeñas, los parámetros de acoplamiento se pueden hacer tan pequeños como se quieran y entonces la ecuación (3.4.39) se puede expresar como un desarrollo al rededor de $\Lambda_t(0)$:

$$\begin{aligned} D_R(0, \omega; \Lambda_t) &= D_R(0, 1; \Lambda_t(\eta)) = \Lambda_t(0) \omega^{|\epsilon|/4} \\ &= D_R(0, 1; \Lambda_t(0)) + \frac{\partial D_R}{\partial \Lambda_t^2} \frac{\partial \Lambda_t^2}{\partial \omega} \omega + \dots \end{aligned}$$

y de las ecuaciones (3.3.25) y (3.3.29) que expresan la relación entre D_R y Λ_t^2 tenemos

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = D - a'_d \gamma^t (1 - \omega^{|\epsilon|/2}) / 2D + \dots \quad (3.4.45)$$

donde hemos usado que $D = D_R(0, 1; \Lambda_t(0))$,

$$\Lambda_t^2 = \gamma^t / D^2 \quad (\text{ecuación (3.1.28) con } \lambda=1)$$

y

$$a'_d = \frac{S}{2\pi^d} \Delta^{-\epsilon} \frac{d-1}{d}$$

Si $\epsilon = -1$, es decir $d=3$,

$$a'_d = 4\Delta/3\pi^2$$

y

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = D - (\omega^{1/2} - \omega)(2\Delta/3\pi^2)\gamma^t/D \quad (3.4.46)$$

caso 11 $\epsilon = 0$

En este caso, contrariamente al anterior, no podemos desprestigiar el valor de $\Lambda_t(\eta)$, así que será necesario usar la expresión (3.4.27), que es la solución de Λ_t en la aproximación η grande, y sustituirla en (3.4.40).

$$\alpha(\eta) = \int_0^\eta (2 - a_d \Lambda_t^2(\eta')) d\eta'$$

ó

$$\alpha(\eta) - 2\eta = a_d \int_0^\eta \Lambda_t^2(\eta') d\eta' \quad (3.4.47)$$

sustituyendo (3.4.27) obtenemos

$$\alpha(\eta) - 2\eta = a_d \int_0^\eta \Lambda_t^2(0) e^{\epsilon\eta'} \left[1 + \gamma_a \frac{e^{\epsilon\eta'} - 1}{\epsilon} \Lambda_t^2(0) \right]^{-1} d\eta'$$

integrando y tomando la exponencial en ambos miembros:

$$e^{2\eta - \alpha} = \left[1 + \frac{2a_d}{\epsilon} \Lambda_t^2(0) (e^{\epsilon\eta} - 1) \right]^{1/2} \quad (3.4.48)$$

así que la expresión (3.4.37) es

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = \left[1 + \frac{1}{2\pi\epsilon} \Lambda_t^2(0) (e^{c\eta} - 1) \right]^{1/2} D_R(e^{\eta} k = 0, e^{\alpha} \omega; \Lambda_t) \quad (3.4.49)$$

donde hemos usado $a_d = 1/4\pi$ para $d=2$.

Considerando $k=0$, η grande tal que $e^{2\eta} \approx 1$ y $\Lambda_t \approx 0$ de manera que

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t \approx 0) = D_0 \quad (3.4.50)$$

entonces

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = D_0 \left[1 + \frac{1}{2\pi\epsilon} \Lambda_t^2(0) (e^{c\eta} - 1) \right]^{1/2} \quad (3.4.51)$$

y con $e^{\eta} = \omega^{-1/2}$

$$D_R(0, \omega; \Lambda_t) = D_0 \left[1 + \frac{1}{2\pi\epsilon} \Lambda_t^2(0) (\omega^{-\epsilon/2} - 1) \right]^{1/2} \quad (3.4.51)$$

Tomando el límite cuando $\epsilon \rightarrow 0$ desarrollamos $\omega^{-\epsilon/2}$ hasta primer orden obteniendo finalmente

$$D = (1/4) \left(D_0 \gamma_0^t / \pi \right)^{1/2} \ln |1/\omega| \quad (3.4.52)$$

Caso III $\epsilon > 0$

De la ecuación (3.4.31) vemos que para $\epsilon > 0$ se localiza un punto fijo en $\Lambda_t(\eta) = \sqrt{\epsilon/2a_d}$. Sustituyendo este valor en la ecuación (3.4.34) obtenemos

$$z^* = 2 - \epsilon/2 \quad (3.4.53)$$

y si consideramos, como en los casos anteriores, $e^{a(\eta)^*} \omega = 1$ con $k=0$, entonces

$$e^{\eta} = \omega^{(2-\epsilon/2)^{-1}} \quad (3.4.54)$$

Para $\epsilon \approx 0$ ($a_d \approx (4\pi)^{-1}$) la ecuación (3.4.48) sigue siendo válida y el coeficiente de difusión renormalizado está dado por

$$\begin{aligned} D_R(0, \omega; \Lambda_t) &= \left[1 + \frac{1}{2\pi\epsilon} \Lambda_t^2(0) (e^{c\eta} - 1) \right]^{1/2} D_R(e^{\eta} k = 0, e^{\alpha} \omega = 1; \Lambda_t = \sqrt{2\pi\epsilon}) \\ &= D_0 \left[1 + \frac{1}{2\pi\epsilon} \Lambda_t^2(0) (\omega^{2\epsilon/(4-\epsilon)} - 1) \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (3.4.55)$$

Aproximando como en el caso anterior obtenemos

$$D = (1/4) \left(D_0^2 \frac{L}{n} \right)^{1/2} \omega^{\epsilon/(4-\epsilon)} \ln |1/\omega| \quad (3.4.56)$$

CONCLUSIONES

En el presente trabajo hemos aplicado la técnica del grupo de renormalización para analizar el fenómeno de la difusión en un sólido amorfo en función de su dimensión.

Entre los principales resultados podemos resaltar los siguientes:

1.- La interacción del medio sobre las partículas que se difunden afecta a la difusión de dos maneras. La parte transversal de la interacción, que físicamente produce los movimientos de agitación de las partículas y cuya intensidad es proporcional a Λ_t , favorece la difusión, es decir, produce un aumento en el valor del coeficiente D. Contrariamente a la parte transversal, la parte longitudinal de la interacción, aquella que está en la dirección del flujo de partículas disminuye la difusión. Esto se puede entender como lo que ocurre en un fluido compresible cuando pasa a través de tuberías, la parte longitudinal produce un "embotellamiento" dificultando el paso del fluido y consecuentemente disminuyendo D.

2.- Las interacciones mencionadas Λ_t y Λ_l se anulan en dimensiones mayores a dos. Esto significa que la aleatoriedad en la estructura del medio amorfo es irrelevante y la ley de difusión no se modifica:

$$\langle r^2(t) \rangle = 2dDt$$

donde d es la dimensión y D es el coeficiente de difusión.

3.- Para un medio amorfo de dimensión igual a dos las correcciones (debido a la aleatoriedad en la estructura) al coeficiente de difusión D no se pueden calcular a través de un desarrollo perturbativo ya que aún los términos de esta aproximación divergen.

4.- Con el método del g.r.d. la corrección a la ley de difusión en el límite asintótico de tiempos largos y distancias grandes ($k=0, \omega=0$) viene dada por

$$\langle r^2 \rangle = K (1-t\omega)t$$

donde $K = (D\gamma^4/16\pi)^{1/2}$. Es decir, hay correcciones logarítmicas que producen un comportamiento subdifusivo. El coeficiente de difusión es entonces

$$D(t) = K(1-\ln t)/4$$

COMENTARIOS

La técnica del g.r.d. ha sido empleada en diversos campos de la física, por ejemplo en física de altas energías, en el estudio de la dinámica de los fenómenos críticos y en física del estado sólido.

Los resultados obtenidos para el coeficiente de difusión D están dados en términos del parámetro ϵ ($= 2-d$), el cual ha sido tomado como un parámetro continuo. Esto hace pensar que estos resultados podrían describir procesos de difusión en medios de dimensión no entera.

Con respecto a la validez de los resultados obtenidos lo único con lo que podemos comparar es con otros trabajos publicados [8,12,14] y creemos que son satisfactorios.

FUNCIONES DE CORRELACION

Cuando uno realiza experimentos con procesos dinámicos de muchas partículas, generalmente se emplea como prueba una fuerza externa que aleja al sistema ligeramente del equilibrio, se mide entonces la respuesta (lineal) dependiente del tiempo para esta fuerza.

Muchos métodos experimentales caen dentro de esta categoría, por ejemplo estudios de forma lineal de la electrónica, de espectroscopia infrarroja y Raman, estudios de atenuación acústica y muchos otros. En todos estos experimentos esta el comportamiento dinámico de fluctuaciones espontáneas al rededor del (presumiblemente bien conocido) estado de equilibrio.

La información de las fluctuaciones esta contenida en la matriz de densidad. Sin embargo, es menos lo se requiere. De acuerdo con la teoría de respuesta lineal, las fluctuaciones se pueden describir en términos de las funciones de correlación K , dependientes del tiempo, y estas se definen como productos de ciertas variables dinámicas $A_i(t_i), i=1,2,\dots,n$, las cuales son promediadas sobre un ensamble termico representado por $\langle \dots \rangle$. Para el caso $n=2$ tenemos por ejemplo

$$K_{AB}(s) = \langle A(t_1)B(t_2) \rangle = \langle A(t_1)B(t_1+s) \rangle$$

con $s = t_2 - t_1$.

Para el caso en que se trate de la misma variable la función es llamada función de Autocorrelación:

$$K(s) = \langle A(t)A(t+s) \rangle$$

o mas precisamente

$$K(s) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(t)A(t+s) dt$$

s puede ser positiva o negativa. Enfatizamos que el promedio temporal y el promedio del ensamble son tomados como procesos equivalentes. Por la definición vemos que $K(0) = \langle A^2(t) \rangle$ que es el valor cuadrático promedio del proceso estocástico.

Se pueden demostrar directamente las siguientes propiedades para las funciones de correlación:

1) $K(0) = \langle A^2(t) \rangle > 0$

- ii) Para $s \rightarrow \infty$, $K(s) = \langle A(t) \rangle \langle A(t+s) \rangle = 0$, si $\langle A(t) \rangle \neq 0$.
- iii) $|K(s)| \leq |K(0)|$
- iv) $K(s) = K(-s)$

La representación gráfica de una función de correlación K típica en función de s tiene la forma de la figura A.2.1.

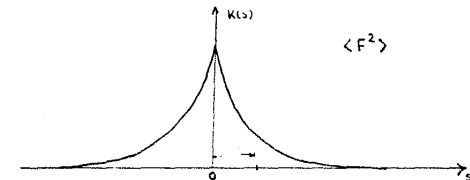


Fig.A.2.1 Función de correlación $K(s) = \langle A(t)A(t+s) \rangle$ de una función aleatoria $A(t)$.

En nuestro caso, los valores tomados por la variable $A(t)$ pierden su correlación en tiempos de orden τ^* , en consecuencia $K(s) \rightarrow 0$ cuando $s \gg \tau^*$. De este estudio podemos ver que la función de correlación contiene una cantidad de información apreciable con respecto a las propiedades estadísticas de la variable.

VOLUMEN Y AREA DE UNA ESFERA d-DIMENSIONAL.

DE RADIO R

Consideremos un espacio de dimensión d. En él la posición de un punto se denota por el vector r, con componentes rectangulares (x_1, x_2, \dots, x_d) . El elemento de volumen en este espacio deberá ser

$$dr = \prod_{i=1}^n (dx_i)$$

y el volumen de una esfera de radio R deberá estar dado por

$$V_d(R) = \int_{0 \leq \sum_{i=1}^n x_i^2 \leq R^2} \prod_{i=1}^n (dx_i)$$

Obviamente V_d será proporcional a R^d , así que podemos escribir

$$V_d(R) = C_d R^d \tag{1}$$

donde C_d es una constante que solo depende de la dimensionalidad de el espacio. Claramente el elemento de volumen dV_d se puede escribir como

$$dV_d \equiv S_d(R) dR = d \cdot C_d \cdot R^{d-1} dR \tag{2}$$

donde $S_d(R)$ denota el área de la superficie.

Para evaluar C_d , usemos que $\int \exp[-x^2] dx = \pi^{1/2}$; multiplicando d de tales integrales, una para cada variable x_i , obtenemos

$$\begin{aligned} \pi^{d/2} &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-\sum_{i=1}^d x_i^2] \prod_{i=1}^d (dx_i) \\ &= \int_0^{\infty} \exp[-R^2] d \cdot C_d R^{d-1} dR \\ &= d \cdot C_d \Gamma(d/2)/2 = (d/2)! C_d \end{aligned}$$

Aquí hemos usado la expresión (2) y la formula (Pathria, p. 490)

$$\int_0^{\infty} \exp[-ay^2] dy = \Gamma[(n+1)/2]/2a^{(n+1)/2}, \quad n > -1$$

entonces $C_d = \pi^{d/2}/(d/2)!$

se sigue entonces que $V_n(R) = \left[\frac{\pi^{n/2}}{(n/2)!} \right] R^n$ es el volumen buscado.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

calculemos ahora la siguiente integral

$$\int_0^{\Delta} \frac{dq}{q^2}$$

donde dq es la diferencial de volumen en d dimensiones.

Si se tiene simetría esférica entonces podemos hacer

$$dq = d \cdot C_d q^{d-1} dq$$

si definimos a S_d como la hipersuperficie de una esfera en d dimensiones,

$$\begin{aligned} S_d &= C_d d = \pi^{d/2} d / (d/2)! \\ &= 2\pi^{d/2} / \Gamma(d/2) \end{aligned} \quad (3)$$

entonces

$$\begin{aligned} \int_0^{\Delta} \frac{dq}{q^2} &= S_d \int_0^{\Delta} \frac{q^{d-1}}{q^2} dq = S_d \int_0^{\Delta} q^{d-3} dq \\ &= S_d \frac{\Delta^{d-2}}{d-2} \end{aligned} \quad (4)$$

donde S_d está dado por (3).

1.- Comprobar que para $k \ll q$ se cumple

$$A) \quad \int_q \frac{k^2}{(k-q)^2} = k^2 \int_q \frac{1}{q^2}$$

$$\begin{aligned} \int_q \frac{k^2}{(k-q)^2} &= \int_q \frac{k^2}{q^2 + k^2 - 2k \cdot q} \\ &= k^2 \int_q \frac{1}{q^2} \left(1 + 2 \frac{k \cdot q}{q^2} - \frac{k^2}{q^2} + \dots \right) = k^2 \int_q \frac{1}{q^2} + O(k^3) \\ &= k^2 \int_q \frac{1}{q^2} \end{aligned}$$

$$B) \quad \int_q \frac{k \cdot q}{(k-q)^2} = 2k^2 \int_q q^{-2}$$

$$\begin{aligned} \int_q \frac{k \cdot q}{(k-q)^2} &= \int_q \frac{k \cdot q}{q^2} \left(1 + 2 \frac{k \cdot q}{q^2} - \frac{k^2}{q^2} + \dots \right) \\ &= k \cdot \int_q \frac{q}{q^2} + 2k^2 \int_q \frac{q \cdot q}{q^4} + O(k^3) \end{aligned}$$

en el primer término el integrando es impar por lo que la integral se anula, en el segundo término usamos

$$q_1 q_1 = \delta_{1j} q^2/d$$

y aproximando hasta $O(k^2)$ tenemos finalmente

$$\int_q \frac{k \cdot q}{(k-q)^2} = 2k^2 \int_q q^{-2}$$

ECUACIONES DE RECURRENCIA

El segundo paso del método GRD consiste en reescalar el espacio k, ω ; para ello se dan las tres siguientes definiciones (ecuaciones (3.3.26-28)):

$$\delta\rho(k, \omega) = L(\eta)\delta\rho(k', \omega') \quad (1)$$

$$k' = e^{\eta}k \quad (2)$$

$$\omega' = e^{\alpha(\eta)}\omega \quad (3)$$

a partir de esto el propagador libre G_0 definido en (3.1.11) se reescala como

$$G_0(k, \omega) \equiv (-i\omega + D_0 k^2)^{-1} = \left[-i\omega' / e^{\alpha(\eta)} + D_0 k'^2 / e^{2\eta} \right]^{-1}$$

$$= e^{\alpha(\eta)} \left[-i\omega' + (D_0 e^{\alpha(\eta) - 2\eta}) k'^2 \right]^{-1}$$

si

$$D'_0 = D_0 e^{\alpha(\eta) - 2\eta} \quad (4)$$

y

$$G_0(k', \omega') = (-i\omega' + D'_0 k'^2)^{-1} \quad (5)$$

entonces

$$G_0(k', \omega') = e^{-\alpha(\eta)} G_0(k, \omega) \quad (6)$$

Para obtener el reescalamiento de F analicemos el primer término de la ecuación (3.1.10) en donde F aparece desacoplada con $\delta\rho(k, \omega)$:

$$\delta\rho_0(k, \omega) \equiv G_0(k, \omega) (-i\rho_0 \delta(\omega)k) \cdot F(k) = L(\eta)\delta\rho(k', \omega')$$

$$= L(\eta) \left[G_0(k', \omega') (-i\rho_0 \delta(\omega')k') \cdot F'(k') \right]$$

recordemos que $[\delta(\omega)] = 1/\omega$, entonces al usar esto y las ecuaciones (2), (3) y (6) obtenemos:

$$F'(k') = e^{2\alpha(\eta) - \eta} F(k) / L(\eta) \quad (7)$$

a partir de esto podemos obtener el reescalamiento de γ , de la ecuación (3.1.19):

$$\langle F_1(k_m) F_j(k_n) \rangle \equiv (2\pi)^d \gamma_{1j} P_{1j}(k) \delta(k_m + k_n)$$

$$= L(\eta) \langle F'_i(\mathbf{k}'_m) F'_j(\mathbf{k}'_n) \rangle / e^{4\alpha(\eta) - 2\eta}$$

a su vez $\langle F'_i(\mathbf{k}'_m) F'_j(\mathbf{k}'_n) \rangle = (2\pi)^d \gamma' P_{ij}(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k}'_m + \mathbf{k}'_n)$

con $[\delta(\mathbf{k}'_m + \mathbf{k}'_n)] = 1/k'^d$ sustituyendo y expresando γ' en función de γ :

$$\gamma' = \gamma e^{4\alpha(\eta) + \eta(d-2)} / L^2(\eta) \quad (8)$$

Para obtener el reescalamiento de λ_0 utilizamos el segundo término que aparece en (3.1.10)

$$[\delta\rho(\mathbf{k}, \omega)] = iG_0(\mathbf{k}, \omega) \lambda_0 \mathbf{k} \cdot \int_{\mathbf{q}} \mathbf{F}(\mathbf{k}) \delta\rho(\mathbf{k}-\mathbf{q}, \omega)$$

por otra parte, de la ecuación (1):

$$[\delta\rho(\mathbf{k}, \omega)] = L(\eta) [\delta\rho(\mathbf{k}', \omega')] = L(\eta) \left[iG_0(\mathbf{k}', \omega') \lambda'_0 \mathbf{k}' \cdot \int_{\mathbf{q}'} \mathbf{F}(\mathbf{k}') \delta\rho(\mathbf{k}'-\mathbf{q}', \omega') \right]$$

de esta ecuación y la anterior, tomando en cuenta que $\left[\int_{\mathbf{q}'} \right] = k'^d$ y sustituyendo los valores para G , k , F y $\delta\rho$ obtenidos de las ecuaciones anteriores (Ecs.6,2,7,y 1 respectivamente) tenemos:

$$\lambda'_0 = \lambda_0 e^{-\alpha(\eta) - \eta d} L(\eta) \quad (9)$$

La función $L(\eta)$ la escogeremos de modo que la diferencia $\gamma^{\ell} - \gamma^t$ no se reescale, por lo tanto, al usar la ecuación (8):

$$L(\eta) = e^{2\alpha(\eta) - (d-2)\eta/2} \quad (10)$$

APENDICE 6

ANÁLISIS DE LAS ECUACIONES DE RECURRENCIA PARA Λ_f Y Λ_t

El problema central, después de haber hecho el procedimiento del GRD consiste en obtener los valores de Λ_f y Λ_t , ya que con ellos podremos entonces calcular las correcciones para el coeficiente de difusión. Este problema es bastante complicado ya que deberemos resolver el par de ecuaciones diferenciales acopladas (ecs. (3.4.13-14)) dadas como

$$d\Lambda_f(\eta)/d\eta = -\Lambda_f(\eta) \left[-(2-d)/2 + \Lambda_d \{ (d-1)/2d \} \Lambda_t^2 \right] \quad (\text{A.6.1})$$

y

$$d\Lambda_t(\eta)/d\eta = \Lambda_t(\eta) \left[(2-d)/2 - \Lambda_d \{ (d-1)/2d \} (2\Lambda_t^2 - \Lambda_f^2) \right] \quad (\text{A.6.2})$$

donde

$$\Lambda_d = S_d \Delta^{d-1} / (2\pi)^d \quad (\text{A.6.3})$$

ANÁLISIS LINEAL

Redefinamos coeficientes y variables con el fin de simplificar las expresiones para las Λ 's; si

$$b = (2-d)/2, \quad a = \Lambda_d (d-1)/2d \quad (\text{A.6.4})$$

y

$$X = \Lambda_f(\eta), \quad Y = \Lambda_t(\eta)$$

entonces las expresiones (A.6.1-2) se transforman respectivamente en

$$X' = X (b - aY^2) \quad (\text{A.6.5})$$

$$Y' = Y (b - 2aY^2 + aX^2) \quad (\text{A.6.6})$$

Tenemos entonces un par de ecuaciones diferenciales no lineales acopladas. La solución analítica suele ser difícil de obtener, sin embargo, no estamos interesados en la solución exacta tanto como en el comportamiento asintótico $\eta \rightarrow \infty$. Nuestra búsqueda entonces consiste primero en obtener los puntos fijos y de ellos

analizar solo los que son estables. El valor de Λ para el cual la sucesión no evoluciona más, es decir, que permanece independientemente de cuantas veces se repita la transformación le llamamos punto fijo y lo designaremos por Λ^* , en estos puntos es en donde la transformación del grupo de renormalización deja inalteradas todas las propiedades esenciales del sistema.

Si tenemos en general un par de ecuaciones

$$X' = f(X, Y)$$

$$Y' = g(X, Y)$$

donde f y g son no lineales en general, hallar los puntos fijos significa obtener los valores X_0, Y_0 para los cuales el flujo de fase es estacionario, es decir, aquellos para los cuales $X'=Y'=0$, o lo que es lo mismo

$$f(X_0, Y_0) = 0$$

$$g(X_0, Y_0) = 0$$

En los puntos fijos, las ecuaciones (A.6.7-8) cumplen

$$X \{b - a Y^2\} = 0 \quad (\text{A.6.7})$$

$$Y \{b - 2aY^2 + aX^2\} = 0 \quad (\text{A.6.8})$$

las soluciones de (A.6.7) son

$$X = 0 \quad \text{o} \quad Y = \pm \sqrt{b/a}$$

y las de (A.6.8)

$$Y = 0 \quad \text{o} \quad \frac{2a}{b} Y^2 - \frac{a}{b} X^2 = 1$$

Puesto que se deben cumplir simultaneamente (A.6.7-8) los puntos fijos (X_0, Y_0) son

Para $d < 2$

$$\begin{aligned} (X_0, Y_0) &= (0, \pm \sqrt{2\pi\epsilon}) \\ &= (\pm\sqrt{4\pi\epsilon}, \pm\sqrt{4\pi\epsilon}), \\ &= (0, 0) \end{aligned}$$

Para $d = 2$

en este caso $b = 0$ en las ecuaciones (A.6.7-8) y el único punto fijo es

$$(X_0, Y_0) = (0, 0)$$

Para $d > 2$

$$(X_0, Y_0) = (0, 0)$$

Habiendo identificado los puntos fijos, su estabilidad se puede determinar examinando la evolución de pequeños desplazamientos $(\delta X, \delta Y)$ alrededor del punto (X_0, Y_0) . Los puntos fijos estables encontrados son

$(0, 0)$ estable solo para $d = 2$

(Λ_t, Λ_t)

$(0, \pm\sqrt{2\pi\epsilon})$ estables para $d < 2$

SOLUCION GENERAL

La solución general analítica la obtenemos procediendo de manera semejante como lo hicimos a partir de la ec. (3.4.16) pero sin tomar la aproximación dada en (3.4.21) teniéndose entonces

$$\Lambda_f(\eta) = \Lambda_f(0) \exp\left\{ \epsilon \eta / 2 - (a_d / 2) \int_0^\eta \Lambda_t^2(\eta') d\eta' \right\}$$

(A.6.9)

$$\Lambda_t(\eta) = \exp\left\{ \int_0^\eta \phi(\epsilon, \eta') d\eta' \right\} \left[\Lambda_t^{-2}(0) + 2a_d \int_0^\eta \exp\left\{ 2 \int_0^{\eta'} \phi(\epsilon, \eta'') d\eta'' \right\} d\eta' \right]^{-1/2}$$

(A.6.10)

donde $a_d = \frac{\Lambda_d(d-1)}{d}$
y

$$\phi(\epsilon, \eta) = \epsilon / 2 + (a_d / 2) \Lambda_t^2(0) \exp\left\{ \epsilon \eta - a_d \int_0^\eta \Lambda_t^2(\eta') d\eta' \right\}$$

(A.6.11)

dado que $\phi(\epsilon, \eta)$ no depende de $\Lambda_r(\eta)$, la expresión para Λ_t está desacoplada; sin embargo, como se puede ver en (A.6.10), la solución queda en términos de ella misma por lo que no podemos obtener una solución explícita. Es posible obtener una solución explícita aproximada usando las técnicas del análisis numérico, pero podemos obtener la información necesaria sin recurrir a ellas.

Analizando el comportamiento asintótico $\eta \rightarrow \infty$ para estas soluciones son

Para $\epsilon > 0$ ($d < 2$)

$$\Lambda_t(\eta) \rightarrow \frac{e^{\epsilon\eta/2}}{\sqrt{\Lambda_t^{-2}(0) + 2a_d e^{\epsilon\eta}/\epsilon}} \rightarrow \infty$$

$$\Lambda_f(\eta) \rightarrow \Lambda_f(0)e^{-3\epsilon\eta/4} \rightarrow 0$$

esto quiere decir que en $1 < d < 2$ el acoplamiento transversal juega un papel muy relevante mientras que Λ_f no.

Para $\epsilon = 0$

$$\Lambda_t(\eta) \rightarrow \left(\Lambda_t^{-2}(0) + 2a_d \eta \right)^{-1/2} \rightarrow 0$$

$$\Lambda_f(\eta) \rightarrow \Lambda_f(0)e^{\eta^{1/2}} \rightarrow 0$$

en este caso los parámetros de acoplamiento, principalmente Λ_t , decaen lentamente.

Para $\epsilon < 0$ ($d > 2$)

Λ_t y Λ_f tienden exponencialmente a cero.

BIBLIOGRAFIA

CAPITULO 1

- 1.- Zallen, Richard, "The physics of Amorphous Solids", John Wiley & Sons;1983.
- 2.- Elliot S.R. "Physics of amorphous materials", Longman Scientific & Technical, 1989.
- 3.- Ziman J.M. "models of disorder", Cambridge University press, 1979

CAPITULO 2

- 1.- Crank, "The mathematics of Diffusion", Oxford. Clarendon,1975.
- 2.- H. Risken, "The Fokker-Plank Equation". Springer Verlag
- 3.- R. Ghez, "A primer of diffusion problems" John Wiley & Sons;1988.
- 4.- A. Einstein, Ann. Physik 17(1905)549 y 19(1906)371.
- 5.- P. Langevin, Comptes Rendus 146(1908)549.
- 6.- Ulloa F. Sergio E., Tesis "El camino correlacionado" FCUNAM 1979.
- 7.- Este problema ha sido ampliamente tratado. Para un análisis más detallado ver F.Reif "Statistical and thermal physics", 2a.Edic. Mc. Graw-Hill. para un desarrollo más avanzado de este problema ver S. Chandrasekhar, "Stochastic problems in physics and astronomy", Rev.Mod.Phys,15,(1943)1.
- 8.- La deducción de esta formula puede verse en F. Reif de la referencia anterior, p 610.
- 9.- F. John, "Partial differential equations" 4a. Edic., Springer Verlag.

CAPITULO 3

- [1] Ver G.H. Weiss, J.Stat.Phys. 42, (1986)3, y sus referencias
- [2] Y.C. Zhang, Phys.Rev.L 56, (1986)20.
- [3] R. Tao, Phys.Rev.A 43, (1991)10.
- [4] Ya. G. Sinai, en: Proc. Berlin Conf. Math. Problems in Theor. Phys., Ed. R. Schrader and D.A. Ohlenbrock, Springer-Verlag, 1982 (p.12); Ya. G. Sinai, Theory Probability and its Appl. 27, (1982)247.

- [5] E. Marinari, G. Parisi, D. Ruelle, and Y. Windey, Phys. Rev. Lett. 50 (1983)1223.
- [6] S.Havlin, R.B. Selinger, M.Schwartz, H.E.Stanley and A. Bunde, Phys Rev. Lett.61. (1988)1436.
- [7] E. Koscielny-Bunde et al. Phys. Rev A 37, (1988)1821.
- [8] Dieter Forster, D.R. Nelson and M.J. Stephen, Phys. Rev A 16(1977) 732.
- [9] J.M. Luck, Nucl.Phys.B 225 (1983) 169.
- [10] D.S. Fisher, Phys. Rev.A 30 (1984) 960.
- [11] J.A. Aronovitz and D.R.Nelson, Phys.Rev.A 30 (1984) 1948.
- [12] D.S. Fisher, D. Friedan, Z. Qiu, S.J. Shenker and S.H. Shenker, Phys. Rev. A 31 (1985) 3841
- [13] V.E. Kravtsov, I.V. Lerner and V.J. Rudson, Phys. Lett. A 119 (1986) 203.
- [14] B. Derrida, J. of stat.phys. 31,3(1983)433.
- [15] H.W. Wyld, Jr. Annals of Phys.14 (1961)143.
- [16] V.K. Dugaev and K.D. Tovatyuk, phys. stat. sol.(b) 160(1990) 415.
- [17] J. Honkonen and E. Karjalainen, phys. Lett.A.124,5 (1988)333.
- [18] G. Carmona and M. Peña, Rev.Mex..de Fis. 38, supl.1(1992)212.