

21  
2EJ



**Universidad Nacional Autónoma  
de México**

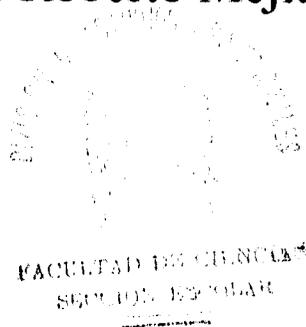
**Facultad de Ciencias**

**DIFUSION EN DOS DIMENSIONES CON  
DISPERSORES DUROS OSCILANTES**

**T E S I S**  
Que para obtener el Título de

**F I S I C O**

**p r e s e n t a**  
**Carlos Roberto Mejía Monasterio**



México D.F.

Agosto de 1995

FALLA DE ORIGEN

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

M. en C. Virginia Abrín Batule  
Jefe de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
P r e s e n t e

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: DIFUSION EN DOS DIMENSIONES  
CON DISPERSORES DUROS OSCILANTES

realizado por CARLOS ROBERTO MEJIA MONASTERIO

con número de cuenta 9052333-5 , pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis	DR. THOMAS HENRY SELIGMAN SCHURCH
Propietario	DR. RAMON PERALTA FABI
Propietario	DR. JORGE ANDRES FLORES VALDES
Suplente	DR. FRANCOIS ALLAIN LEYVRAZ WALTZ
Suplente	DR. CHRISTOFF JUNG

*T.H. Seligman Schurch*  
*J. Flores Valdes*  
*F. Allain Leyvraz Waltz*  
*Christoff Jung*

Consejo Departamental de Física

*[Signature]*  
DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA  
Coordinador de Licenciatura

**A mis Papás**

**Federico y Norma**

## Agradecimientos

Muchas veces en mi vida me he sentido afortunado. Ahora sé que mi mayor fortuna es tener conmigo a mis padres. Todo lo que soy ahora, lo que pienso y creo se los debo a ellos, al gran amor y apoyo que junto con mis hermanos siempre he recibido. Con mucho cariño les dedico este trabajo.

También dedico este trabajo a mis grandes hermanos Federico, Norma y Jorge quienes han sabido estar conmigo cuando los he necesitado... y también cuando no.

Extrañamente, aún cuando en este trabajo sólo se encuentra mi nombre en la portada, su elaboración requirió del trabajo y el esfuerzo de muchas personas a las cuales yo quisiera agradecer:

En primer lugar, me siento infinitamente agradecido por el gran apoyo y amistad que he recibido de mi profesor Thomas Seligman. El no sólo es mi asesor y director de tesis, sino también la mejor guía en mi carrera.

A mis sinodales:

Dr. Jorge A. Flores Valdés  
Dr. Christoff Jung  
Dr. Francois A. Leyvraz Waltz  
Dr. Ramón Peralta Fabi  
Dr. Thomas H. Seligman Schurch

por su trabajo en la revisión de esta tesis. Sus sugerencias han logrado que este trabajo parezca serio.

Al Dr. Jorge V. José por sus valiosos comentarios y sugerencias.

Junto con ellos, hubo muchas otras revisiones de Eloísa, Rafael, Lolo y Lalo que me ayudaron a decir lo que quería decir. Gracias.

A mis amigos y compañeros de trabajo Ana, Gaby, Arturo, Hugo y Rafael con quienes he compartido muchos momentos gratos y de valioso estudio.

A todos mis amigos de la universidad que han compartido su vida conmigo.

A Silvia, Tere y Juan por su grandísima amistad y cariño.

A todos mis familiares agradezco su apoyo.

A mi novia Eloísa por su inmenso amor y su gran capacidad para hacerme sentir bien. El haber coincidido contigo es la más maravillosa de las aventuras.

Y finalmente, quiero agradecer a mi universidad y a mi facultad, la Facultad de Ciencias, por todas sus enseñanzas y recuerdos que siempre llevaré conmigo.

# Tabla de Contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Estudio del modelo</b>	<b>5</b>
2.1	El sistema como mapeo . . . . .	5
2.2	Espacio fase . . . . .	9
2.3	Exponentes de Liapunov . . . . .	9
2.4	Función de auto-correlación de la velocidad . . . . .	11
2.5	Coefficiente de difusión . . . . .	12
2.6	El oscilador de Fermi . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Gas de Lorentz periódico</b>	<b>14</b>
3.1	Resultados anteriores . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Gas de Lorentz oscilante</b>	<b>18</b>
4.1	Dinámica de la colisión . . . . .	18
4.2	Simulaciones . . . . .	20
4.2.1	Espacio fase . . . . .	21
4.2.2	Función de auto-correlación de la velocidad . . . . .	21
4.2.3	Coefficiente de difusión . . . . .	22
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>23</b>
5.1	Espacio fase . . . . .	24
5.2	Función de auto-correlación de la velocidad . . . . .	32
5.3	Coefficiente de difusión . . . . .	36
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>51</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>53</b>

# Capítulo 1

## Introducción

En un metal, las propiedades de transporte se deben principalmente a sus electrones de valencia que se mueven libremente entre los núcleos atómicos que lo constituyen. Esto se debe al largo alcance de la fuerza de interacción de los electrones entre sí y de éstos con los núcleos atómicos, lo que provoca que los electrones sientan un potencial aproximadamente constante y asemejen su movimiento al de un gas de electrones.

Este movimiento libre de los electrones puede ser afectado por varias causas como por ejemplo la vibración de los núcleos atómicos metálicos o la introducción de impurezas en la estructura misma del metal. Como resultado de esto puede aparecer una difusión de electrones en el metal.

Uno de los modelos más simples para estudiar la difusión de electrones en metales causada por impurezas fue ideado en 1905 por H. A. Lorentz [1]. El modelo consiste en una partícula puntual que se mueve en un arreglo de discos duros de dimensión  $d$ , inmóviles, de masa infinita y dispuestos al azar, con los cuales la partícula choca elásticamente. Los discos duros ocupan el papel de impurezas, esto es, núcleos atómicos distintos a aquellos que constituyen al metal en cuestión.

Debido a su simplicidad, el modelo, conocido ahora como *gas de Lorentz*, ha recibido una gran atención. Con él se han obtenido y verificado un gran número de resultados generales, analíticos y numéricos, de propiedades termodinámicas y de transporte [2, 3]. Algunos de estos resultados se mencionan en la sección 2.1.

En el modelo que introducimos en esta tesis, que llamaremos *Gas de Lorentz Oscilante* GLO, los dispersores se encuentran regular y periódicamente distribuidos en el plano y oscilan periódicamente alrededor de su posición asignada.

Considerar a los dispersores periódicamente distribuidos es una simplificación del modelo original del gas de Lorentz, muy importante para los cálculos numéricos. Sin embargo, de acuerdo al teorema de Bloch [4], una partícula cuántica, como lo es un electrón en un metal, se mueve libremente en un potencial periódico, es decir, no se difunde. La difusión de electrones en una red periódica no tiene un análogo clásico.

La experiencia nos dice que para entender un sistema cuántico, es necesario entender su contraparte clásica. En este sentido, en esta tesis se propone al GLO como una contraparte clásica a la difusión de electrones en un metal.

Para una red periódica, las posiciones de los discos distan entre sí por una constante, por lo que no se necesita verificar si la partícula ha chocado con cada uno de los discos en el plano, sino solamente con aquel que se encuentre más cercano a la posición actual de la partícula. En el capítulo 4 se explicarán con más detalle los cálculos numéricos desarrollados. A este tipo de modelo en el cual los dispersores se encuentran periódicamente distribuidos en el plano se le conoce como *Gas de Lorentz Periódico* GLP. Nuestro modelo, GLO, contiene como caso particular al GLP cuando la oscilación de los discos es cero. En el capítulo 3 se describe con detalle el gas de Lorentz periódico.

Si el arreglo es regular un modelo como el GLP es un *billar de Sinai*. El billar de Sinai es un modelo que consiste en una partícula puntual que choca elásticamente con un disco duro. Sinai probó rigurosamente [5] que el billar de Sinai es un sistema  $K$ , lo que significa que hay gran sensibilidad a las condiciones iniciales del sistema. Dado que la gran sensibilidad a las condiciones iniciales se debe principalmente a la superficie convexa de los discos, se puede esperar que el GLP y el GLO presenten también las propiedades de un sistema  $K$ . Para corroborar esto en nuestro modelo, se calcula el más grande de los exponentes de Liapunov  $\sigma_1$ . La relación que  $\sigma_1$  guarda con las propiedades de un sistema  $K$  se discute en la sección 2.3.

Si el GLO, es un sistema  $K$ , entonces el distribuir regularmente a los discos

en el plano y no al azar, no cambiará la dinámica de las partículas y si influirá de gran manera en la obtención de los resultados numéricos.

Los discos en el gas de Lorentz toman el lugar de las impurezas en el metal. Al considerar los discos fijos, sin movimiento, se está suponiendo que las impurezas se encuentran frías, es decir, su temperatura es cero. Sin embargo, el movimiento de las impurezas o de los núcleos atómicos cambia la energía cinética de los electrones, lo cual influye de manera importante en el movimiento de éstos. Este cambio en la energía de los electrones puede no ser despreciable y dar lugar a una difusión adicional a la encontrada en el gas de Lorentz.

Nuestro modelo, el GLO, es entonces un modelo clásico para la difusión de electrones en un metal a temperatura  $T \neq 0$ .

En un metal, no son sólo las impurezas las que pueden inducir una difusión. La vibración de los núcleos atómicos debida a la energía térmica de éstos influye también en el movimiento de los electrones. El GLO, tiene la ventaja de que los discos oscilantes pueden simular a los núcleos atómicos que vibran debido a una temperatura distinta de cero. Así, el arreglo regular de los discos puede simular la disposición natural que los núcleos atómicos guardan en la estructura del metal.

Considerado como un billar, nuestro modelo puede ser estudiado, al menos cuando la oscilación de los discos es cero, como un mapeo discreto del cual se puede extraer la dinámica local de las partículas libres en términos de las funciones de dispersión. Al respecto se menciona en la sección 2.1 la existencia de caos topológico para un conjunto de más de dos discos. En la sección 2.2 se describe el espacio fase de nuestro sistema. En la sección 2.4 se define la función de auto-correlación de la velocidad y en la sección 2.5 la relación que ésta guarda con la dispersión en la posición de las partículas libres y con el coeficiente de difusión. Cuando la partícula se restringe a moverse en una dimensión con coordenada  $y = 0$  y momento  $p_y = 0$ , nuestro modelo reproduce el oscilador de Fermi [6]. En la sección 2.6 se analiza brevemente este sistema.

Los aspectos técnicos de las simulaciones desarrolladas se discuten en el capítulo 4 y los resultados de tales simulaciones se presentan en el capítulo 5. Finalmente, en el capítulo 6 se presentan las conclusiones pertinentes de este trabajo.

## Capítulo 2

### Estudio del modelo

Para estudiar la dinámica de un sistema es necesario describir su evolución temporal. Esto se puede hacer obteniendo directamente las ecuaciones de movimiento del sistema o una versión más sencilla de ellas como un mapeo discreto. En la sección 2.1 se describe el mapeo que induce un modelo como el GLP.

También se puede estudiar la estructura del espacio fase del sistema. Cuando el espacio fase es demasiado complejo (lo que es común en los sistemas caóticos), lo que resta es tratar de caracterizar globalmente la dinámica del sistema.

Para caracterizar a un sistema como caótico es útil estudiar los exponentes de Liapunov que miden la tasa promedio con la que dos trayectorias vecinas se separan. Los exponentes de Liapunov se definen en la sección 2.3 .

Para el estudio de la difusión en el GLO, se obtienen la función de autocorrelación de la velocidad, en la sección 2.4 y las dispersiones en la posición de las partículas  $\langle x^2 \rangle$  y  $\langle y^2 \rangle$ , en la sección 2.5.

#### 2.1 El sistema como mapeo

Consideremos por un momento que los dispersores se encuentran inmóviles como en el GLP y fijemos nuestra atención en sólo dos discos de radios  $R_1$  y  $R_2$  que llamaremos 1 y 2 en las coordenadas  $(X_1, 0)$  y  $(X_2, 0)$  respectivamente con  $X_1 < X_2$  y  $X_2 - X_1 > R_1 + R_2$ . Entre los discos choca elásticamente una partícula material

como se muestra en la *figura 2.1*. Nuestro objetivo es encontrar la dinámica de la partícula cerca de la trayectoria  $y = 0$ . Si la partícula tiene coordenadas  $(x, 0)$ , con  $x \in (X_1 + R_1, X_2 - R_2)$  y un momento sólo en la dirección  $x$ , la partícula chocará entre los discos para siempre. Tal trayectoria es por lo tanto periódica pero, como veremos, inestable.

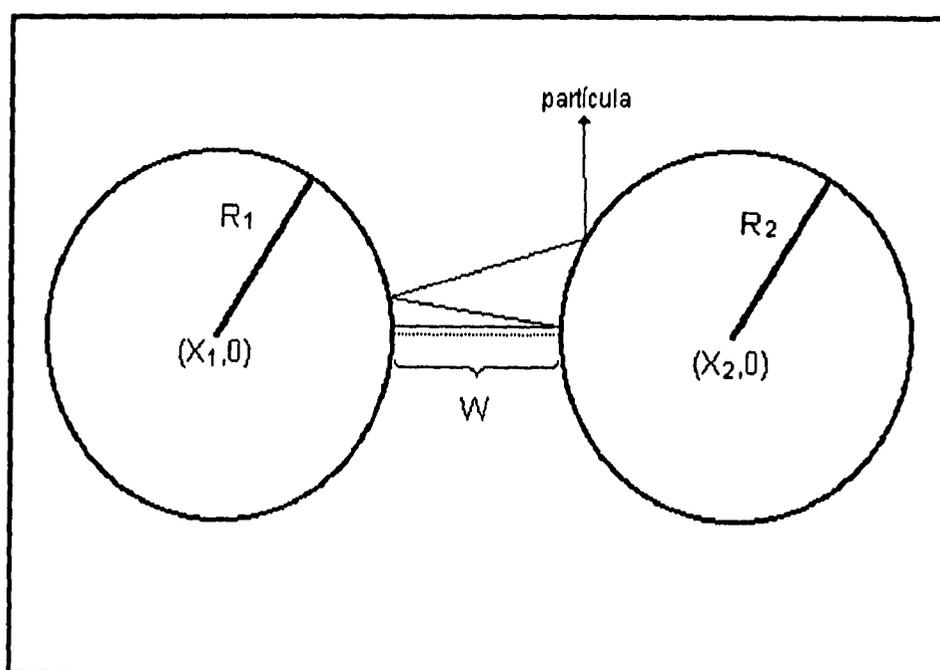


Figura 2.1 Trayectoria de una partícula cercana a la órbita periódica entre dos discos inmóviles.

Supongamos ahora a la partícula con coordenadas  $(X_1 + R_1, \delta y)$  con  $\delta y \ll R_1$  y con momento  $(p_x, p_y)$  con  $p_x$  y  $p_y$  positivos. Llamemos  $\delta\varphi$  al ángulo entre la trayectoria de la partícula y la trayectoria periódica  $y = 0$ ; con las condiciones iniciales de la partícula obtenemos  $\delta\varphi \ll 1$ . Nos interesa describir a la partícula mediante los parámetros de su trayectoria  $(\delta y, \delta\varphi)$ .

En tales circunstancias, la partícula chocará con el disco 2 en un punto caracterizado por el par  $(\delta y', \delta\varphi')$ . Geométricamente, es fácil encontrar  $(\delta y', \delta\varphi')$  en función de  $(\delta y, \delta\varphi)$ , que expresado matricialmente se escribe como

$$\begin{pmatrix} \delta y' \\ \delta \varphi' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & W \\ \frac{2}{R_2} & 1 + \frac{2W}{R_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta y \\ \delta \varphi \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

Cuando la nueva trayectoria de la partícula choque con el disco 1, podemos encontrar el nuevo par  $(\delta y'', \delta \varphi'')$  en términos del par inicial aplicando la misma transformación (2.1), sustituyendo a  $R_2$  por  $R_1$  para obtener

$$\begin{pmatrix} \delta y'' \\ \delta \varphi'' \end{pmatrix} = \Omega \begin{pmatrix} \delta y \\ \delta \varphi \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

donde

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1 + \frac{2W}{R_2} & 2W + \frac{2W^2}{R_2} \\ \frac{2}{R_1} + \frac{2}{R_2} + \frac{4W}{R_1 R_2} & 1 + \frac{2W}{R_2} + \frac{4W}{R_1} + \frac{4W^2}{R_1 R_2} \end{pmatrix}; \quad (2.3)$$

$\Omega$  es la transformación de los parámetros de la partícula sobre un periodo completo de su movimiento. De la ecuación (2.3) se puede verificar que

$$\det(\Omega) = 1. \quad (2.4)$$

En la *figura 2.2* se muestran las trayectorias que define  $\Omega$  en el espacio  $(\delta y, \delta \varphi)$ ; el punto silla en el origen corresponde a la órbita periódica, por lo que ésta es inestable.

Consideremos ahora un tercer disco 3 que se encuentre equidistante a los dos anteriores. Tenemos entonces tres trayectorias periódicas triviales entre cada dos discos (1,2), (2,3) y (3,1) y una más que visita a los tres discos. Estas cuatro trayectorias definen un área cerrada entre los tres discos, lo cual permite la existencia de un infinito de órbitas periódicas entre los discos [7]. Además, entre el número infinito de órbitas periódicas, para el sistema de tres discos, existen conexiones homoclínicas, (órbitas que provienen y convergen a un punto silla) y conexiones heteroclínicas, (órbitas que conectan dos puntos silla) [8] entre algunas de ellas, lo cual es suficiente para asegurar que el sistema de tres discos presente caos topológico [9].

Un estudio más detallado del sistema de tres discos se encuentra en las referencias [7, 10, 11]. Para el sistema de dos discos se puede consultar la referencia [12].

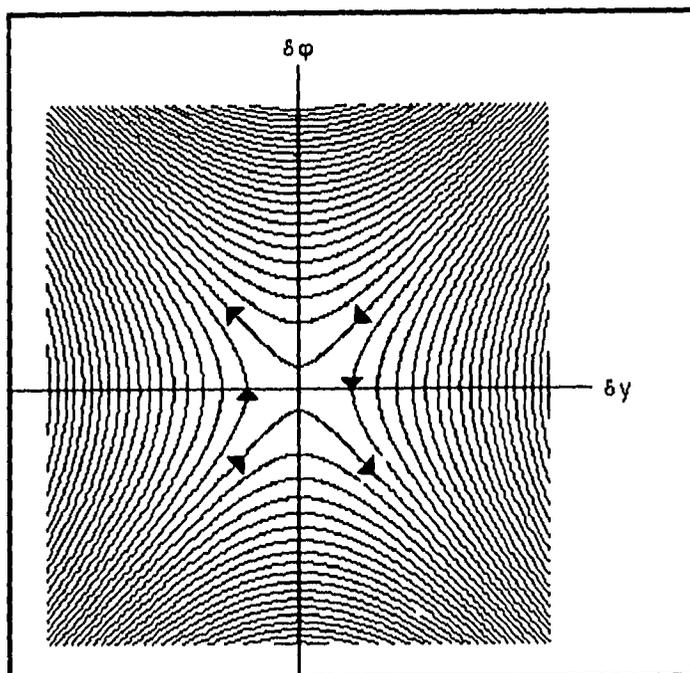


Figura 2.2 Trayectorias que define la transformación  $\Omega$ ; el origen corresponde a un punto hiperbólico.

Cuando se tiene un número infinito de discos, como en el caso del GLP, se puede dividir el plano en subconjuntos de tres discos. Así, para cada subconjunto, la dinámica local de la partícula es caótica y se puede esperar que para más de un subconjunto de tres discos el caos persista. Para cada uno de estos subconjuntos, la transformación (2.3) es válida. Por lo tanto, la dinámica de la partícula en el GLP se rige por el mapeo (2.3).

Ahora, para el caso de nuestro sistema, el mapeo (2.3) ya no es válido pues todos los parámetros de colisión dependerán ahora del tiempo. La obtención de un mapeo similar para el GLO se complica grandemente, pues aún cuando existen trayectorias periódicas es mucho más complicado encontrarlas. Aun así, esperamos que el GLO sea también un sistema que presente caos topológico, lo cual producirá, si consideramos sólo un número finito de discos, que las funciones de dispersión tengan un número no numerable de singularidades.

## 2.2 Espacio fase

El GLO es un sistema no autónomo de 2 grados de libertad; el hamiltoniano depende explícitamente del tiempo. Para un sistema tal, se puede estudiar el espacio fase de 4 dimensiones que definen las coordenadas y momentos generalizados. También se puede construir para este sistema, un espacio de 5 dimensiones que considere al tiempo como una coordenada generalizada más. Este espacio se define como espacio fase extendido [13].

Ninguno de estos espacios los podemos visualizar ya que ambos son de dimensión mayor a tres. En este trabajo nos limitaremos a estudiar secciones de dos dimensiones formadas por el valor de la magnitud del momento de las partículas  $p$  cuando ocurre una colisión y la fase de oscilación de los discos  $\varphi$  cuando la colisión ocurre; esto es equivalente a una sección del tipo  $(p_x, x)$ .

## 2.3 Exponentes de Liapunov

Una característica importante de los sistemas caóticos es la gran sensibilidad de su evolución a las condiciones iniciales. Para estos sistemas, dos trayectorias en el espacio fase, que parten de condiciones iniciales arbitrariamente cercanas, divergirán exponencialmente. Cabe señalar que la divergencia está acotada por la extensión del espacio fase accesible al sistema. La tasa promedio con la cual se separan dos trayectorias cercanas se mide por los exponentes de Liapunov. Por ello, los exponentes de Liapunov son una herramienta poderosa para caracterizar la dinámica de un sistema. Su cálculo es complicado, por lo que sólo calculamos el más grande de los exponentes de Liapunov  $\sigma_1$ .

Los exponentes de Liapunov pueden ser calculados numéricamente, integrando en el tiempo dos trayectorias cercanas ( $d_0$  es la norma de su separación inicial) durante un tiempo  $\tau$ . En este tiempo  $\tau$  se calcula la separación entre ambas órbitas  $d_i$  y se reduce nuevamente su norma a  $d_0$ . Haciendo esto  $n$  veces y con  $\tau$  no muy grande, se puede mostrar que [13]

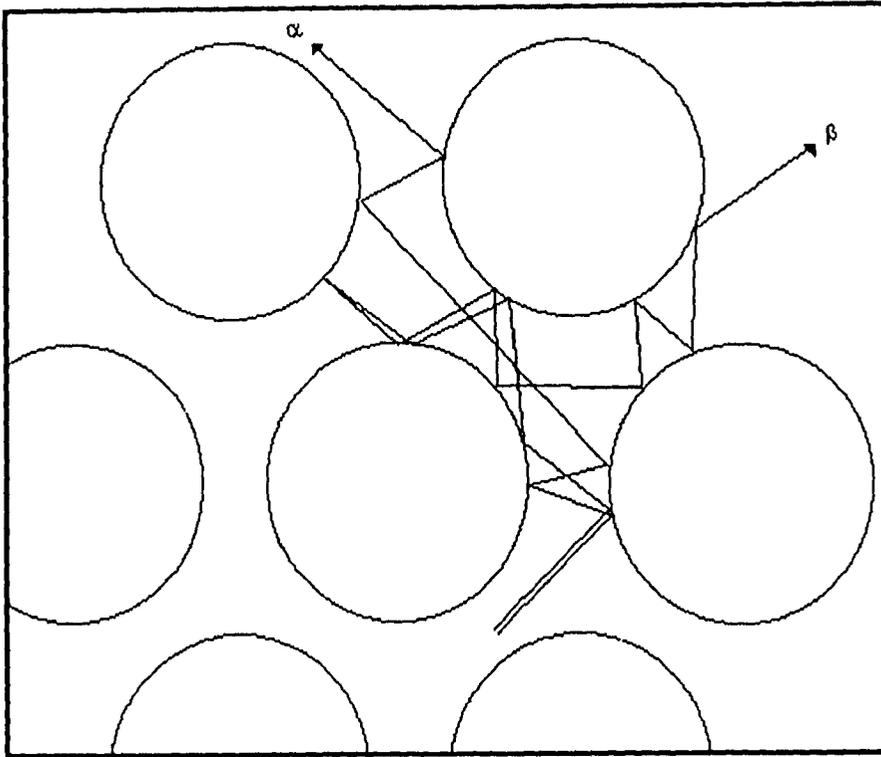


Figura 2.3 Divergencia entre las trayectorias de dos partículas inicialmente cercanas debida a los choques de éstas con las superficies convexas de los discos.

$$\sigma_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{n\tau} \sum_{i=1}^n \ln d_i \right). \quad (2.5)$$

En un arreglo de discos duros es clara la separación entre trayectorias vecinas. Considérese un arreglo arbitrario de discos duros entre los cuales se mueven dos partículas con el mismo momento pero separadas por una cierta distancia arbitrariamente pequeña. De esto resultarán dos puntos en el espacio fase del sistema muy cercanos. Cuando ambas partículas choquen por primera vez con un disco, sus trayectorias se separarán debido a la superficie convexa de los discos. Cuantos más choques tengan las partículas, su separación crecerá hasta que las partículas hayan olvidado que alguna vez estuvieron cerca *figura 2.3*.

La característica fundamental de un sistema  $K$  es la divergencia exponencial entre dos trayectorias (excepto en un conjunto de medida cero) arbitrariamente cercanas, descorrelacionándose rápidamente. Esta característica es el origen de la fuerte dependencia sobre las condiciones iniciales en tales sistemas. En un arreglo de discos duros la característica que provoca tal comportamiento es la superficie convexa de los discos.

## 2.4 Función de auto-correlación de la velocidad

En 1950, Green y Kubo [14] mostraron que los coeficientes de transporte pueden ser obtenidos de integrales sobre las funciones de correlación temporal.

Consideremos un vector  $A$  que es función de  $p$ ,  $q$  y  $t$ , es decir, de las coordenadas del espacio fase y del tiempo,  $A = A(p, q; t)$ . Se define la función de auto-correlación temporal de  $A$  como [15]

$$\Phi(t) = \langle A(0) \cdot A(t) \rangle , \quad (2.6)$$

donde  $\langle \dots \rangle$  indica el promedio sobre un ensemble del sistema.

Si tomamos  $A(t)$  como la velocidad de la partícula  $\vec{v}(t)$  entonces existe una relación entre el coeficiente de difusión y la función de auto-correlación de la velocidad FCV para dos dimensiones

$$D = \frac{1}{2} \int_0^\infty \langle \vec{v}(0) \cdot \vec{v}(\tau) \rangle d\tau . \quad (2.7)$$

La ecuación (2.7) es válida para cualquier sistema que satisfaga la ecuación de difusión

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho , \quad (2.8)$$

donde  $\rho = \rho(\vec{r}, t)$  es la densidad de partículas

## 2.5 Coeficiente de difusión

El coeficiente de difusión está definido por la ecuación (2.8). En términos de la dispersión en la posición de las partículas podemos escribir el coeficiente de difusión  $D$  en dos dimensiones como:

$$\langle r^2(t) \rangle = 4Dt . \quad (2.9)$$

La ecuación (2.9) es válida para tiempos largos y en ésta  $D$  juega el papel de la rapidez con la cual cambia  $\langle r^2(t) \rangle$  en el tiempo. Calculando  $\langle r^2(t) \rangle$  tenemos una forma sencilla de conocer el valor de  $D$ .

En general,  $D$  dependerá de los parámetros del sistema. En el GLO dependerá del tipo de arreglo de los discos, la amplitud de oscilación de los discos, su frecuencia de oscilación y sus radios. Por ejemplo, mientras menor sea el radio de los discos en comparación con la distancia de separación entre ellos, mayor distancia podrán viajar las partículas sin chocar, aumentando de esta manera, en virtud de la ecuación (2.9), la difusión.

## 2.6 El oscilador de Fermi

En 1949 E. Fermi propuso un modelo para explicar la gran energía de los rayos cósmicos que llegan a la Tierra. Este modelo, conocido ahora como el oscilador de Fermi, consiste en una partícula puntual rebotando entre planos que se mueven con velocidades aleatorias y en los cuales la partícula rebota. Una simplificación del oscilador de Fermi es el modelo de Ulam [13] consistente en una partícula que rebota entre un plano fijo y otro que oscila sinusoidalmente. Para una oscilación sinusoidal se obtiene el mapeo simplificado de Fermi:

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= |u_n + \text{sen } \varphi_n| \\ \varphi_{n+1} &= \varphi_n + \frac{2\pi M}{u_{n+1}} \pmod{2\pi} \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde  $u_n$  y  $\varphi_n$  son la velocidad de la partícula y la fase de oscilación del disco en la  $n$ -ésima colisión y  $M$  es una constante que depende de los parámetros del modelo.

El movimiento de la partícula es estocástico pero sin un incremento en promedio de su energía debido a la presencia de curvas invariantes [16] que cruzan el espacio fase del sistema y que impiden que la partícula viaje a zonas de mayor energía. Cuando la partícula se mueve sólo en la dirección  $x$ , es decir,  $p_y = 0$  y su coordenada  $y$  coincide con la línea horizontal que une los centros de dos discos arbitrarios, el GLO reproduce el modelo descrito por las ecuaciones 2.10. En la *figura 2.4* se muestra el espacio fase  $(p, \varphi)$  producido por el GLO en las circunstancias anteriores; éste coincide con el espacio fase encontrado con las ecuaciones (2.10) [17]. En estas circunstancias, la difusión de esa partícula se detiene pues su trayectoria converge a la órbita periódica inestable descrita en la sección 2.1.

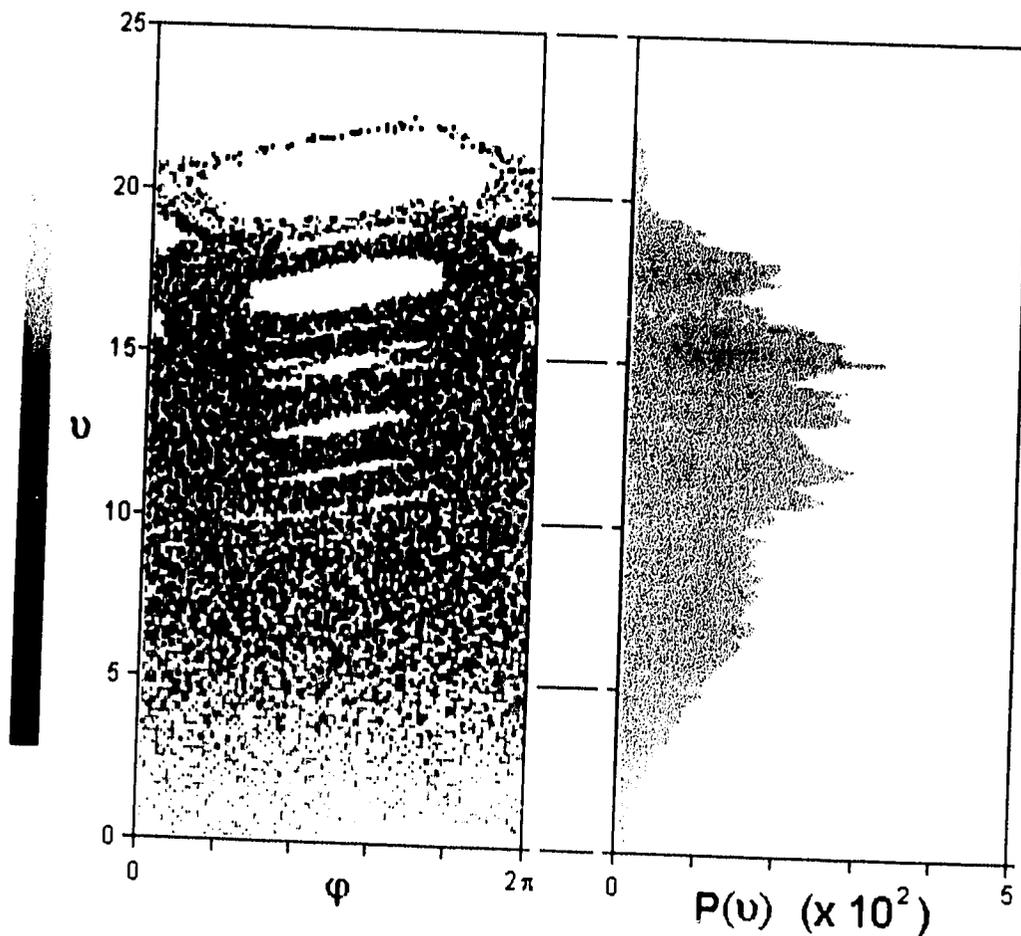


Figura 2.4 Sección  $(p, \varphi)$  del espacio fase del GLO bajo las condiciones en las que reproduce al modelo del oscilador de Fermi.

## Capítulo 3

### Gas de Lorentz periódico

En el GLP los dispersores se encuentran distribuidos regularmente en el espacio, a diferencia del modelo del gas de Lorentz original en el cual los dispersores se distribuyen al azar. Esta diferencia no produce cambios en la dinámica de las partículas en tales sistemas debido a su ergodicidad intrínseca [5].

La difusión para un gas de Lorentz periódico se aproxima más a la de partículas en un cristal, ya que al estar los dispersores distribuidos regularmente siempre se puede hacer una partición del espacio en celdas fundamentales idénticas. La definición de estas celdas fundamentales dependerá del arreglo regular que se considere para los dispersores.

En este trabajo se han considerado dos tipos de arreglo que hemos llamado *arreglo rectangular* y *arreglo triangular*.

a) *Arreglo rectangular*. Consiste en distribuir los discos en los vértices de un rectángulo. En este caso, la partícula puede moverse una distancia infinita antes de chocar con un disco, independientemente de la separación entre los discos, *figura 3.1*. A este tipo de dinámica se le conoce como *horizonte infinito*. En este caso, no se puede asegurar que exista la integral de la función de correlación de la velocidad en el tiempo, pues el camino libre medio de la partícula no es acotado y por lo tanto, el coeficiente de difusión no existe. Por lo tanto, para este tipo de arreglo sólo estudiaremos la estructura del espacio fase.

b) *Arreglo triangular*. En este caso, los discos son colocados en los vértices

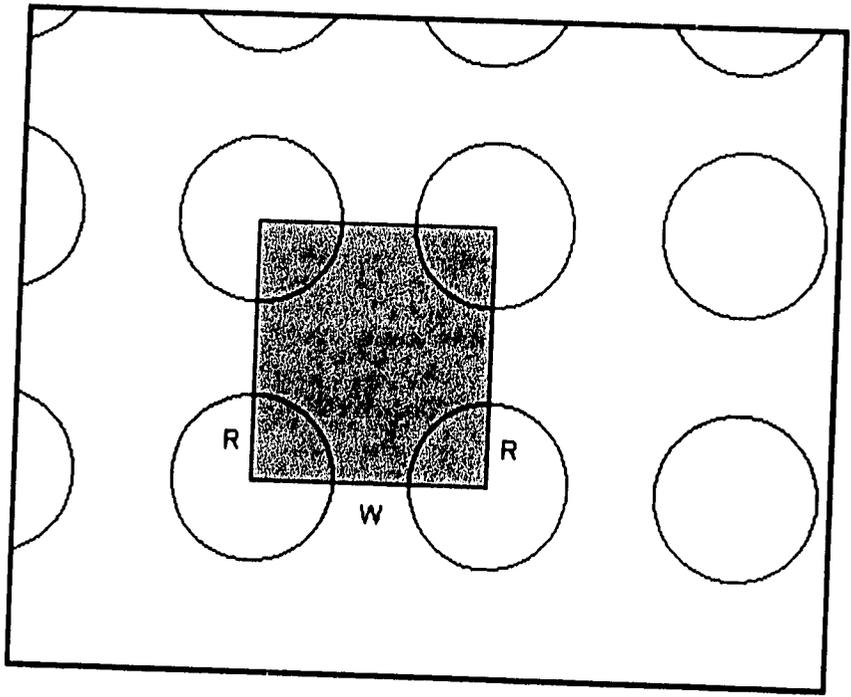


Figura 3.1 Arreglo rectangular de los discos.  $W$  es la separación entre los discos y  $R$  es su radio.

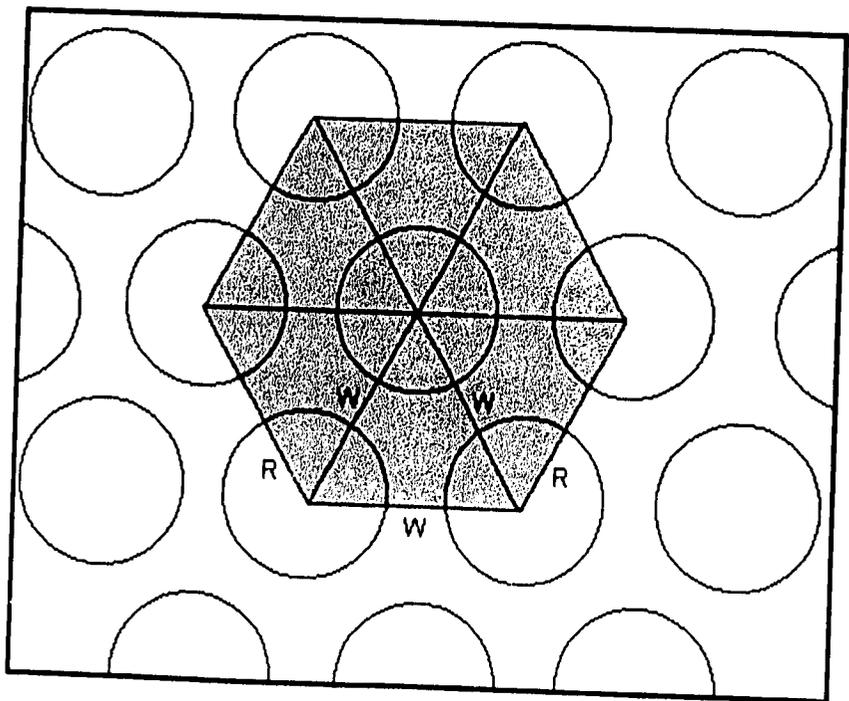


Figura 3.2 Arreglo triangular de los discos.  $W$  es la separación entre los discos y  $R$  es su radio.

de un triángulo. En este caso podemos imponer un horizonte finito o infinito, según la separación entre los discos. Para la geometría de la *figura 3.2* donde  $R$  es el radio de los discos y  $W$  la separación mínima entre sus fronteras, se obtiene un horizonte finito para

$$0 \leq W < R \left( \frac{4}{\sqrt{3}} - 2 \right), \quad (3.1)$$

y el camino libre de la partícula no puede ser mayor que

$$\Delta = 2R\sqrt{3}. \quad (3.2)$$

El tiempo entre colisiones está entonces acotado por  $\frac{\Delta}{v}$ , donde  $v$  es la velocidad de la partícula; por lo tanto, el coeficiente de difusión puede existir.

### 3.1 Resultados anteriores

Como se mencionó en la introducción, el modelo del gas de Lorentz ha recibido una gran atención debido a que es uno de los modelos más simples para estudiar procesos deterministas de difusión. Esto ha contribuido a encontrar soluciones analíticas y numéricas para procesos de transporte en sistemas afines.

Se ha encontrado analítica [3] y numéricamente [18] que para el gas de Lorentz en el régimen de densidades altas <sup>1</sup>, el coeficiente de difusión corresponde al de un caminante al azar. También con un análisis simbólico de la dinámica de la partícula, Cvitanovic et al [19] han calculado el coeficiente de difusión para un gas de Lorentz diluido. Con respecto a la función de correlación de la velocidad FCV, Beijeren [3] ha encontrado que esta exhibe un decaimiento algebraico (en inglés, long time tail) proporcional a  $t^{-(\frac{d}{2}+1)}$ , con  $d$  la dimensión de los discos. El autor discute también las consecuencias que este comportamiento produce en las propiedades de transporte. Machta y Zwanzig [18] han calculado la FCV numéricamente encontrando

---

<sup>1</sup>Es decir, un horizonte finito

el mismo comportamiento; reportan además una forma muy compleja para la FCV sin poder explicarla.

Sinai y Bunimovich [20] y Gallavotti [21] han hecho una profunda investigación de las propiedades ergódicas del gas de Lorentz y han demostrado rigurosamente la ergodicidad del sistema. A su vez, Gaspard y Nicolis [22] han establecido una relación entre el coeficiente de difusión y la diferencia entre el exponente positivo de Liapunov y la entropía de Kolmogorov-Sinai por unidad de tiempo, dejando entrever aún más las propiedades ergódicas del gas de Lorentz.

## Capítulo 4

# Gas de Lorentz oscilante

### 4.1 Dinámica de la colisión

En este modelo, se estudia la difusión de una partícula ligera que choca elásticamente con un arreglo de discos duros distribuidos regularmente en el plano y que oscilan periódicamente en la dirección  $x$  alrededor de su posición asignada en la red. La masa de los discos se considera infinita tal que su movimiento no sea afectado por los choques de la partícula.

En su movimiento, la partícula con velocidad  $(v_x, v_y)$  choca con un disco. Las coordenadas de la colisión son las coordenadas de la partícula en el momento en el que ésta choca con el disco. El objetivo es encontrar la velocidad de la partícula con la cual se aleja del disco después de la colisión  $v_f$  en función de la velocidad de la partícula antes de la colisión  $v_i$ .

Para colisiones elásticas,  $v_f$  es tal que la componente de  $v_i$  normal a la superficie del disco en el punto de la colisión cambia de signo, dejando sin cambio a la componente tangencial de  $v_i$  (*figura 4.1*). Cuando el disco no está fijo, se debe transformar la velocidad  $v_i$  del sistema de referencia del laboratorio al sistema de referencia en el cual el disco se encuentra en reposo, encontrar en este sistema  $v_f$  y transformar esta última nuevamente al sistema de referencia del laboratorio.

Cabe señalar, puesto que la velocidad del disco no es constante en su oscilación, que la partícula puede chocar más de una vez con el mismo disco.

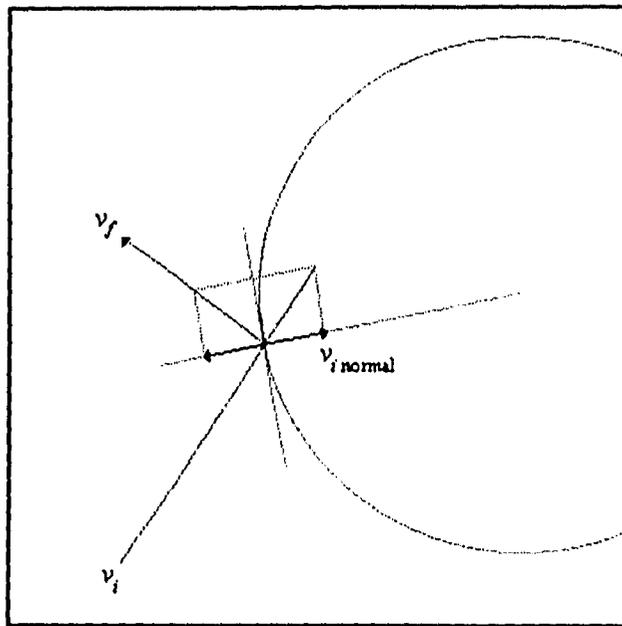


Figura 4.1 En una colisión elástica, la componente normal a la superficie del disco  $v_{i \text{ normal}}$  cambia de signo, mientras que la componente tangencial permanece sin cambio.

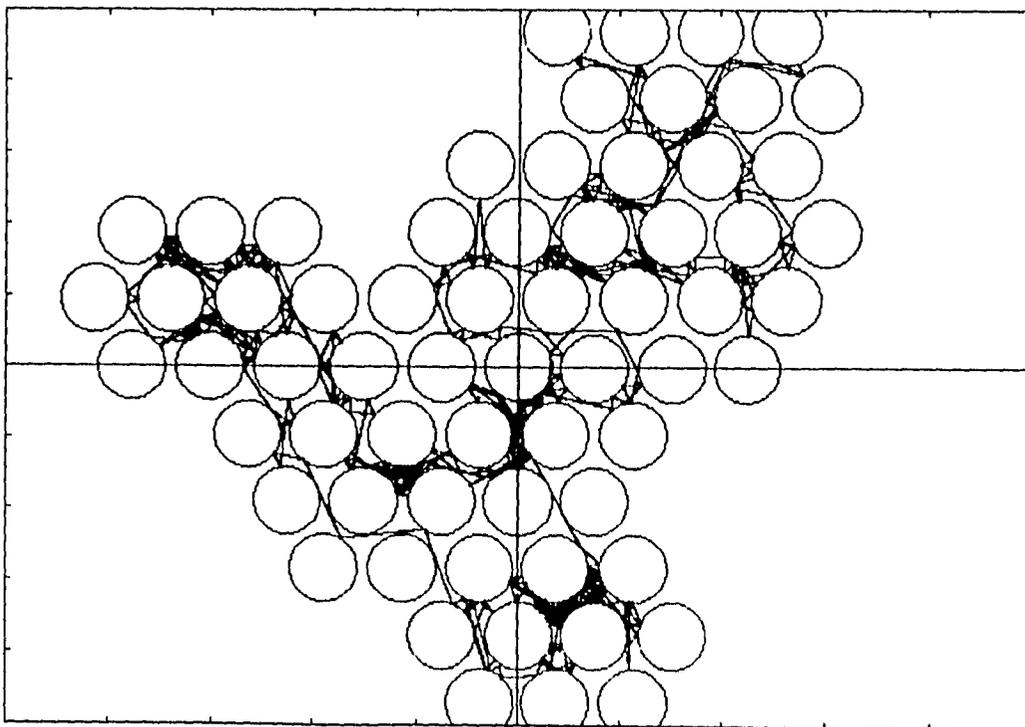


Figura 4.2 Parte de la trayectoria de una partícula típica a través de un arreglo triangular de discos con horizonte finito.

## 4.2 Simulaciones

Todos los programas de simulación desarrollados sobre un código base que se encarga de la dinámica del sistema, es decir, se encarga de mover tanto los discos como las partículas y calcular los choques que éstas tienen con los discos *figura 4.2*. Dado que la partícula entre cada choque se comporta como una partícula libre, la única parte delicada es la descripción de las colisiones. Esto se hace mediante un algoritmo de aproximación sucesiva, con un error del orden de  $10^{-9}$ . Se espera que este error no repercuta en los resultados de la dinámica global.

Considerar a los discos dispuestos regularmente en el plano es una simplificación muy importante para la obtención de los cálculos numéricos. De esta manera se puede dividir al plano en celdas rectangulares, que contiene a un disco; se define así la zona de influencia de cada disco sobre las partículas. Un disco perteneciente a un rectángulo no podrá penetrar a ningún otro rectángulo; ésta es una restricción importante sobre el movimiento de los discos para impedir que distintos discos se traslapen. La posición de cada celda rectangular estará asociada a la posición asignada en el plano del disco que le corresponda y su extensión quedará determinada por el tipo de arreglo del que se trate y por el radio de los discos.

Cuando la partícula se encuentra en la posición  $(x, y)$  estará contenida en una de las celdas que dividen al plano y por lo tanto será suficiente considerar los choques de la partícula con el disco perteneciente a tal celda. Cuando la partícula pasa de una celda a otra, el disco a considerar será el correspondiente a la nueva celda.

Se consideraron tanto arreglos rectangulares como arreglos triangulares. También se hizo distinción de la relación entre las fases de oscilación de los discos:

a) *Diferencia de fase aleatoria*: Cada disco en el plano tiene su propia fase de oscilación distinta de las fases de oscilación de los demás discos. La elección de la fase de oscilación para cada disco es azarosa y se elige una fase distinta cada vez que la partícula entra a su celda.

b) *Diferencia de fase cero*: Cada disco tiene la misma fase de oscilación a todo tiempo.

### 4.2.1 Espacio fase

Se calcula la sección bidimensional  $(p, \varphi)$  en donde  $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$  es el valor que la magnitud del momento de la partícula tiene en cada colisión con los discos y  $\varphi$  es la fase de oscilación del disco en el mismo instante. Los resultados se obtienen para una y varias partículas con condiciones iniciales elegidas al azar.

Las secciones del espacio fase presentadas consisten en un plano que se divide en celdas (100 horizontales y 200 verticales), siendo la intensidad de cada celda en el plano correspondiente al número de veces que el estado del sistema pasa por tal celda. Entre más oscura sea la celda, más veces habrá estado el sistema en ella.

### 4.2.2 Función de auto-correlación de la velocidad

Se obtuvo la FCV a partir de la ecuación (2.6), promediando tanto sobre el tiempo para una condición inicial (promedio temporal) como sobre un ensemble de condiciones iniciales (promedio espacial)

Las definiciones usadas para la FCV son las siguientes:

Promedio temporal:

$$\phi_t(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{NV} \sum_{i=1}^N \vec{v}(ti) \cdot \vec{v}(ti + \tau), \quad (4.1)$$

donde

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{v}(ti) \cdot \vec{v}(ti). \quad (4.2)$$

Promedio espacial:

$$\phi_e(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\vec{v}_i(o) \cdot \vec{v}_i(\tau)}{V_i}, \quad (4.3)$$

donde

$$V_i = \vec{v}_i(o) \cdot \vec{v}_i(o) . \quad (4.4)$$

y la suma en la ecuación (4.3) es una suma sobre condiciones iniciales.

El teorema ergódico establece que [15] *para un sistema ergódico, un número grande de observaciones de un sólo sistema a  $n$  instantes arbitrarios de tiempo tiene las mismas propiedades estadísticas que el observar  $n$  sistemas escogidos arbitrariamente de un ensemble de sistemas similares a un solo tiempo.*

Si el GLO es un sistema ergódico, los resultados obtenidos usando las expresiones (4.1) y (4.3) deben coincidir [23].

### 4.2.3 Coeficiente de difusión

Para obtener una estimación numérica del coeficiente de difusión  $D$ , a partir de la ecuación (2.9), se obtuvo la evolución en el tiempo de la dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  y  $\langle y^2(t) \rangle$ . Cada cálculo se hizo variando los parámetros del sistema (amplitud y frecuencia de oscilación y radio de los discos) y promediando sobre 1000 condiciones iniciales. También se obtuvieron resultados para las dos condiciones de las fases de oscilación de los discos. En el capítulo siguiente presentaremos los resultados de estos cálculos.

## Capítulo 5

### Resultados

La presentación de los resultados se divide en tres partes. En primer lugar se presentan las secciones de espacio fase obtenidas para arreglos triangulares y rectangulares usando distintas condiciones iniciales. Estas se discuten cualitativamente.

En segundo lugar se encuentran los resultados para la FCV en los cuales se analiza su comportamiento respecto a la amplitud de oscilación de los discos y se comparan los promedios espaciales y temporales para los modelos GLP y GLO.

Finalmente, se presentan los resultados de la dispersión en la posición de las partículas como función del tiempo para un arreglo triangular y se analiza la dependencia con la amplitud de oscilación  $A$ , la frecuencia de oscilación  $\omega$  y el radio  $R$  de los discos. De algunas de éstas se obtiene una estimación numérica del coeficiente de difusión.

Los valores numéricos de todas las cantidades físicas involucradas se han normalizado para obtener unidades adimensionales. En el caso de las unidades de longitud, éstas se han normalizado por la mitad de la longitud mayor de una celda  $\Lambda$ , que para un arreglo triangular es  $\Lambda = \frac{2R}{\sqrt{3}}$  para no permitir solapamiento entre distintos discos. De igual manera, para un arreglo rectangular  $\Lambda = R + \frac{W}{2}$ . En el caso de las unidades de tiempo, éstas se han normalizado por el inverso de la frecuencia de oscilación de los discos  $\omega$ . Y sólo en el caso de los resultados para los cuales se varía la frecuencia de oscilación de los discos, las unidades de tiempo se normalizarán por el inverso de la mínima frecuencia de oscilación usada.

## 5.1 Espacio fase

Se obtuvo la sección del espacio fase  $(p, \varphi)$  para el GLO con ambos tipos de arreglos (rectangular y triangular) y para ambas condiciones de las fases de oscilación de los discos (iguales y aleatorias). En las *figuras 5.1, 5.2 y 5.3* se muestra la sección obtenida para una condición inicial en un arreglo rectangular de los discos con fases iguales y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.75$ . En las mismas condiciones se muestran las *figuras 5.5, 5.6 y 5.7* pero para un arreglo triangular con horizonte infinito y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . Junto con las secciones  $(p, \varphi)$  se muestra la distribución de la velocidad de las partículas integrada sobre la fase de oscilación de los discos y el tiempo.

De estas gráficas observamos que la magnitud de la velocidad de las partículas  $v$  varía muy poco respecto a su velocidad inicial cuando es mucho mayor que la velocidad de oscilación de los discos (la amplitud de velocidad de los discos dada por  $V_d = \omega A$ ). La razón es que cuando  $v \gg V_d$  podemos despreciar  $V_d$  de tal manera que las partículas se mueven como en el GLP, que es un sistema conservador.

También se observa que el comportamiento de la estructura de la sección del espacio fase respecto de la velocidad inicial de la partícula es similar para ambos tipos de arreglo. Sin embargo, la estructura misma del espacio fase para iguales condiciones iniciales pero distinto tipo de arreglo es apreciablemente distinta.

En la *figura 5.4* se muestra la misma sección que en *5.1* pero para 10 partículas. La velocidad inicial de todas las partículas es  $v_o = 1$ . En la distribución de las velocidades de esta figura, se aprecia la existencia de una velocidad promedio, alrededor de la cual la velocidad de las partículas varía.

Es interesante hacer notar que para una sola partícula y después de 500000 colisiones, los huecos en el plano que no fueron rellenados, sí fueron cubiertos por otras partículas. Comparando las *figuras 5.1 y 5.4* se observa que lo que para unas partículas parecen ser zonas inaccesibles, para otras no lo son. Los huecos en el plano de espacio fase para una partícula pueden ser rellenados por otras partículas.

Como veremos de los resultados del cálculo de la función de auto-correlación de la velocidad FCV, se debe esperar que el espacio fase para una sola partícula y

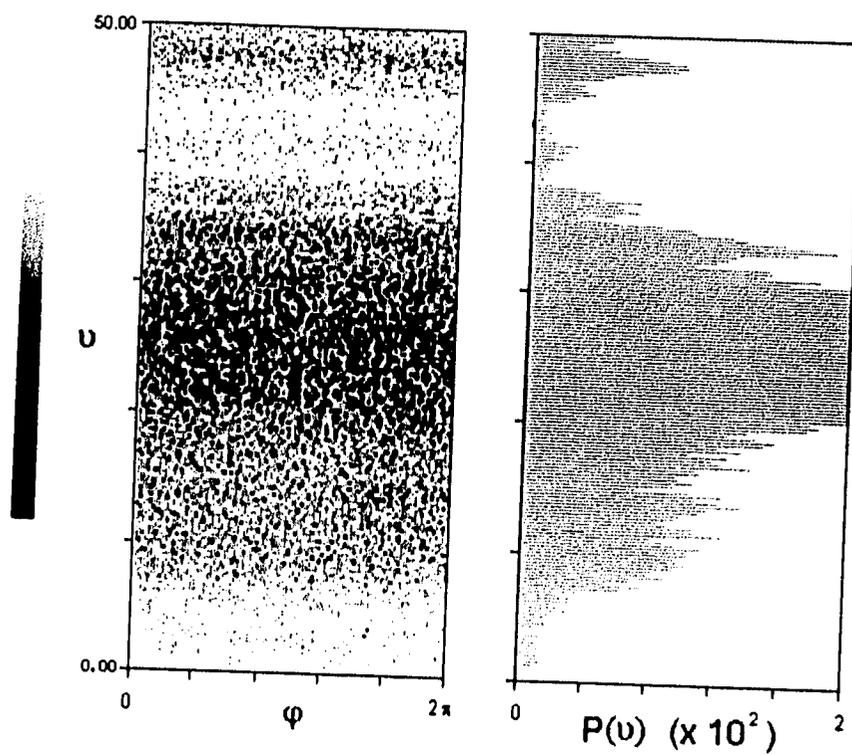


Figura 5.1 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo rectangular de discos con fases de oscilación iguales y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$ ,  $R = 0.75$  y  $W = 0.5$ . La velocidad inicial de la partícula es 0.5.

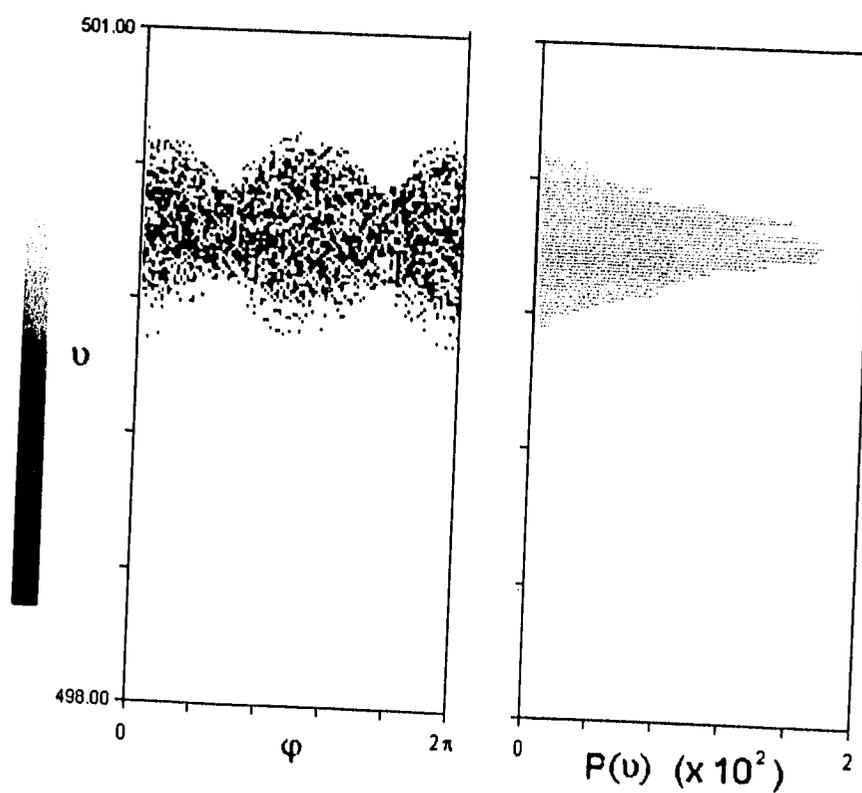


Figura 5.2 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo rectangular de discos con fases de oscilación iguales y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$ ,  $R = 0.75$  y  $W = 0.5$ . La velocidad inicial de la partícula es 50.

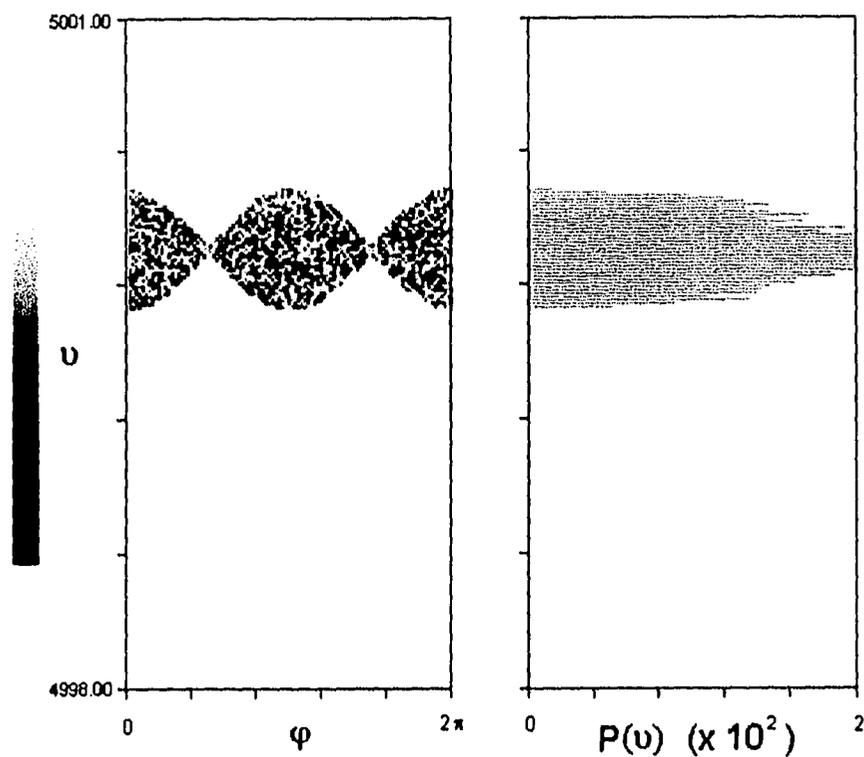


Figura 5.3 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo rectangular de discos con fases de oscilación iguales y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$ ,  $R = 0.75$  y  $W = 0.5$ . La velocidad inicial de la partícula es 500.

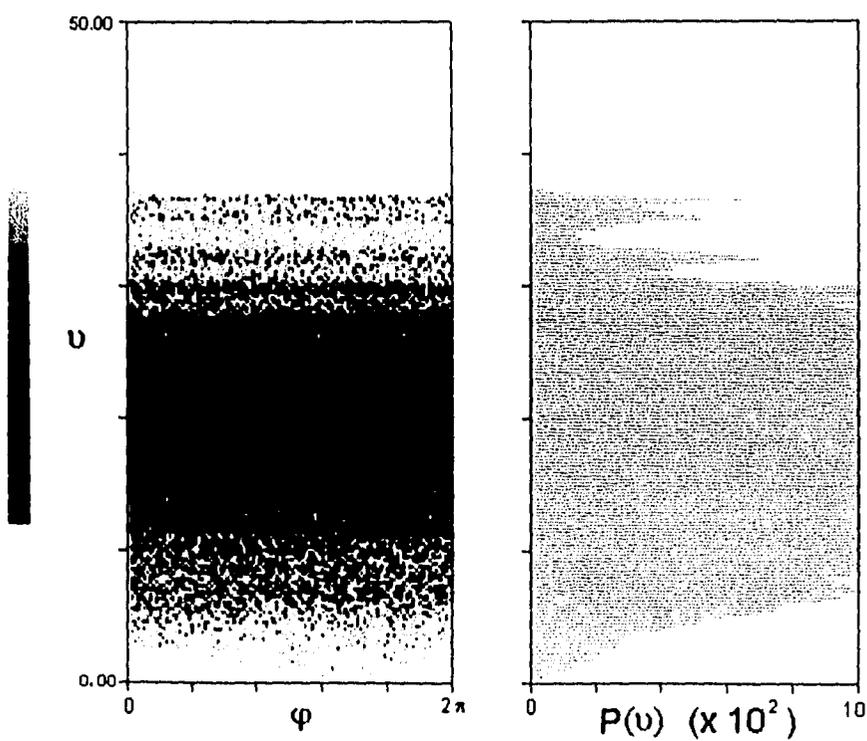


Figura 5.4 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para diez partículas en un arreglo rectangular de discos con fases de oscilación iguales y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$ ,  $R = 0.75$  y  $W = 0.5$ . La velocidad inicial de las partículas es 0.5.

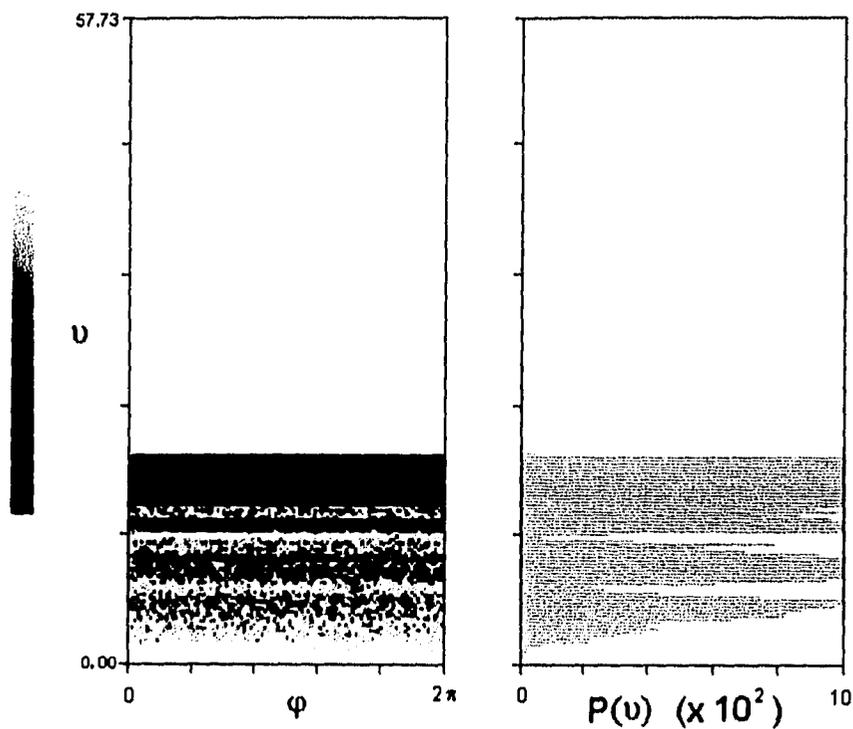


Figura 5.5 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo triangular de discos con horizonte finito, fases de oscilación iguales y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . La velocidad inicial de la partícula es 0.58.

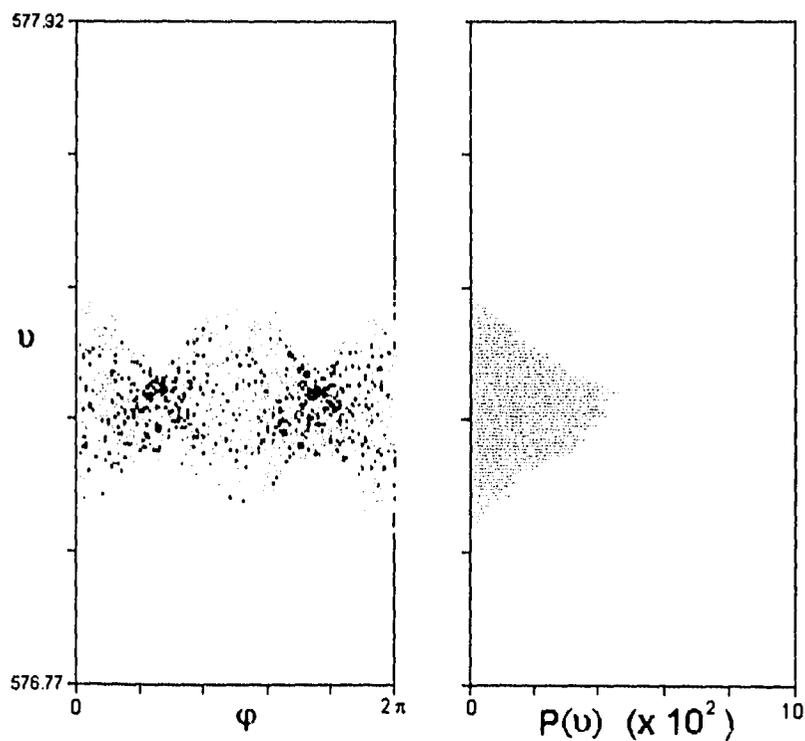


Figura 5.6 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo triangular de discos con horizonte finito, fases de oscilación iguales y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . La velocidad inicial de la partícula es 577.4.

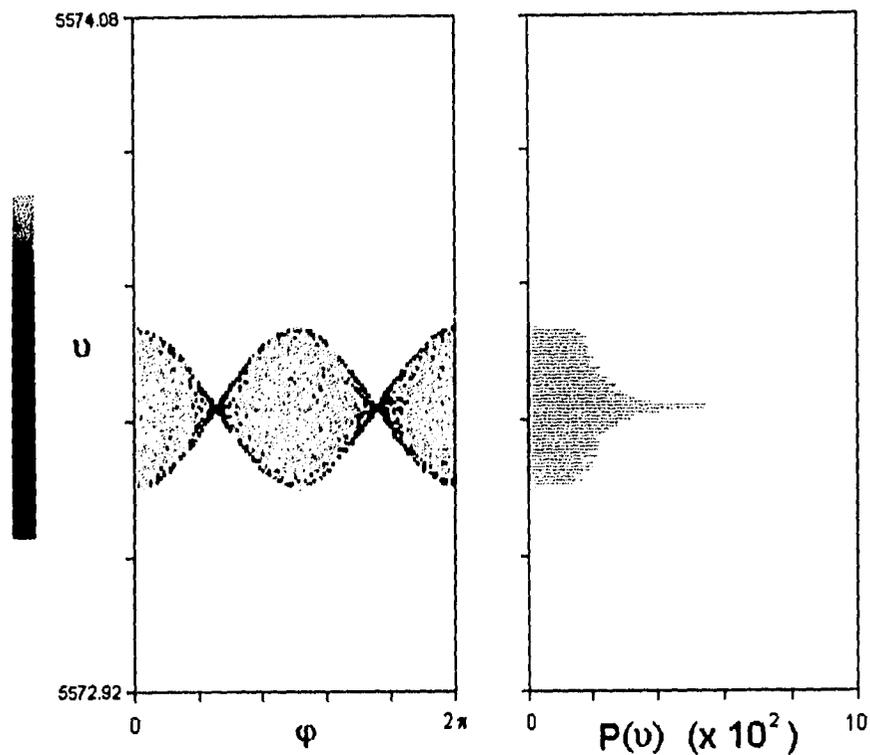


Figura 5.7 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo triangular de discos con horizonte finito, fases de oscilación iguales y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . La velocidad inicial de la partícula es 5773.5.

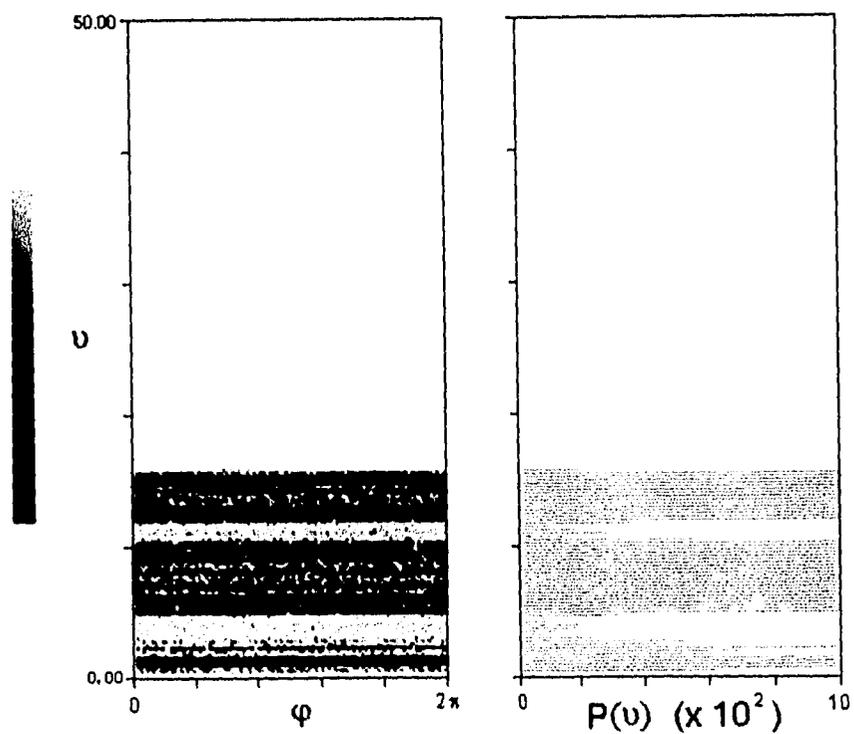


Figura 5.8 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo rectangular de discos con fases de oscilación aleatorias y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$ ,  $R = 0.75$  y  $W = 0.5$ . La velocidad inicial de la partícula es 0.5.

tiempos muy largos coincide con el espacio fase para muchas partículas y tiempos no tan largos. Esto no se observó en este trabajo, al menos hasta tiempos de 500000 colisiones.

En las *figuras 5.8, 5.9, 5.10 y 5.11* se muestra la misma sección  $(p, \varphi)$  usando condición de fases aleatorias para ambos tipos de arreglo. Las *figuras 5.8 y 5.9* se deben comparar con las *figuras 5.1 y 5.3* respectivamente y las *figuras 5.10 y 5.11* se deben comparar con las *figuras 5.5 y 5.7* respectivamente. En estas figuras se observa que la estructura de la sección de espacio fase considerada es similar en el sentido de que la magnitud de la velocidad de la partícula parece alcanzar un valor promedio bien definido tanto para velocidades grandes como pequeñas. En particular, para velocidades grandes y fases aleatorias, se observa que la variación de la velocidad respecto de la velocidad inicial de la partícula es mayor que la obtenida para las fases iguales.

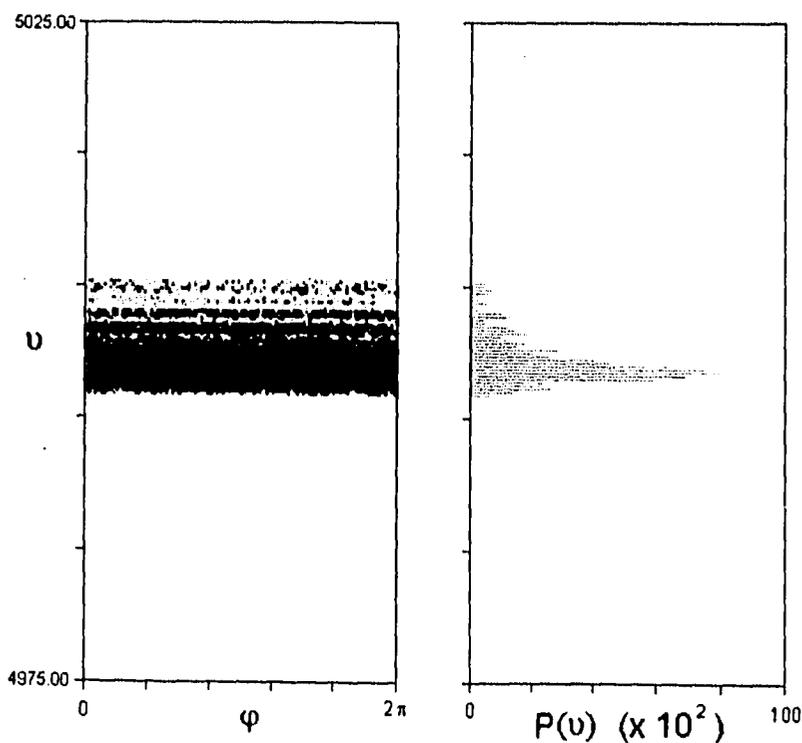


Figura 5.9 Sección  $(p, \varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo rectangular de discos con fases de oscilación aleatorias y  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$ ,  $R = 0.75$  y  $W = 0.5$ . La velocidad inicial de la partícula es 500.

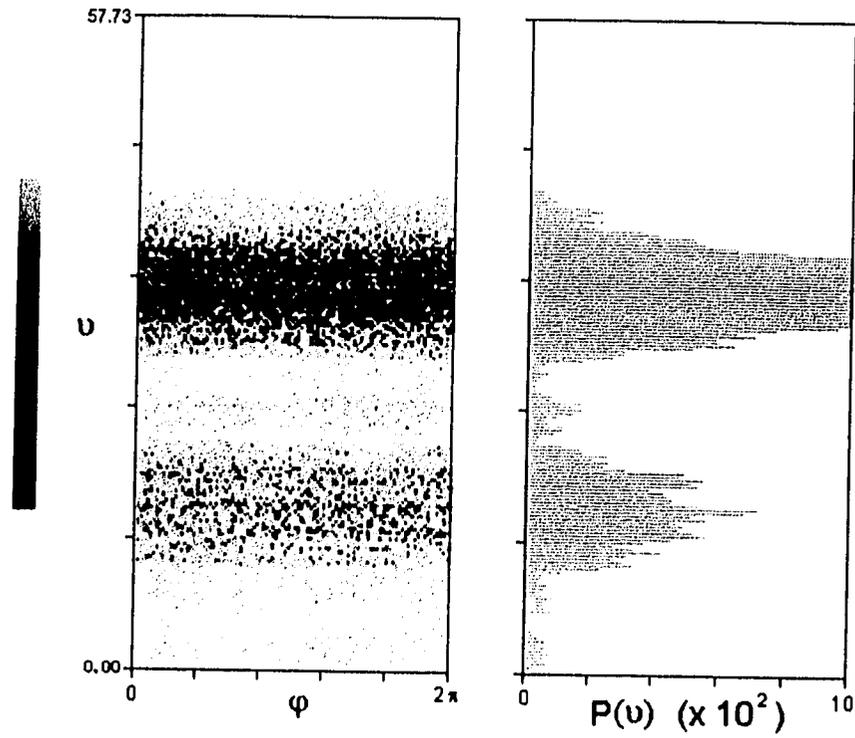


Figura 5.10 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo triangular de discos con horizonte finito, fases de oscilación aleatorias y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . La velocidad inicial de la partícula es 0.58.

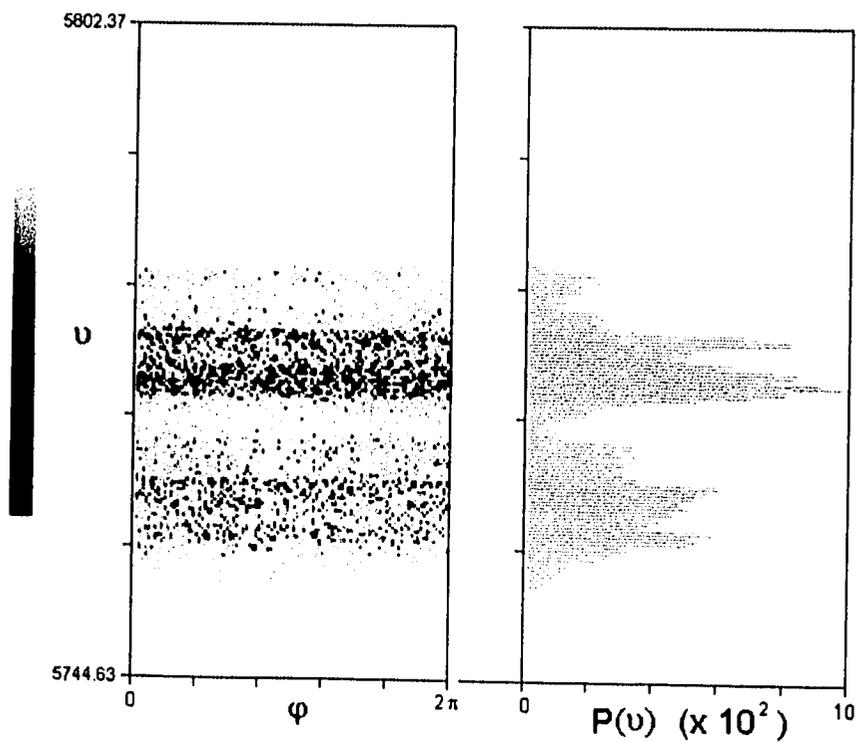


Figura 5.11 Sección  $(p,\varphi)$  del espacio fase del GLO y distribución de la velocidad para una partícula en un arreglo triangular de discos con horizonte finito, fases de oscilación aleatorias y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . La velocidad inicial de la partícula es 5773.5.

También se obtuvo la evolución de la magnitud del momento  $p$  de una partícula para el GLO con fases aleatorias. La *figura 5.12* para un arreglo rectangular con  $A = 0.005$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.75$  y la *figura 5.13* para un arreglo triangular con horizonte finito y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ . En ambas se observa que a tiempos cortos, el momento de la partícula crece rápidamente muy por arriba del valor de la amplitud de la velocidad de los discos; esto es más apreciable para el arreglo rectangular que para el triangular. Para tiempos largos, el momento deja de crecer y comienza a variar alrededor de lo que podríamos esperar, un valor promedio. Desgraciadamente, el cálculo de la evolución del GLO para tiempos muy largos es muy costoso, computacionalmente hablando, por lo cual en este trabajo no se puede concluir nada acerca de la existencia de tal velocidad promedio.

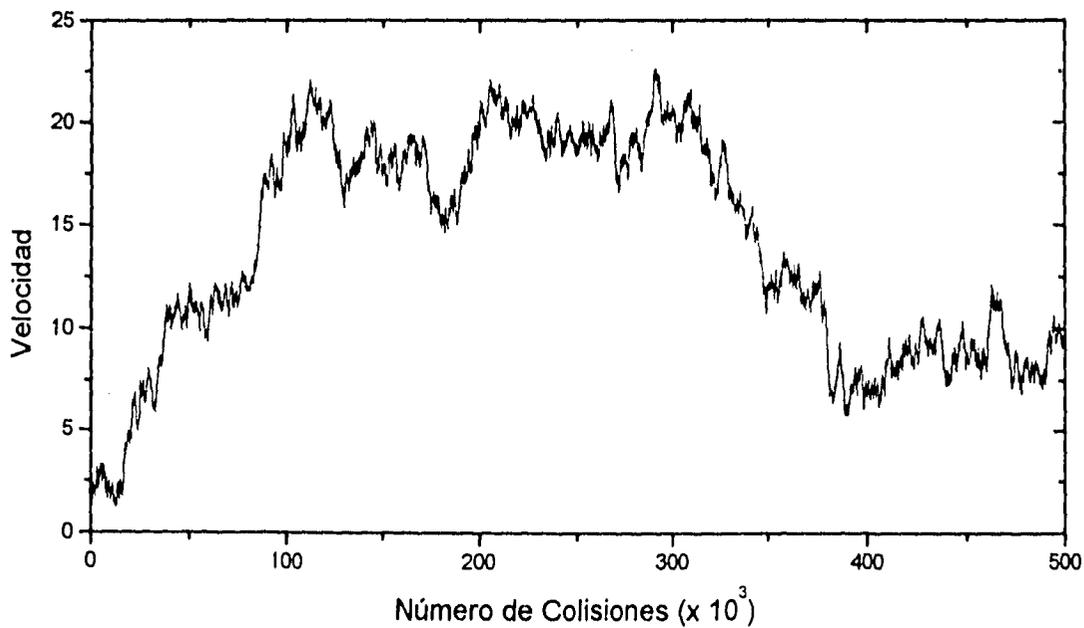


Figura 5.12 Magnitud del momento de una partícula como función del tiempo para un arreglo rectangular de discos con fases aleatorias.

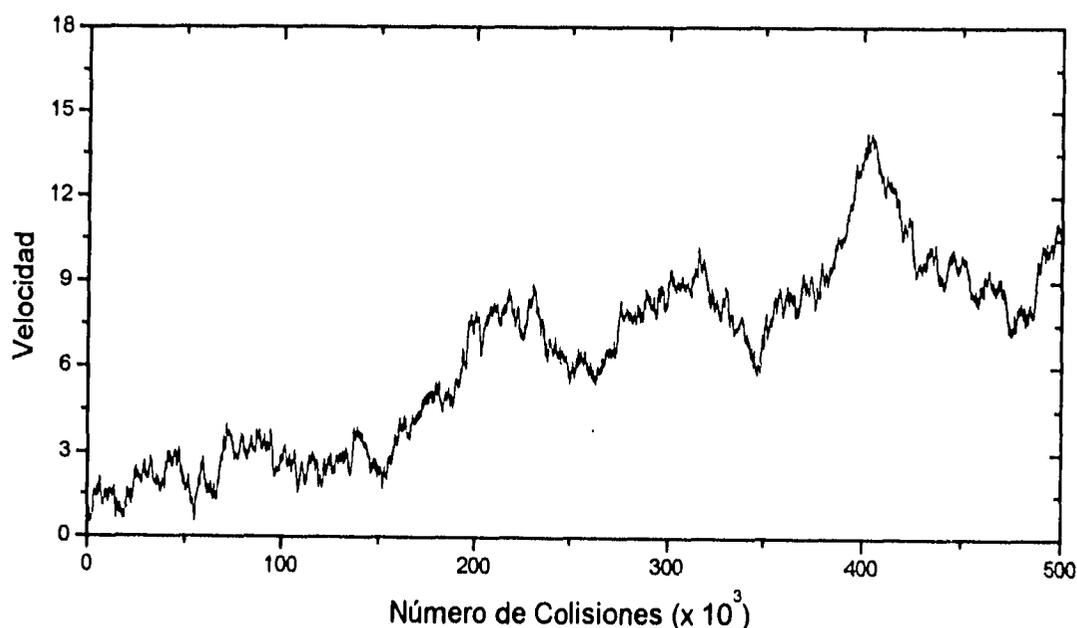


Figura 5.13 Magnitud del momento de una partícula como función del tiempo para un arreglo triangular de discos con horizonte finito y fases aleatorias.

## 5.2 Función de auto-correlación de la velocidad

Se calculó la FCV con un promedio temporal (ecuación 4.1) y con un promedio espacial (ecuación 4.3). En la *figura 5.14* se comparan las FCV como función del tiempo obtenidas de un promedio espacial y de un promedio temporal para el GLP. En la *figura 5.15* se comparan las FCV como función del tiempo obtenidas de un promedio espacial y de un promedio temporal para el GLO para un arreglo triangular de los discos con fases aleatorias y  $A = 0.0058$ ,  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ .

Una demostración de la existencia de ergodicidad para el GLO es sumamente compleja y está fuera de los propósitos de esta tesis. Sin embargo, la similitud observada en las *figuras 5.14* y *5.15* entre las FCV temporal y espacial nos habla

de la posible ergodicidad del GLO y corrobora tal propiedad del GLP demostrada rigurosamente por Sinai [5]. La ergodicidad también es aparente en ciertas zonas de las secciones del espacio fase obtenidas.

También, en la *figura 5.16*, se grafica la FCV calculada a partir de (4.1) en función de la amplitud de oscilación de los discos.

Se calculó el más grande de los exponentes de Liapunov  $\sigma_1$  para el GLO como función de la frecuencia de oscilación de los discos  $\omega$ . En la *figura 5.17* están los resultados obtenidos para  $\sigma_1$ . El calculo fue obtenido para un arreglo triangular con horizonte finito y  $A = 0.0058$ ,  $R = 0.87$ . El  $\sigma_1$  obtenido para cada frecuencia es positivo lo cual demuestra que el GLO es altamente sensible a las condiciones iniciales, esto es, que un conjunto de trayectorias vecinas exhibirá una velocidad promedio positiva de divergencia exponencial. Además,  $\sigma_1$  crece con la frecuencia de oscilación. Desgraciadamente no se cuenta con los errores asociados a los datos por lo cual no se puede asegurar como crece  $\sigma_1$  en función de la frecuencia  $\omega$ .

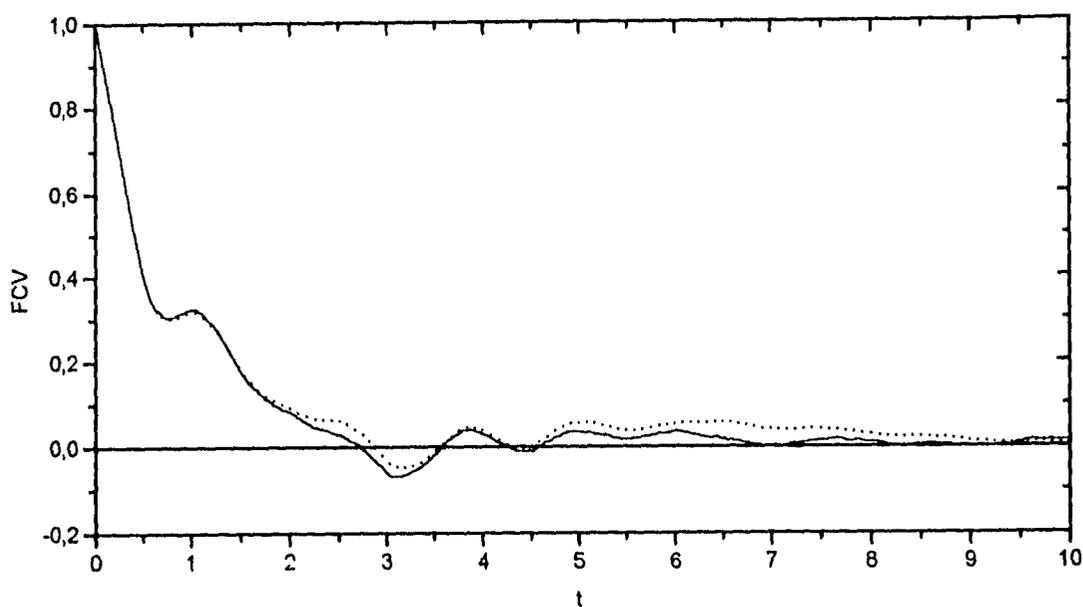


Figura 5.14 Comparación entre las FCV obtenidas para el GLP en un arreglo triangular de discos con horizonte finito, a partir de la ecuación (4.1), promedio temporal (línea continua) y de la ecuación (4.3), promedio temporal (línea punteada).

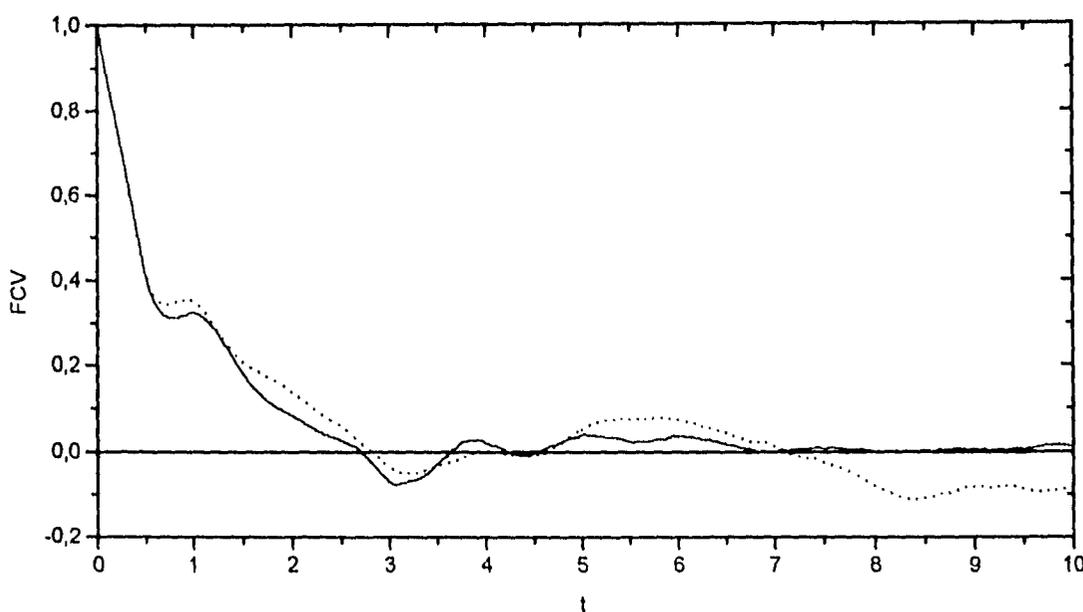


Figura 5.15 Comparación entre las FCV obtenidas para el GLO en un arreglo triangular de discos con horizonte finito,  $\Lambda = 0.0058$  y  $\omega = 1$ , a partir de la ecuación (4.1), promedio temporal (línea continua) y de la ecuación (4.3), promedio espacial (línea punteada).

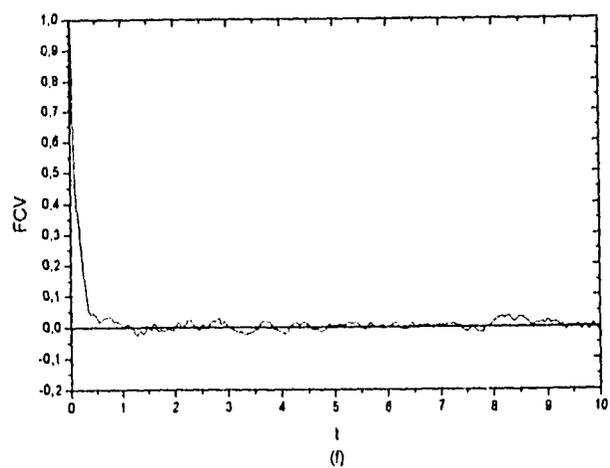
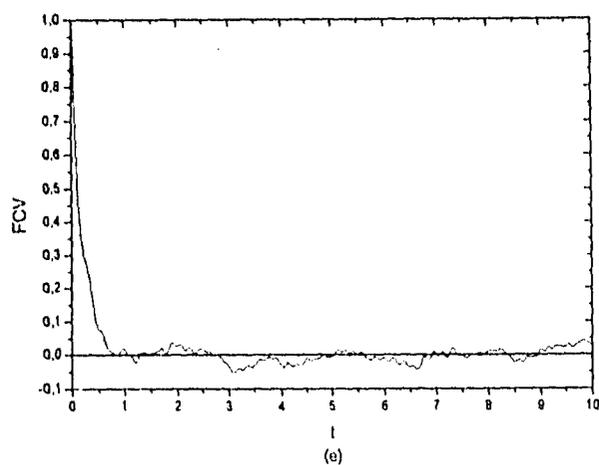
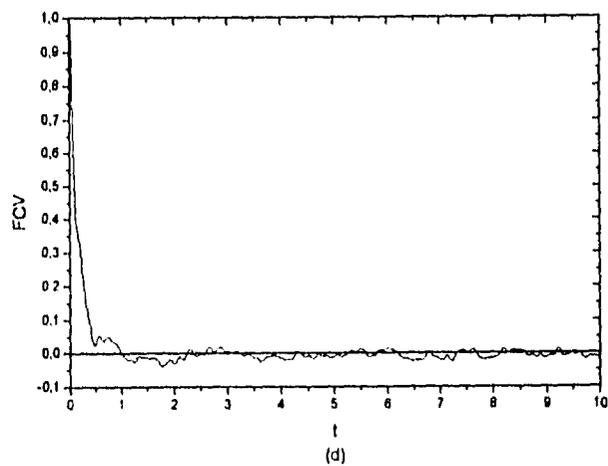
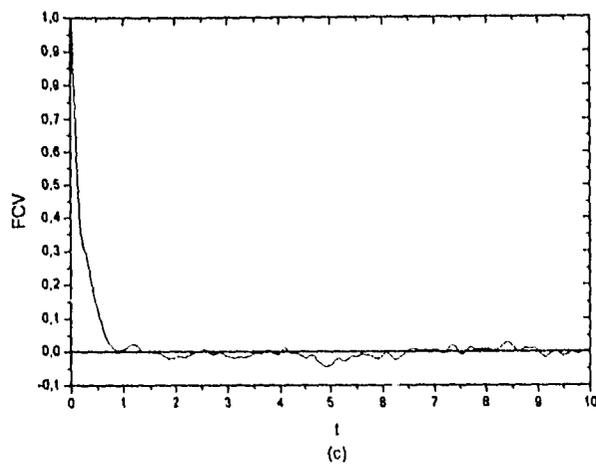
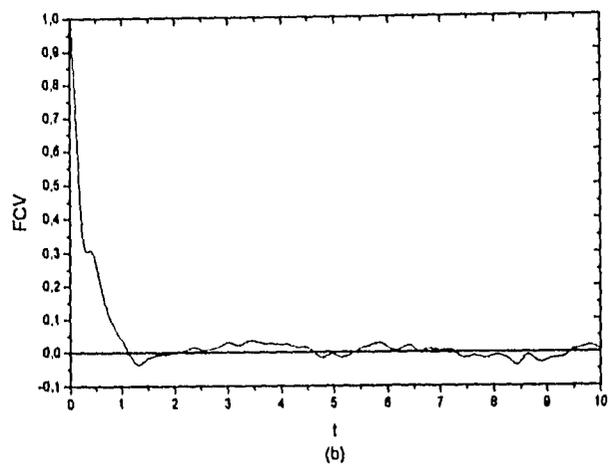
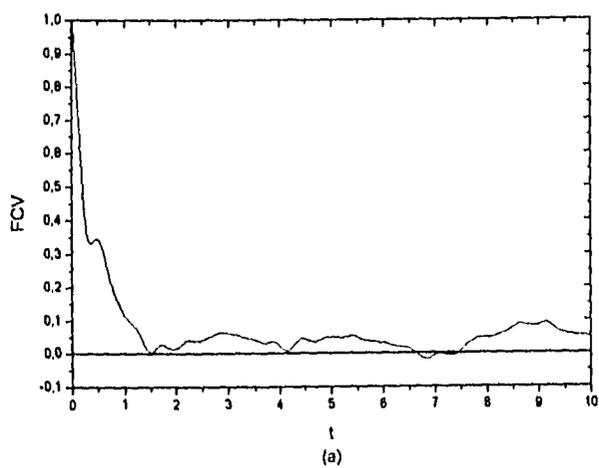


Figura 5.16 FCV para el GLO con un arreglo triangular de discos con horizonte finito y  $\omega = 1$ , en función de la amplitud de oscilación de los discos. (a)  $\Lambda = 0.0058$ ; (b)  $\Lambda = 0.0115$ ; (c)  $\Lambda = 0.0173$ ; (d)  $\Lambda = 0.0231$ ; (e)  $\Lambda = 0.0288$ ; (f)  $\Lambda = 0.0346$ .

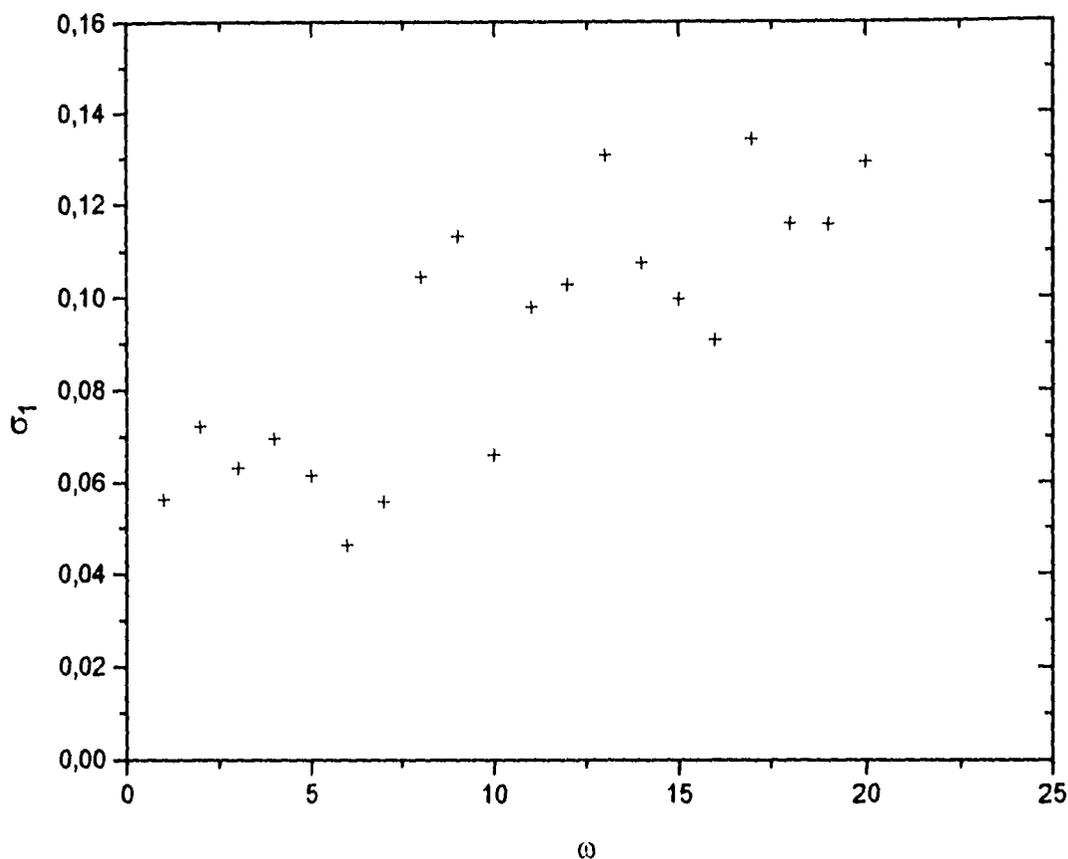


Figura 5.17  $\sigma_1$  el más grande de los exponentes de Liapunov como función de la frecuencia de oscilación de los discos  $\omega$  para un arreglo triangular con horizonte finito,  $A = 0.0058$  y  $R = 0.87$ .

### 5.3 Coeficiente de difusión

Se obtuvo la dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  y  $\langle y^2(t) \rangle$  como función del tiempo para el GLO con un arreglo triangular, en función de la amplitud y frecuencias de oscilación  $A$  y  $\omega$  y del radio  $R$  de los discos. Se usaron las condiciones de fases iguales y aleatorias. Los resultados se presentan en las figuras 5.18 a 5.27. Los parámetros usados en todas estas gráficas se pueden consultar en los pies de figura. En todas estas gráficas se observa que la dispersión crece monótonamente con el tiempo. El resultado de la ecuación (2.8) sólo es válido asintóticamente, es decir, para tiempos largos, por lo que para calcular el coeficiente de difusión a partir de la ecuación (2.8) es necesario tomar sólo los puntos para  $t$  grandes para los cuales

el comportamiento es lineal. Desgraciadamente, este comportamiento no se alcanzó para todos los resultados pues como se puede observar de las mismas figuras, lo que llamamos tiempos largos depende de los parámetros del sistema. Sólo se calculó el coeficiente de difusión a partir de los resultados de las *figuras 5.24 a 5.27*, correspondientes a la condición de fases iguales y para las cuales el comportamiento de la dispersión es lineal. Cabe señalar que el comportamiento no lineal de la dispersión en la mayoría de los casos puede reflejar una difusión distinta a la esperada en el GLO. Los valores de  $D$  se grafican en las *figuras 5.28 y 5.29* en función de la amplitud y de la frecuencia de oscilación de los discos. De estas figuras se observa que el coeficiente de difusión  $D$  crece, con una ley no definida, con la amplitud y con la frecuencia de oscilación de los discos. Éste es el resultado que se esperaba, pues al crecer la frecuencia de los discos aumenta el cambio en la velocidad que la partícula adquiere al chocar con cada disco. Por lo tanto, la partícula puede viajar cada vez más lejos, en tiempos más cortos, cuanta más energía posea. Respecto a la amplitud de oscilación de los discos, el número de choques que la partícula sufre con los discos crece con la amplitud de oscilación de los discos pues la sección eficaz de colisión de los discos aumenta. Es por ello que la difusión aumenta con la amplitud.

Las *figuras 5.18 a 5.21* corresponden a las *figuras 5.24 a 5.27*, pero con condición de fase aleatoria. Dado que la evolución de la dispersión como función del tiempo no se obtuvo de forma lineal, de ellas sólo podemos extraer el resultado cualitativo obtenido para la condición de fases iguales:

La difusión de las partículas crece con la amplitud y frecuencia de oscilación sin importar el tipo de arreglo y condición de las fases de oscilación de los discos.

En las *figuras 5.22 y 5.23*, se grafica la dispersión en la posición en función del tiempo y del radio de los discos. La dispersión en la posición en estas gráficas tiene una peculiaridad no observada en las demás. Cuando el radio de los discos es pequeño comparado con la separación entre ellos la dispersión en la dirección  $x$  es distinta de la dispersión en la dirección  $y$ . Esta diferencia disminuye cuando el radio de los discos crece hasta hacerse ambas dispersiones comparables. La explicación a esta observación debe encontrarse en el hecho de que la oscilación de los discos es sólo en la dirección  $x$ . Para estos resultados, los valores de la amplitud de oscilación

es  $A = 0.0058$  y la frecuencia  $\omega = 1$ . El único parámetro que varía es el radio de los discos  $R$ . Así, al disminuir el radio, la sección eficaz de los discos en la dirección  $y$  disminuye más lentamente que en la dirección  $x$ . Cabe señalar que al disminuir el radio también perdemos la condición de horizonte finito por lo que la difusión de partículas puede aumentar.

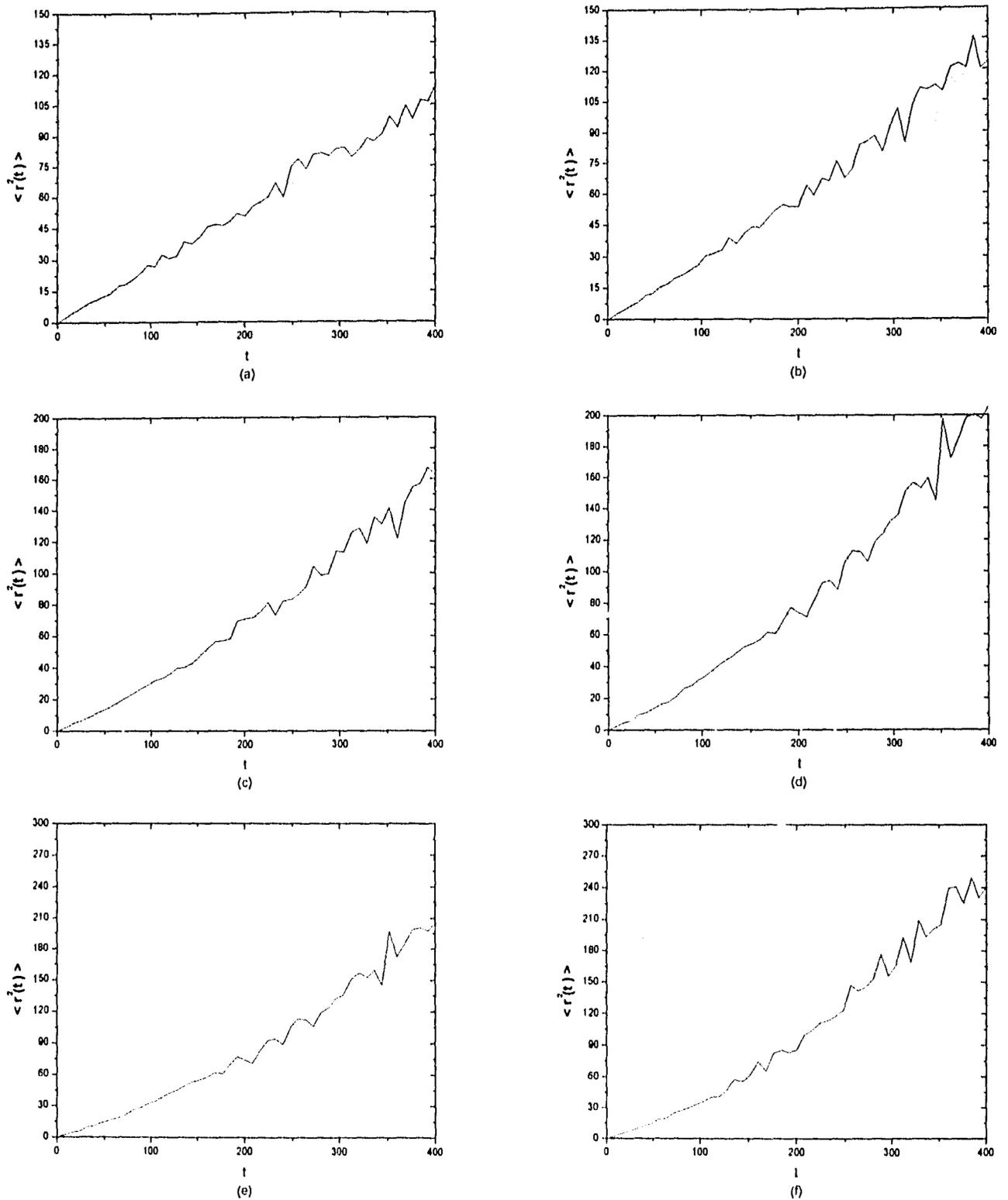


Figura 5.18 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $\Lambda$ , la amplitud de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte fínito y fases de oscilación aleatorias.  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $\Lambda = 0$ ; (b)  $\Lambda = 0.0058$ ; (c)  $\Lambda = 0.0115$ ; (d)  $\Lambda = 0.0173$ ; (e)  $\Lambda = 0.0231$ ; (f)  $\Lambda = 0.0288$ .

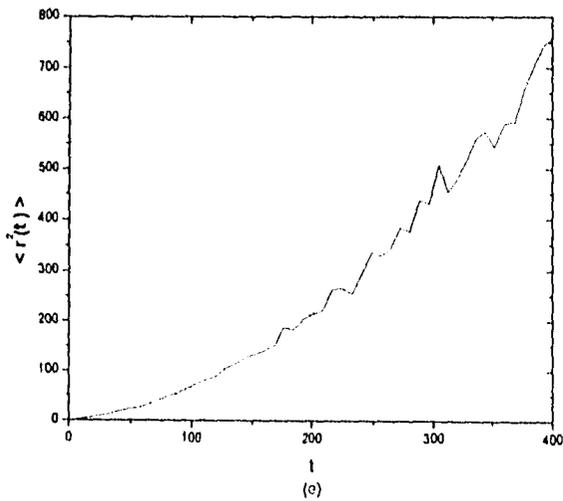
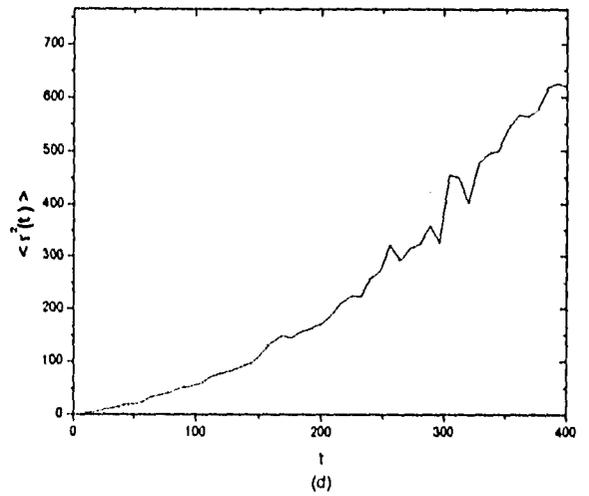
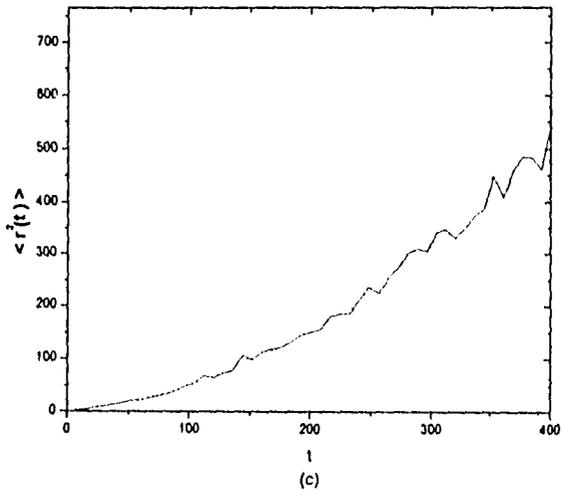
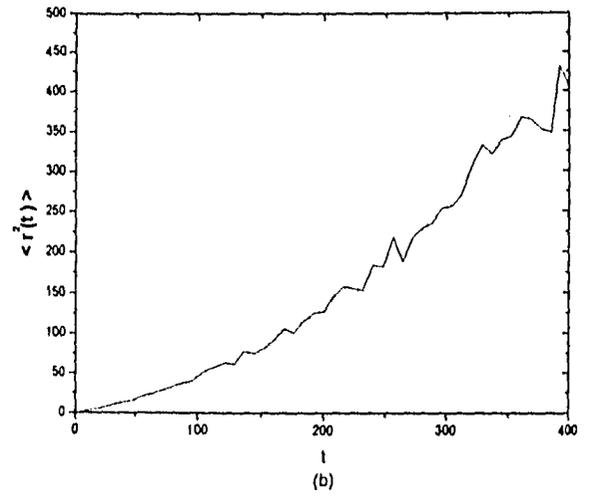
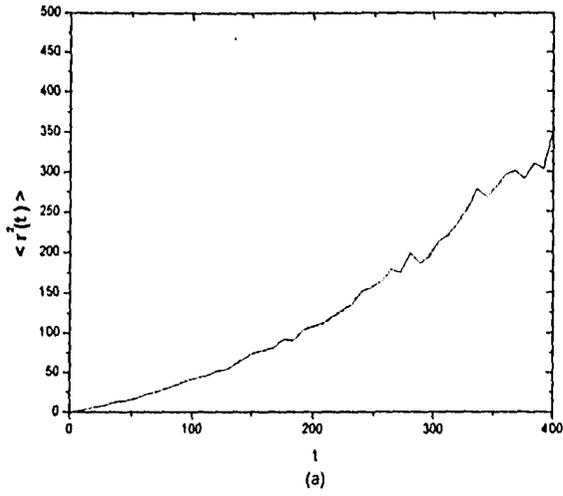


Figura 5.19 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle r^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $A$ , la amplitud de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación aleatorias.  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $A = 0.0346$ ; (b)  $A = 0.0404$ ; (c)  $A = 0.0462$ ; (d)  $A = 0.0519$ ; (e)  $A = 0.0577$ .

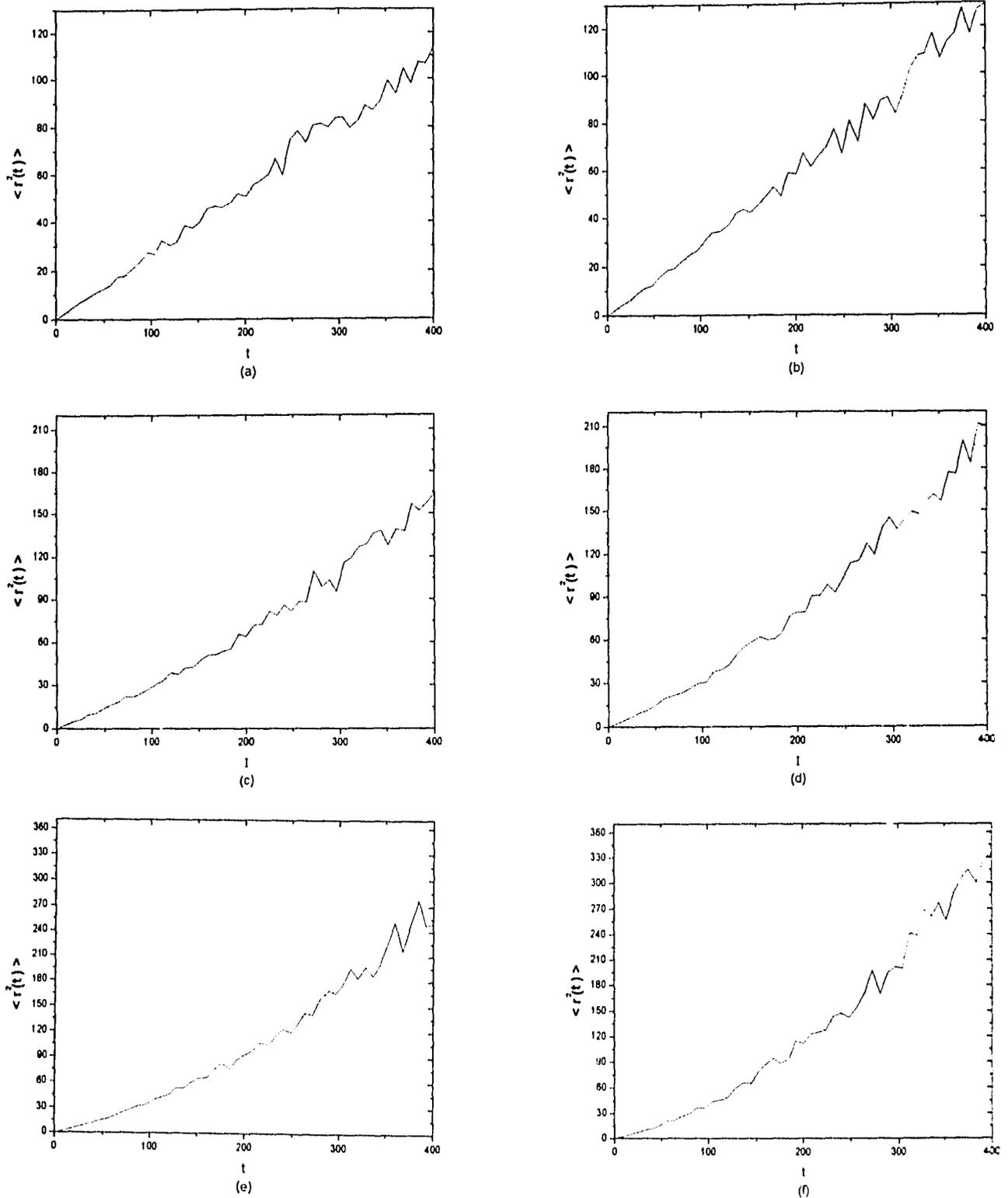


Figura 5.20 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $\omega$ , la frecuencia de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación aleatorias.  $\Lambda = 0.0058$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $\omega = 0$ ; (b)  $\omega = 1$ ; (c)  $\omega = 2$ ; (d)  $\omega = 3$ ; (e)  $\omega = 4$ ; (f)  $\omega = 5$ .

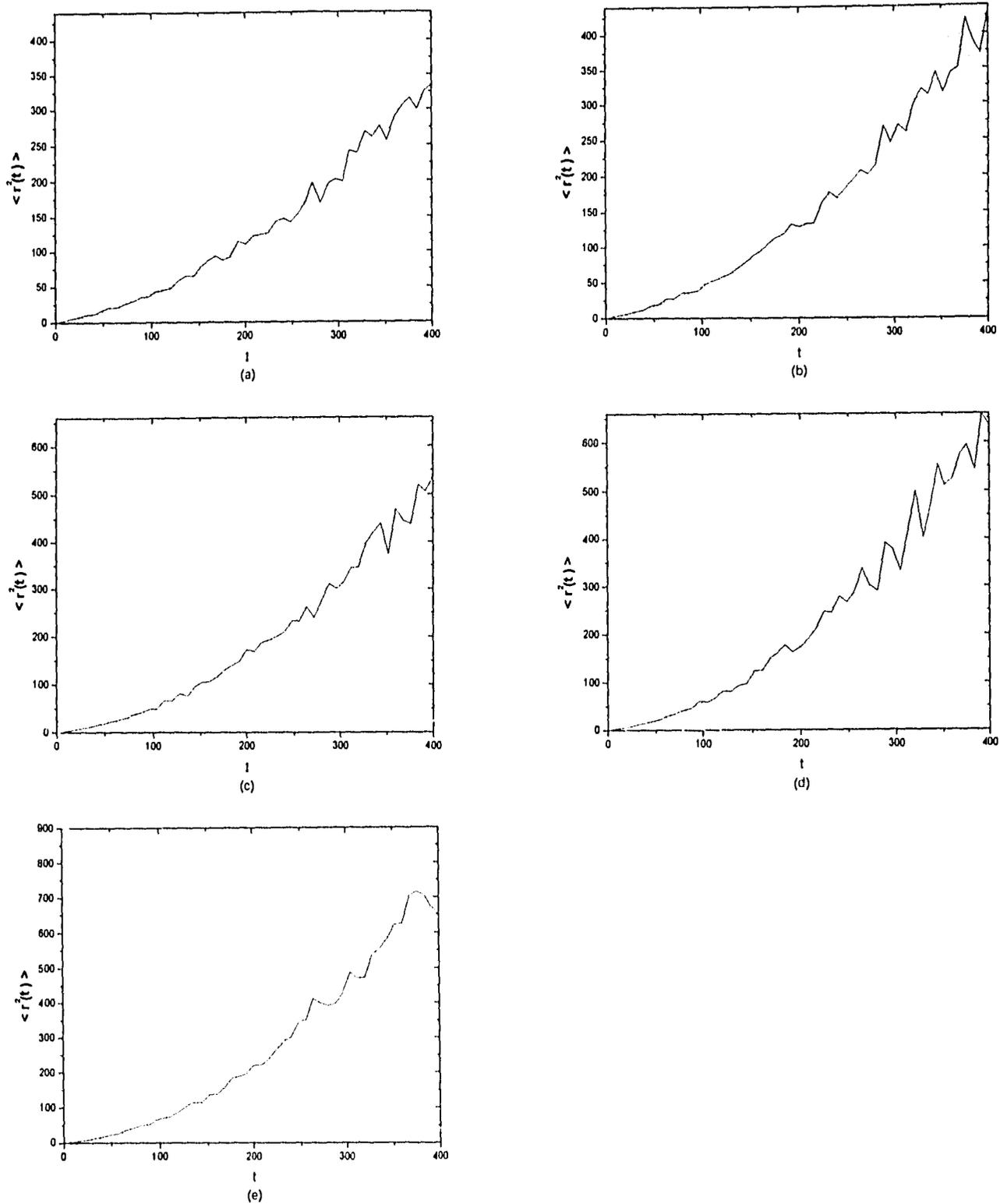


Figura 5.21 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $\omega$ , la frecuencia de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación aleatorias.  $\Lambda = 0.0058$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $\omega = 6$ ; (b)  $\omega = 7$ ; (c)  $\omega = 8$ ; (d)  $\omega = 9$ ; (e)  $\omega = 10$ .

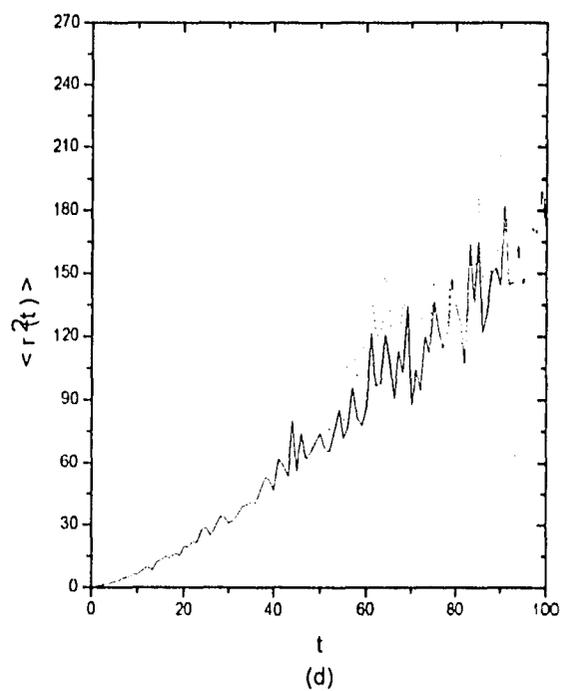
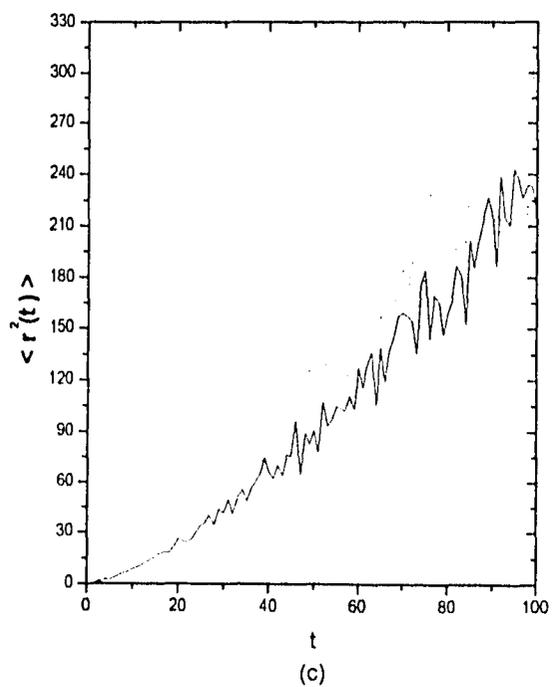
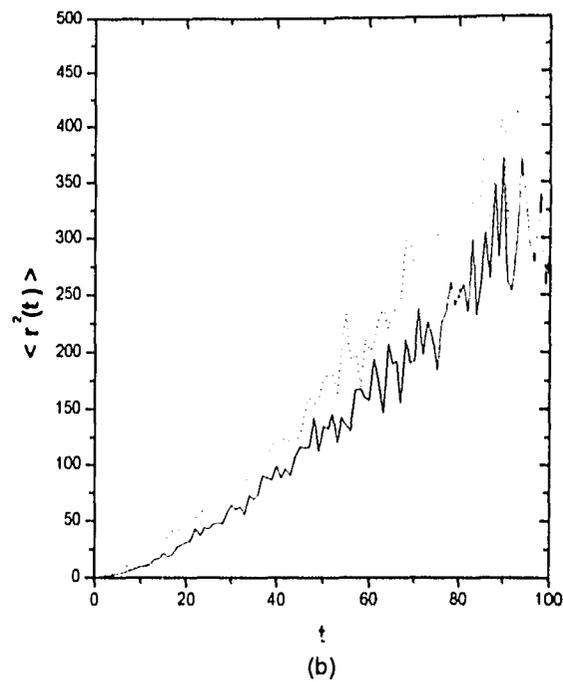
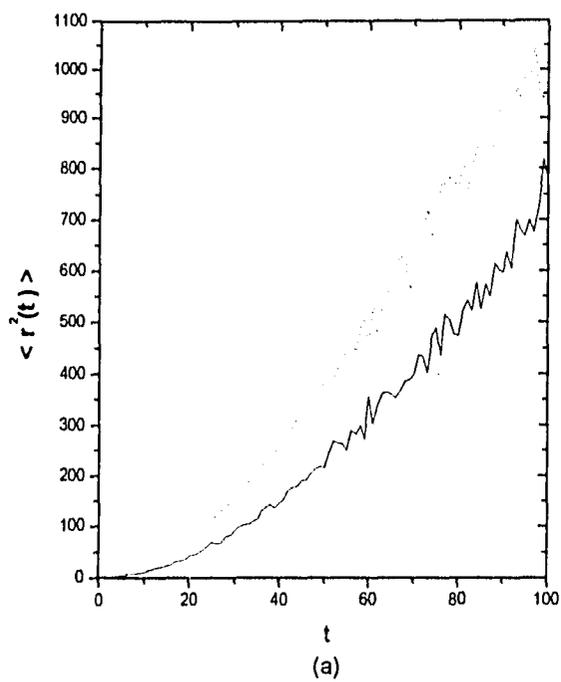


Figura 5.22 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $R$ , el radio de los discos. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación aleatorias.  $A = 0.0058$  y  $\omega = 1$ ; (a)  $R = 0.0577$ ; (b)  $R = 0.1732$ ; (c)  $R = 0.2886$ ; (d)  $R = 0.4041$ .

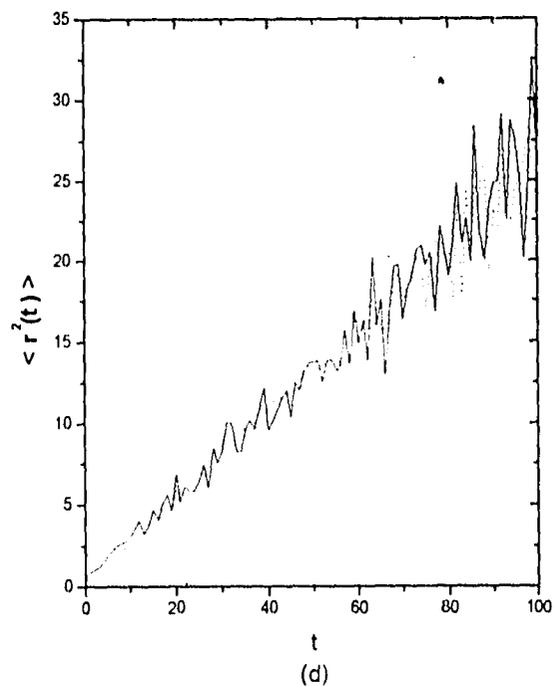
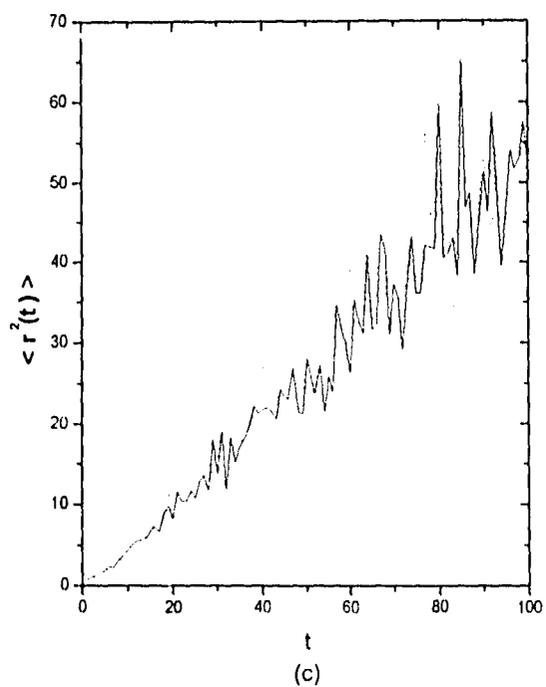
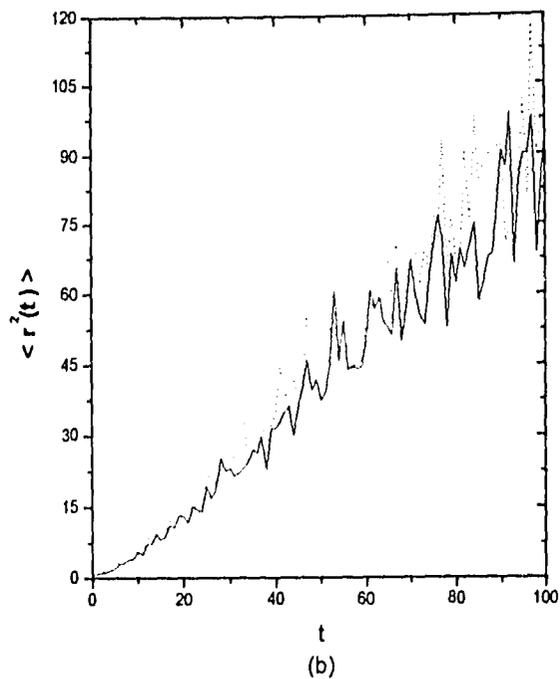
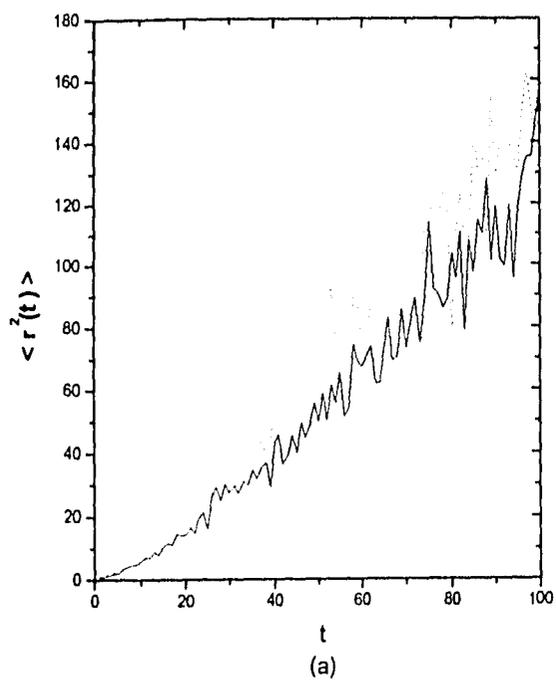


Figura 5.23 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $R$ , el radio de los discos. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación aleatorias.  $A = 0.0058$  y  $\omega = 1$ ; (a)  $R = 0.5196$ ; (b)  $R = 0.6351$ ; (c)  $R = 0.7505$ ; (d)  $R = 0.8660$ .

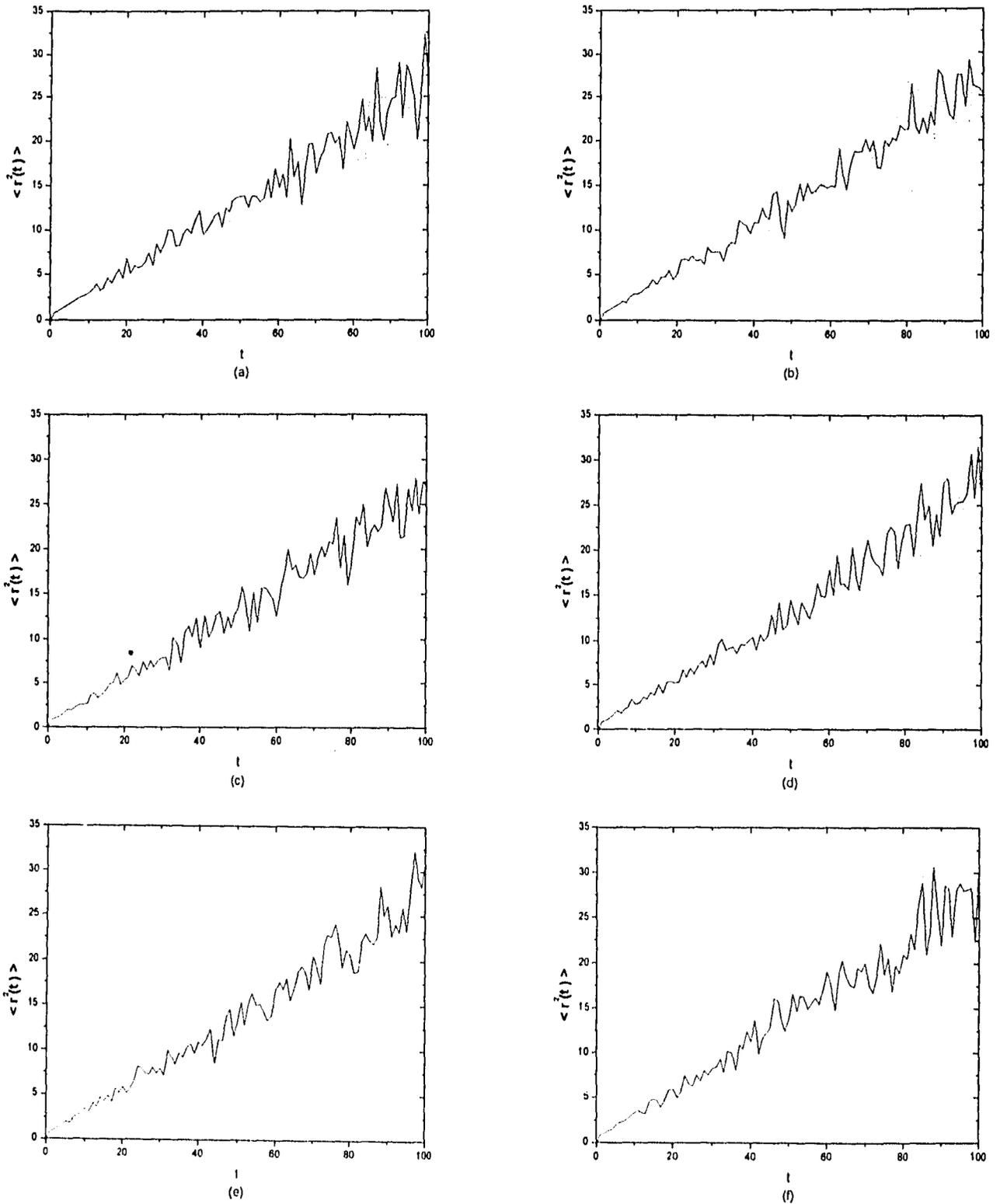


Figura 5.24 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $\Lambda$ , la amplitud de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación iguales.  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $\Lambda = 0.0058$ ; (b)  $\Lambda = 0.0115$ ; (c)  $\Lambda = 0.0173$ ; (d)  $\Lambda = 0.0231$ ; (e)  $\Lambda = 0.0288$ ; (f)  $\Lambda = 0.0346$ .

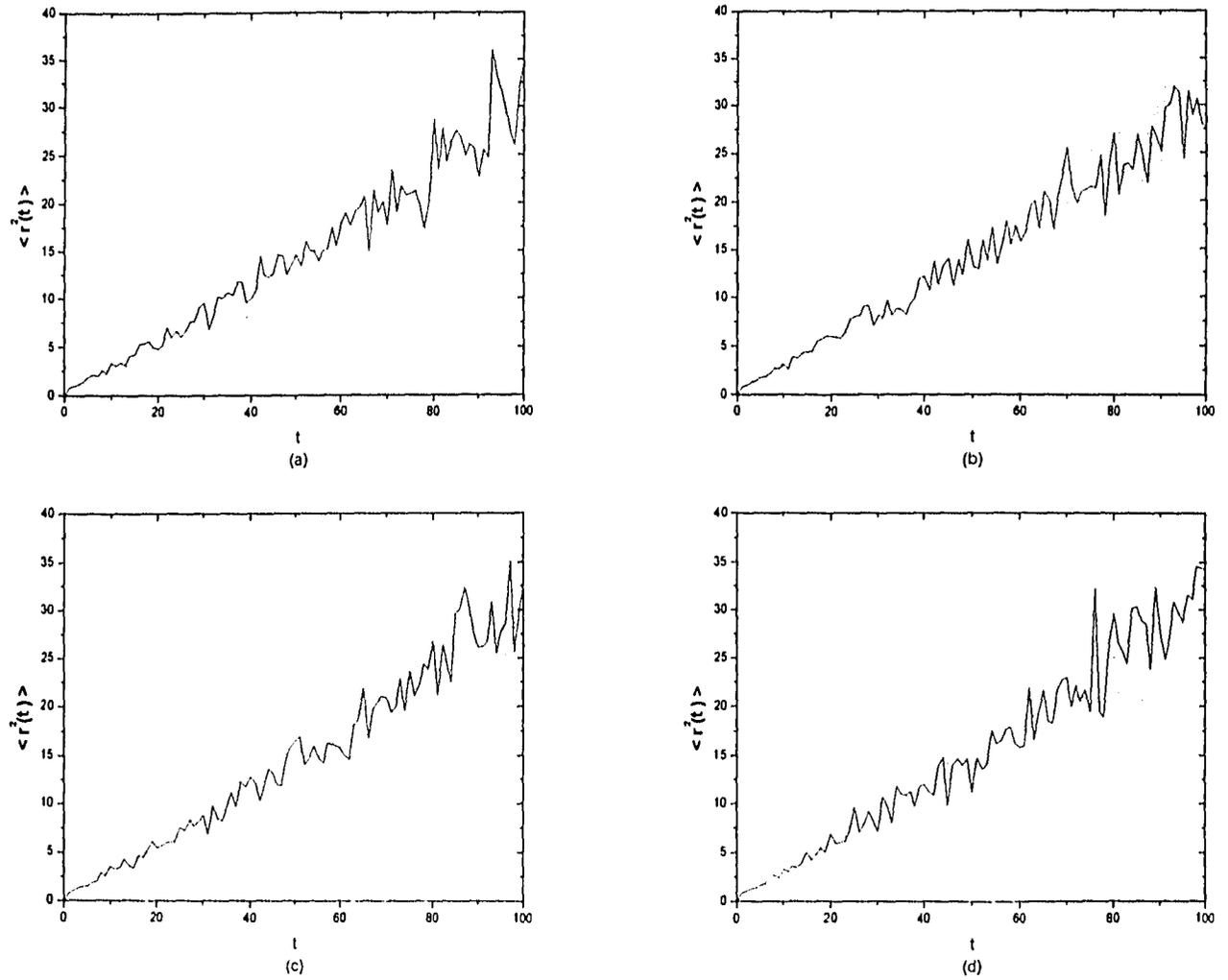


Figura 5.25 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $A$ , la amplitud de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación iguales.  $\omega = 1$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $A = 0.0404$ ; (b)  $A = 0.0462$ ; (c)  $A = 0.0519$ ; (d)  $A = 0.0577$ .

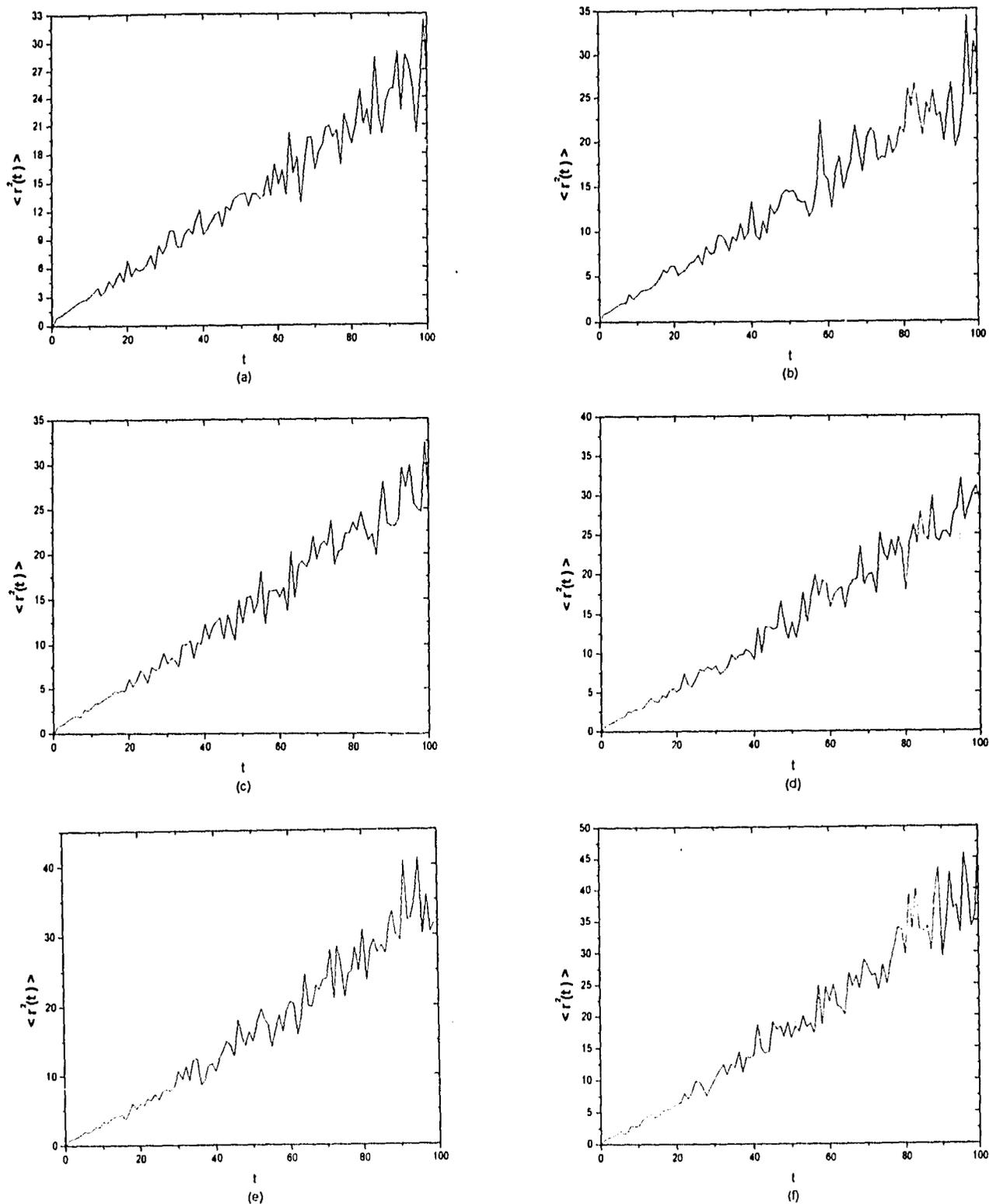


Figura 5.26 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $\omega$ , la frecuencia de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación iguales.  $A = 0.0058$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $\omega = 1$ ; (b)  $\omega = 2$ ; (c)  $\omega = 3$ ; (d)  $\omega = 4$ ; (e)  $\omega = 5$ ; (f)  $\omega = 6$ .

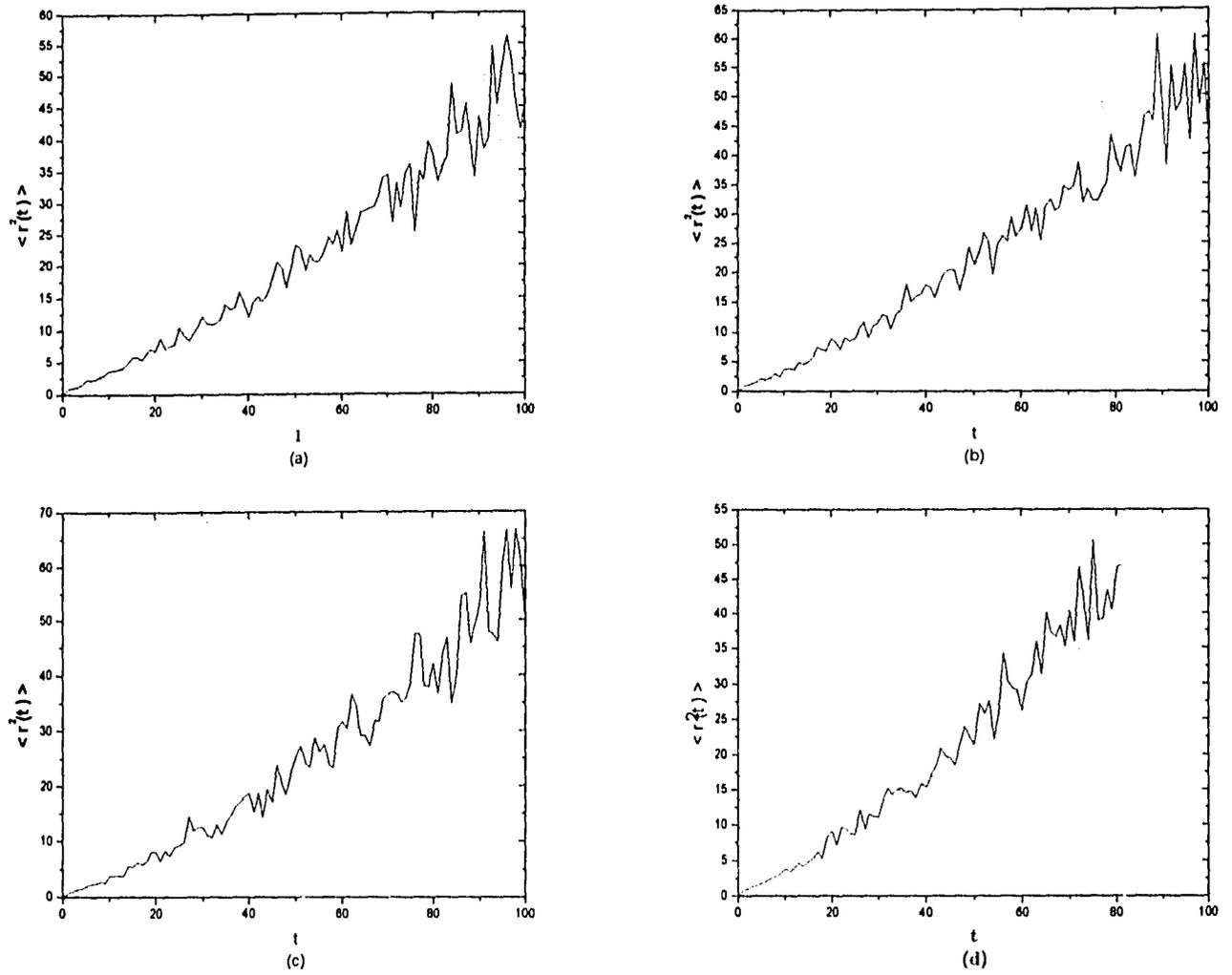


Figura 5.27 Dispersión en la posición de las partículas  $\langle x^2(t) \rangle$  (línea continua) y  $\langle y^2(t) \rangle$  (línea punteada) como función del tiempo y de  $\omega$ , la frecuencia de oscilación. El arreglo es triangular con horizonte finito y fases de oscilación iguales.  $A = 0.0058$  y  $R = 0.87$ ; (a)  $\omega = 7$ ; (b)  $\omega = 8$ ; (c)  $\omega = 9$ ; (d)  $\omega = 10$ .

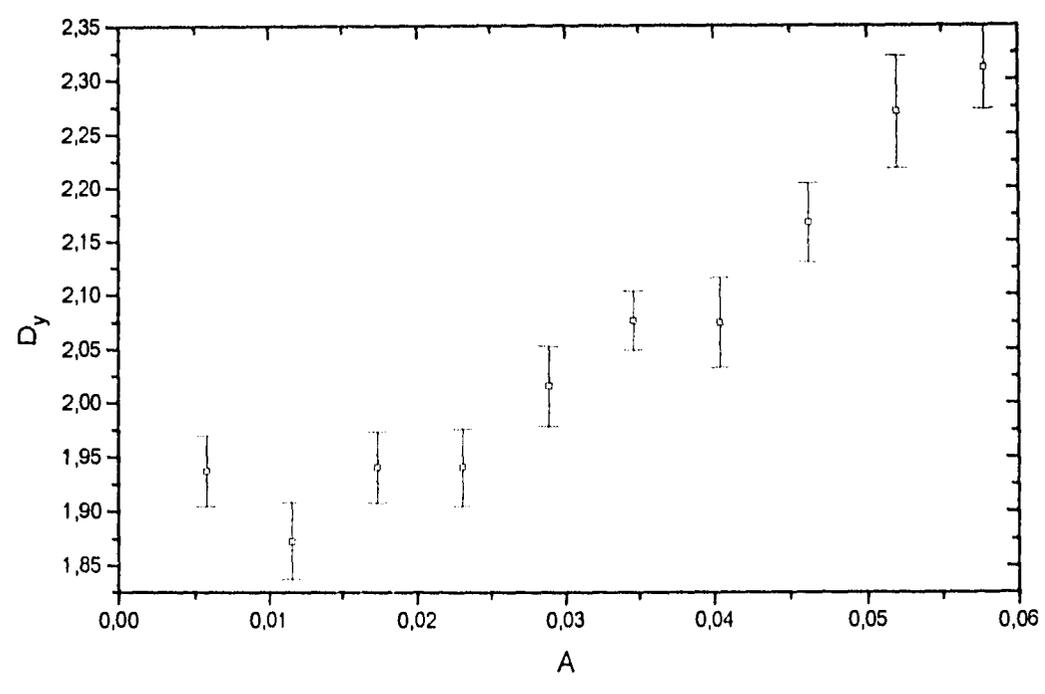
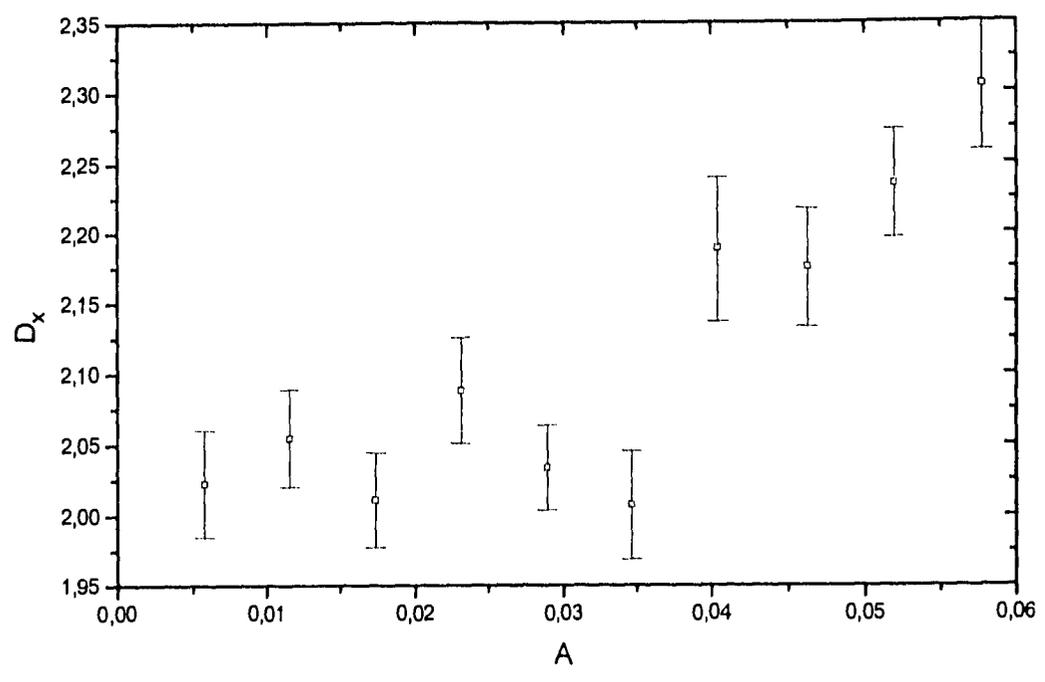


Figura 5.28 Coeficiente de difusión en las direcciones x y y ( $D_x$  y  $D_y$  respectivamente) como función de la amplitud de oscilación de los discos A, obtenido a partir de los resultados de las figuras 5.24 y 5.25 .

ESTA TESIS NO DEBE  
SALIR DE LA BIBLIOTECA

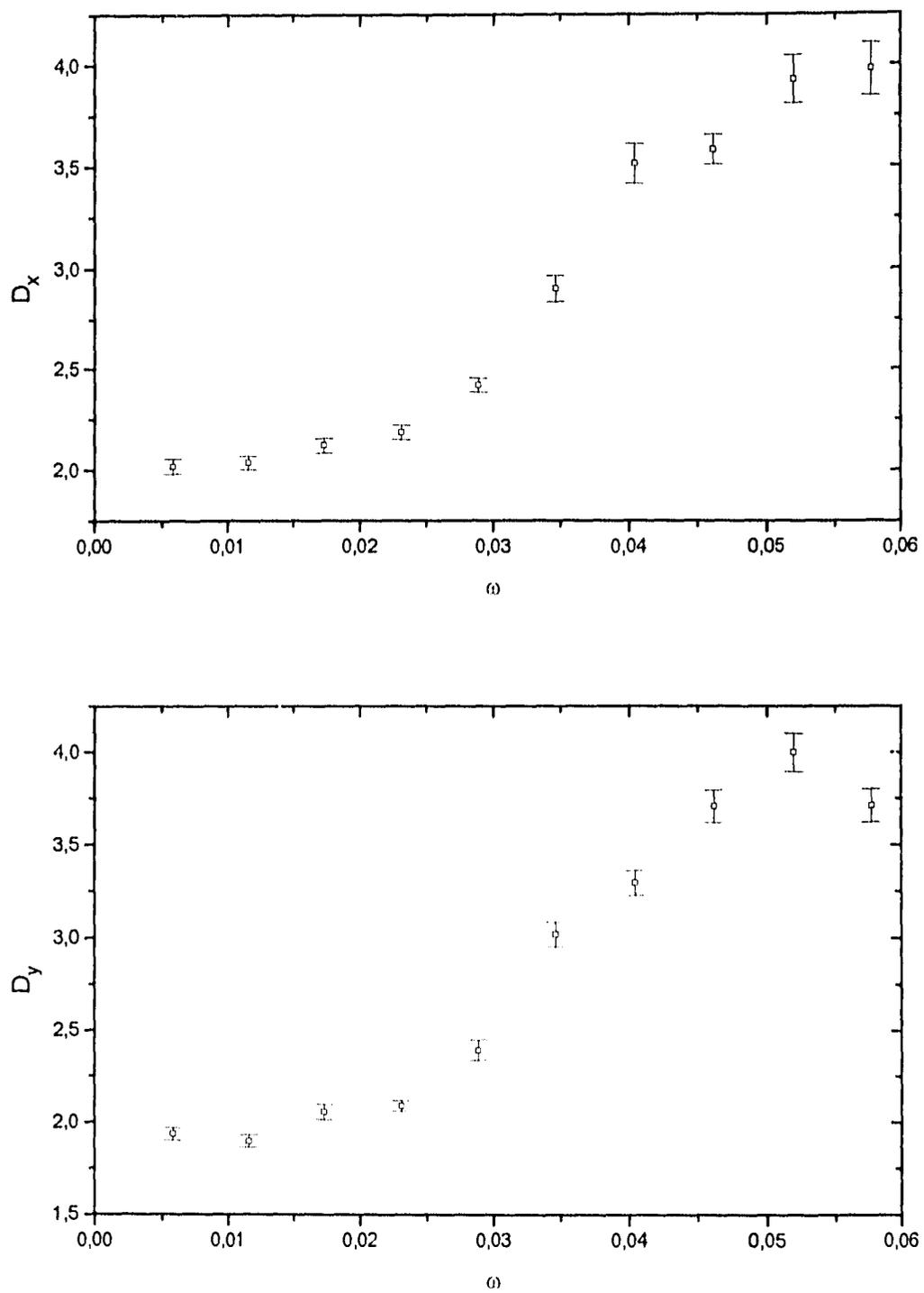


Figura 5.29 Coeficiente de difusión en las direcciones  $x$  y  $y$  ( $D_x$  y  $D_y$  respectivamente) como función de la frecuencia de oscilación de los discos  $\omega$ , obtenido a partir de los resultados de las figuras 5.26 y 5.27 .

## Capítulo 6

### Conclusiones

En este trabajo se caracterizó al modelo del gas de Lorentz Oscilante como un sistema fuertemente dependiente de las condiciones iniciales y probablemente ergódico. Como se observa en la *figura 5.17*, en la cual se grafica  $\sigma_1$  en función de  $\omega$ , el carácter dinámico del GLO varía con los parámetros del sistema. Así también, se obtuvo que el coeficiente de difusión  $D$  aumenta con  $\omega$ . Esto nos habla de la gran influencia que tiene la divergencia exponencial entre trayectorias (que refleja el carácter caótico del sistema) en la difusión de partículas.

El objetivo original fue estudiar la difusión de electrones en un metal a temperatura  $T \neq 0$  mediante un modelo clásico que hemos llamado gas de Lorentz oscilante. Recordemos que la oscilación de los núcleos atómicos en el metal influye en la difusión de los electrones. Sin embargo, en el sistema real, que es cuántico, tal difusión es infinita cuando se trata de electrones en una red periódica. Es entonces que nos preguntamos que tanto reflejan los resultados aquí obtenidos el comportamiento físico del sistema real. En los casos en los que las fases de oscilación de los discos son aleatorias, la periodicidad de la red se pierde, por lo que en este caso, el GLO si representa un modelo que es la contraparte clásica al problema real de la difusión de electrones en un metal. Ahora, en el caso en el que las fases de oscilación de los discos son iguales, la periodicidad en la red prevalece y entonces, los resultados obtenidos no se pueden aplicar al problema real aún cuando los resultados, para ambas condiciones sobre las fases de oscilación, son similares.

Un modelo como el aquí introducido puede simular, en general, la difusión de partículas ligeras en una red de núcleos pesados que pueda ser tratada clásicamente. Aquí se encuentran por ejemplo, la difusión de neutrones en Carbón o la difusión de Hidrógeno en Paladio.

Se obtuvieron secciones del espacio fase del GLO para distintos parámetros del sistema y se observó en algunas partes de las secciones un comportamiento aparentemente ergódico. También se observó que las partículas en el GLO tienden a termalizarse, esto es, su energía alcanza, aparentemente un valor medio.

Se obtuvo la función de auto-correlación de la velocidad tanto para el GLP como para el GLO usando promedios temporales y espaciales. Los resultados nos sugieren que el GLO es un sistema ergódico.

Finalmente se obtuvo la dispersión en la posición de las partículas en función del tiempo y de la amplitud de oscilación, frecuencia de oscilación y radio de los discos. De algunos de estos resultados se calculó el coeficiente de difusión  $D$ . Para el modelo del GLO la difusión de las partículas depende fuertemente de la energía cinética de vibración de los discos, esto es, la difusión crece con el aumento de la frecuencia y también de la amplitud de oscilación de los discos.

Extraños resultados se observaron en la dependencia de la dispersión en la posición de las partículas como función del radio de los discos. Presumiblemente, este comportamiento es atribuible a la pérdida del horizonte finito en estos cálculos.

Algunos temas relacionados, no tratados aquí son de gran interés. Cuando la condición de horizonte finito se pierde, existen ciertos parámetros para los cuales la dispersión en la posición en direcciones distintas no es la misma. Es importante analizar la relación que estos dos hechos guardan entre sí, para así encontrar bajo qué condiciones es posible la existencia del coeficiente de difusión para un horizonte infinito.

Una generalización más puede ser hecha al GLO: permitir una oscilación también en la dirección  $y$ . Para un modelo tal, existen trayectorias en las cuales, las partículas pueden quedar atrapadas por la propia oscilación de los discos afectando así la difusión normal. Este hecho depende de las amplitudes de oscilación de los discos en ambas direcciones.

## Bibliografía

- [1] Lorentz, H. A., (1905), Proc. Amst. Acad., **7**, 438
- [2] Hauge, E. H. (1974) **What Can One Learn from Lorentz Models?** en Lecture Notes in Physics, Vol.31, p. 337 (Springer-Verlag)
- [3] Beijeren, H., (1982), **Transport Properties of Stochastic Lorentz Models**, Rev. Mod. Phys., **54**, 195
- [4] Cohen-Tannoudji, C., B. Diu, F. Laloë, (1977) **Quantum Mechanics**, Vol. II, p. 633, (Willey-Interscience)
- [5] Sinai, Ya. G., (1970), Usp. Mat. Nauk., **25**, 141
- [6] Fermi, E., (1949), **On the Origin of the Cosmic Radiation**, Phys. Rev., **75**, 1169
- [7] Gaspard, P., S. A. Rice (1989), **Scattering from a Classically Chaotic Repellor**, J. Chem. Phys., **90**, 2225
- [8] Jackson, E. A., (1992), **Perspectives of Nonlinear Dynamics**, (Cambridge U. Press)
- [9] Jung, C., H. J. Scholz, (1987), **Cantor Set Structures in the Singularities of Classical Potential Scattering**, J. Phys A, **20** 3607
- [10] Korsch, H. J., A. Wagner, (1991) **Fractal Mirror Images and Chaotic Scattering**, Comp. Phys.

- [11] Bleher, S., C. Grebogi, E. Ott, (1990), **Bifurcation to Chaotic Scattering**. Physica D, **45**, 87
- [12] José, J. V., C. Rojas, E. J. Saletan, (1992), **Elastic Particle Scattering from Two Hard Disks**, Am. J. Phys., **60**, 587
- [13] Lichtenberg, A.J., M. A. Lieberman, (1992), **Regular and Chaotic Dynamics**. 2<sup>o</sup> ed., en Applied Mathematical Sciences, Vol.38, (Springer - Verlag)
- [14] Kubo, R., (1958) en Lectures in Theoretical Physics, Vol.1, p. 120, (New York: Wiley)
- [15] McQuarrie, D.A., (1976), **Statistical Mechanics**, (Harper & Row)
- [16] Brahic, A., (1971), **Numerical Study of a Simple Dynamical System**. Astron. AstroPhys., **12**, 98
- [17] Lieberman, M. A., A. J. Lichtenberg, (1972), **Stochastic and Adiabatic Behavior of Particles Accelerated by Periodic Forces**, Phys. Rev. A, **5**, 1852
- [18] Machta, J., R. Zwanzig, (1983), **Diffusion in a Periodic Lorentz Gas**, Phys. Rev. Lett., **50**, 1959
- [19] Cvitanovic, P., P. Gaspard, T. Schreiber, (1992), **Investigation of the Lorentz Gas in terms of Periodic Orbits**, CHAOS, **2**, 85
- [20] Bunimovich, L., Ya. G. Sinai, (1980), **Markov Partition for Dispersed Billiard**, Commun. Math. Phys., **78**, 247, 479
- [21] Gallavotti, G., (1975), **Lectures on the Billiard**, en Lecture Notes in Physics. Vol. 38, p. 236 (Springer, Berlin)
- [22] Gaspard, P., G. Nicolis, (1990), **Transport Properties, Lyapunov Exponents and Entropy per Unit Time**, Phys. Rev. Lett., **65**, 1693
- [23] Landau, L. D., E. M. Lifshitz, (1969), **Física Estadística**, (Reverte)