

Panel P1 :

CAOS EN UN MODELO DE ENLACES ESTOCÁSTICO

L. Acedo

*Departamento de Física, Universidad de Extremadura,
E-06071 Badajoz.*

M. H. Ernst

*Institute for Theoretical Physics, Utrecht University,
P.O. Box 80006, 3508 TA Utrecht, Holanda.*

Recientemente se han estudiado las conexiones entre la mecánica estadística del no equilibrio y la teoría de sistemas dinámicos usando modelos simples como los gases de Lorentz reticulares. En este trabajo se estudian, tanto analítica como numéricamente, las propiedades caóticas de un modelo de enlaces estocástico con desorden estático. Se deriva una expresión, exacta en el límite termodinámico, para el exponente de Lyapunov de un sistema cerrado y se dan estimaciones de la razón de escape y el exponente de Lyapunov en un sistema con fronteras absorbentes de acuerdo con una teoría de campo medio. Estas expresiones analíticas se comparan con resultados de simulación para un amplio rango de densidad de impurezas y probabilidades de transición a través de las mismas. Los resultados de simulación están de acuerdo con las predicciones de la teoría de campo medio exceptuando aquellos sistemas en los que la probabilidad de transición a través de las impurezas es muy baja, donde el efecto de las correlaciones es, previsiblemente, más importante.

Panel P2 :

SIMULACIÓN DE SISTEMAS CON CARGAS MEDIANTE POTENCIALES EFECTIVOS

Noé G. Almarza y E. Enciso

*Departamento de Química Física I. Facultad de Ciencias Químicas.
Universidad Complutense de Madrid. 28040 Madrid*

La simulación mediante Dinámica Molecular o Monte Carlo de modelos que incluyen interacciones electrostáticas entre partículas requiere, por el largo alcance del potencial, la adecuada evaluación de las interacciones entre todas las imágenes periódicas del sistema.

El procedimiento habitual para evaluar las fuerzas que actúan sobre las partículas y la energía potencial es el llamado *Método de Ewald*.

En este trabajo se analiza la posibilidad de simplificar el cálculo de las interacciones entre cargas puntuales mediante la parametrización adecuada de potenciales efectivos definidos sobre las *imágenes mínimas* de los distintos pares de partículas.

Panel P3 :

MECANICA ESTADISTICA DE CADENAS MOLECULARES BASADA EN LA MECANICA CUANTICA

R.F. Alvarez-Estrada

*Departamento de Física Teórica I, Facultad de Ciencias Físicas,
Universidad Complutense,
28040- Madrid*

Se considera una cadena molecular tridimensional abierta, formada por N átomos. Por hipótesis, entre cada dos átomos consecutivos hay un potencial tipo oscilador armónico: este último, para alta frecuencia (ω) fuerza a que la distancia entre dichos átomos tienda a una constante ("bond length"). La descripción de la cadena es mecano-cuántica (es decir, mediante operadores posición y momento que satisfacen las reglas de conmutación habituales). Suponiendo que la cadena molecular está en equilibrio termodinámico, una aplicación de la desigualdad de Peierls ha conducido (para $\omega \rightarrow \infty$), en trabajos previos [1], a un nuevo hamiltoniano efectivo H para bajas energías: una propiedad importante de H es que solamente depende de variables angulares y no de las distancias entre átomos consecutivos. En el trabajo actual, se ha efectuado una nueva deducción del hamiltoniano efectivo H , que no tiene carácter variacional. El método presente se basa en la teoría de perturbaciones, adecuadamente formulada para el régimen de altas frecuencias ($\omega \rightarrow \infty$). El estudio indica que H describe la dinámica de baja energía de la cadena para tiempos suficientemente largos: algunas estimaciones para éstos han sido obtenidas. Una vez obtenido H con un fundamento mecano-cuántico, se puede utilizar para estudiar la mecánica estadística de la cadena (con N grande) en diversos regímenes. En particular, se ha analizado en detalle la función de partición, Z_c , de la cadena en el rango de validez de la Estadística Clásica. Se han obtenido algunas expresiones aproximadas para Z_c y se han comparado con las correspondientes a otros modelos para cadenas moleculares (basados directamente en la Mecánica Clásica).

[1] R.F. Alvarez-Estrada, *Macromolecular Theory and Simulations* **3**, 479 (1994); **4**, 367 (1995), Erratum **4**, 1127 (1995).

Comunicación Oral **Viernes 24, 12h45 - 13h :**

**EFFECTOS DE LAS FLUCTUACIONES EXTERNAS EN LA
PROPAGACION DE FRENTE**

J. Armero¹, J.M. Sancho¹, J. Casademunt¹,
A.M. Lacasta², L. Ramírez-Piscina² y F. Sagués³

¹*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de
Barcelona,*

Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona.

²*Departament de Física Aplicada, Universitat Politècnica de Catalunya,
Av. Dr. Gregorio Marañón 50, 08028 Barcelona.*

³*Departament de Química Física, Universitat de Barcelona,
Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona.*

Hemos estudiado los efectos que produce el ruido externo en un modelo unidimensional de propagación de frentes. El ruido es introducido a través de fluctuaciones espaciotemporales de un parámetro de control dando lugar a una ecuación estocástica en derivadas parciales con ruido multiplicativo. Hemos obtenido resultados analíticos y numéricos para la forma, la velocidad y la dispersión en la posición del frente. Presentamos resultados sobre los diferentes dominios de estabilidad de los frentes (regímenes metastable, no lineal y lineal) y su modificación en presencia del ruido externo. En particular, concluimos que la teoría de estabilidad marginal lineal incrementa su dominio de validez en presencia del ruido externo. Asimismo, encontramos que el ruido estabiliza frentes que no serían estables en el caso determinista.

Panel **P4** :

**ESTUDIOS NUMERICOS DE LA PROPAGACION DE
FRENTE EN SOLIDIFICACION DIRECCIONAL**

Joan Armero¹, Jaume Casademunt¹ y Jordi Viñals²

¹*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de
Barcelona,*

Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona.

²*Supercomputer Computations Research Institute, Florida State University,
Tallahassee, FL 32306-4052.*

Presentamos un algoritmo numérico para el estudio de la dinámica de interfaces inestables. En particular, aplicamos el algoritmo al estudio de un modelo simple “one-sided” de solidificación direccional. La precisión del algoritmo es estimada y controlada evaluando el crecimiento de perturbaciones periódicas de pequeña amplitud y comparando los resultados con la relación lineal de dispersión del modelo teórico. Finalmente, centramos nuestro estudio en la evaluación numérica de la velocidad de propagación de la estructura celular. Obtenemos que nuestros resultados se ajustan con detalle a la predicción dada por la teoría de estabilidad marginal lineal para un amplio rango de los diferentes parámetros del modelo.

Panel **P5** :

Quantum Statistical Model. Analytical form of relativistic wave functions and energy levels for self-consistent fields in high-temperature plasmas.

J.C. Arvesú¹ and V.G. Novikov and A.F. Nikiforov and A.D. Solomiannaya.

M. V. Keldysh Institut of Applied Mathematics, Academy of Sciences of Russia, Miusskaya pl. 4, SU-125047 Moscow.

It is shown that in high-temperature plasmas the wave functions of the electrons in bound and free states, suitable to a relativistic solution of the problem (equation of Dirac), including high Z -values, take hydrogenic forms, depending only on two-parameters, effective charge Z_{nlj} and screening constant A_{nlj} , permitting give to the mentioned wave functions analytical form. In turn Z_{nlj} and A_{nlj} values determine parametric potential in which move each electron, facilitating thus a generalized representation of Hartree. Comparisons to previous non relativistic method and numerical solutions for Dirac and Schrödinger's equations with diferent Z -values are presented.

¹Departamento de Matemáticas. Escuela Politécnica Superior. Universidad Carlos III de Madrid. Butarque 15, 28911, Leganés, Madrid. Spain.

Panel **P6** :

CAOS EN VIBRACIONES MOLECULARES

R.M. Benito

*Universidad Politécnica de Madrid. Departamento de Física y Mecánica.
E.T.S.I. Agrónomos.
28040 Madrid.*

F. Borondo y A. Zembekov

*Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química, C-IX.
Cantoblanco. 28049 Madrid.*

En los últimos años se está dedicando un gran esfuerzo al estudio y caracterización del comportamiento caótico que presentan diversos sistemas pertenecientes a campos muy variados como láseres, reacciones químicas, biología, ecología, circuitos electrónicos, fluidos, economía, vibraciones moleculares, etc. Nosotros hemos realizado un estudio de la dinámica vibracional de los sistemas moleculares X-CN (X= Li, K, H) que presentan un movimiento de gran amplitud en la coordenada de baja frecuencia, lo que hace que a energías relativamente bajas muestren grandes zonas del espacio de fases disponible y el comportamiento caótico aparece muy pronto. La estructura del espacio de fases de estos sistemas se puede comprender desde el punto de vista clásico en términos del teorema KAM. Hemos estudiado la estructura del espacio de fases clásico de estos sistemas obteniendo las superficies de sección de Poincaré a distintas energías y calculando las órbitas periódicas, que son relevantes desde el punto de vista cuántico en la dinámica vibracional de estos sistemas. En particular, hemos estudiado las manifestaciones cuánticas de una bifurcación del tipo silla-nodo que tiene lugar en el sistema LiNC/LiCN a energías por debajo de la barrera de isomerización. Se ha encontrado que las funciones de onda de varios estados vibracionales presentan una fuerte localización en la región de una o de las dos órbitas periódicas originadas en la bifurcación. Este efecto se pone incluso más claramente de manifiesto en las superficies de sección cuánticas en las que los máximos de probabilidad están bien localizados para esos estados, sobre los puntos fijos (estable y/o inestable) de las correspondientes órbitas periódicas.

Panel **P7** :

TEORIA Y SIMULACION MOLECULAR DE CADENAS ASOCIANTES Y NO ASOCIANTES

Felipe J. Blas y Lourdes F. Vega

*Departament d'Enginyeria Química, ETSEQ, Universitat Rovira i Virgili,
43006 Tarragona.*

El comportamiento de fluidos asociantes y/o cadenas moleculares se desvía considerablemente del de fluidos simples. Sólo es posible desarrollar ecuaciones de estado que describan este tipo de sistemas adecuadamente introduciendo los efectos de cadena y las fuerzas atractivas altamente direccionales de corto alcance en las etapas iniciales del desarrollo de la teoría.

Presentamos la extensión de la teoría estadística de fluidos asociantes a mezclas de cadenas homonucleares y heteronucleares. Las cadenas son totalmente flexibles y están formadas por esferas Lennard-Jones de distintos tamaños y energías de dispersión. En esta teoría de perturbaciones la parte de referencia incluye tanto las fuerzas repulsivas como las atractivas de medio alcance y las de formación de cadenas, de tal forma que el término perturbativo es exclusivamente la parte de asociación.

Se han realizado una serie de simulaciones en el colectivo isotérmico-isobárico de cadenas asociantes y no asociantes a temperaturas supercríticas. La comparación de propiedades termodinámicas tales como presión, energía configuracional y fracción de monómeros muestra un acuerdo excelente en los resultados obtenidos por los dos procedimientos. Así mismo se estudia la influencia de la concentración, el tamaño de los monómeros que forman las cadenas y la energía de dispersión en las propiedades anteriores. También presentamos la predicción de la teoría del equilibrio de fases de este tipo de sistemas y mostramos resultados comparándolos con los obtenidos con simulaciones en el colectivo de Gibbs para cadenas cortas. Discutiremos las limitaciones de la teoría en este campo.

Panel P8 :

**DESPLAZAMIENTO CUADRATICO MEDIO PARA
CAMINOS
ALEATORIOS LOCALMENTE ANISOTROPICOS A TIEMPO
CONTINUO**

Marián Boguñá, Josep M. Porrà, Jaume Masoliver

*Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona
Diagonal 647 ,08028-Barcelona.*

George H. Weiss

*Division of Computer Research and Technology, National Institutes of
Health
Bethesda, Md. 20892.*

En el presente trabajo presentamos una clase de caminos aleatorios a tiempo continuo no separables. El modelo es el siguiente: Tenemos una partícula moviéndose en el seno de un medio desordenado. La partícula se mueve a velocidad constante durante un período de tiempo aleatorio, transcurrido el cual, la velocidad cambia de dirección. El ángulo relativo entre las direcciones anterior y posterior al cambio está distribuido según una función de fase, $p(\theta)$. Esta función tiene en cuenta el efecto de las colisiones e introduce una anisotropía local.

Calculamos el desplazamiento cuadrático medio $\langle r^2(t) \rangle$, incluyendo los efectos de anisotropía en los ángulos de giro. Cuando la densidad de probabilidad del tiempo entre giros es una exponencial negativa, encontramos una expresión simple para $\langle r^2(t) \rangle$ que permite determinar exactamente el tiempo de transición entre el régimen balístico y el difusivo. Para el caso general no Markoviano, obtenemos una expresión exacta para la transformada de Laplace de $\langle r^2(t) \rangle$. Estos resultados se pueden aplicar al estudio de la migración de fotones en medios desordenados.

Panel **P9** :

TRANSICION ORDEN-CAOS EN MOLECULAS

F. Borondo y F.J. Arranz

*Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química.
Cantoblanco. 28049 Madrid.*

R.M. Benito

*Universidad Politécnica de Madrid. Departamento de Física y Mecánica.
E.T.S.I. Agrónomos.
28040 Madrid.*

En esta comunicación describimos como la transición de comportamiento regular a caótico, que aparece en sistemas hamiltonianos moleculares a medida que la energía aumenta, se manifiesta a nivel cuántico en la estructura de las correspondientes funciones de onda del sistema y en los espectros moleculares. Este estudio lo hemos llevado a cabo variando el valor de \hbar , que hemos tomado como parámetro de control de nuestro modelo, o escalando los valores de las masas del problema. A medida que el valor de \hbar disminuye el sistema se hace mas regular ya que es posible que más estados cuánticos puedan acomodarse en la región del espacio de fases clásico que es regular. Con este procedimiento hemos demostrado que los *scars* son generados debido a la interacción y mezcla de funciones de onda regulares en el régimen caótico. También hemos estudiado la influencia de este efecto en los correspondientes espectros moleculares. Este estudio se ha llevado a cabo en la molécula LiNC/LiCN, utilizando un modelo de dos grados de libertad en el que se mantiene la distancia CN congelada en su valor de equilibrio.

Conferencia Invitada **Sábado 25, 12h30 -13h30** :

**RELACIONES DE LA MECANICA ESTADISTICA CON LA
FISICA DE LAS PARTICULAS ELEMENTALES.**

Luis J. Boya

Depto. de Física Teórica. Universidad de Zaragoza.

Se revisan diversos fenómenos en Mecánica Estadística cuya interpretación teórica ha servido después para explicar numerosas situaciones en la Física de Partículas Elementales. Entre otras consideraremos la teoría electrolítica de Debye-Hückel (base del fenómeno de Higgs), las ondas de Bloch en los metales (instrumentales para interpretar los instantones y el ángulo Θ en la cromodinámica cuántica), el modelo ferromagnético de Heisenberg (primer ejemplo cuántico de rotura espontánea de simetría), el *Ansatz* de Bethe y las ecuaciones de Yang-Baxter, la teoría BCS de la superconductividad (con múltiples aplicaciones en partículas) y la relación del efecto Hall cuántico con los anyones.

Comunicación Oral **Jueves 23, 13h - 13h15 :**

**SKYRMIONS Y CRISTAL DE SKYRME EN UN GAS
BIDIMENSIONAL DE ELECTRONES.**

Luis Brey

*Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC
Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid.*

Un gas bidimensional de electrones en presencia de un campo magnético intenso, y a factor de llenado $\nu = 1$, presenta espontáneamente orden ferromagnético. Además de las excitaciones ondas de spin, estos ferromagnetos itinerantes tienen excitaciones topológicas llamadas *skyrmions*. En un sistema Hall cuántico, estos objetos son muy importantes, por que llevan asociada una carga eléctrica. Debido a que estas excitaciones topológicas están cargadas, cuando $\nu \neq 1$ los skyrmions están presentes, en el estado fundamental, incluso a temperatura zero.

El tamaño de un skyrmion y el número de spines girados que conlleva están determinados por la competición entre la energía Zeeman del sistema y la autoenergía Coulomb. Nuestros cálculos, basados en una aproximación Hartree-Fock sin restricciones, indican que cada carga añadida al sistema a $\nu = 1$, gira alrededor de 4 spines. Esta propiedad es la que ha permitido observar skyrmions experimentalmente.

Cuando $\nu \neq 1$, hay un número finito de skyrmions en el sistema. En sistemas reales, estos objetos interaccionan fuertemente entre ellos. A suficientemente bajas temperaturas y pequeñas densidades de skyrmions, se espera que el estado fundamental del sistema sea un cristal. Nosotros hemos encontrado, que el estado fundamental es un *cristal de Skyrme* con orden posicional y orientacional de largo alcance. El cristal de Skyrme de más baja energía es una red cuadrada, con posturas de spin opuestas en skyrmions centrados en subredes opuestas. En este cristal, la variación con el factor de llenado de la polarización de spin, está en buen acuerdo con recientes experimentos de NMR.

Este trabajo ha sido hecho en colaboración con A.H.MacDonald, H.Fertig, R.Côté, y con la ayuda de C.Tejedor, L. Martin-Moreno, A.Somoza y J.P.Rodriguez.

Panel P10

**CAMINANTES ALEATORIOS CON INTERACCION
EN EL LIMITE DE SALTOS A GRAN DISTANCIA**

Ricardo Brito

*Departamento de Física Aplicada I
Facultad de Ciencias Fisicas
Universidad Complutense
28040 Madrid*

Amine Asselah and Joel L. Lebowitz

*Department of Mathematics
Rutgers University
New Brunswick, 08903 New Jersey*

Se estudia una colección de caminantes aleatorios con volumen excluido que pueden saltar a cualquiera de los N nodos vecinos dentro de una esfera de radio dado. La interacción de volumen excluido se implementa en la dinámica de forma que si un caminante trata de saltar a un sitio donde ya hay otro, el salto es rechazado y el primer caminante permanece en su sitio. Esto produce una disminución del coeficiente de difusión respecto al caso de no interacción.

Nos centramos en el coeficiente de difusión de este sistema D , y su dependencia con el número de vecinos N y con la dimensión y la geometría de la red. Se calcula D en campo medio, resultado que es exacto en el límite de saltos a infinita distancia. Se encuentra que las desviaciones de D respecto a este resultado para saltos finitos son de la forma $1/N$ al orden más bajo en N . Analíticamente se calcula una cota superior y una inferior al coeficiente de difusión de este sistema, y se comparan con simulaciones numéricas del modelo, encontrando buen acuerdo entre ambas.

Panel P11 :

**ESCALAMIENTO ANOMALO E INESTABILIDAD
MORFOLOGICA EN LA VERSION ESTOCASTICA DE LA
ECUACION KURAMOTO-SIVASHINSKI ESTABILIZADA.**

Javier Buceta, J. M. Pastor, F. J. de la Rubia y M. A. Rubio

*Departamento de Física Fundamental, Universidad Nacional
de Educación a Distancia, C/ Senda del Rey s/n, E-28040, Madrid.*

El crecimiento de un depósito sobre la superficie de un sustrato forma parte de multitud de procesos industriales, como pueden ser la fabricación de dispositivos de semiconductores o el crecimiento de monocristales por solidificación de fases fundidas. Multitud de experimentos realizados sobre procesos de crecimiento han producido una fenomenología extremadamente rica en lo que se refiere a morfología de los depósitos y dinámica del proceso de crecimiento.

Uno de los aspectos aún por aclarar consiste en la aparición de fases de crecimiento rugoso sin escalas de longitud características, y en posibles transiciones de dicho tipo de crecimiento a regímenes de tipo dendrítico causados por inestabilidades morfológicas de tipo Mullins-Sekerka. Experimentos recientes realizados por J. M. Pastor y M. A. Rubio¹ sobre crecimiento de depósitos electroquímicos a muy baja densidad de corriente muestran una transición continua entre estos dos tipos de crecimiento.

Los modelos teóricos habituales discretos (depósitos balísticos y sus variantes) o continuos (ecuaciones Edwards-Wilkinson o Kardar-Parisi-Zhang) no pueden dar cuenta de dicho comportamiento, dado que no presentan inestabilidades morfológicas. En esta comunicación proponemos un modelo continuo basado en la ecuación de Kuramoto-Sivashinski estabilizada (SKS) con un término estocástico. Los resultados de simulaciones numéricas de dicha ecuación muestran regímenes de crecimiento que representan bien la dinámica y morfologías obtenidas en los experimentos.

Con un término de ruido blanco gaussiano aditivo se obtienen los dos regímenes de crecimiento y la evolución del valor medio del perfil del depósito observados en los experimentos. En la región de parámetros en la que no existen modos espaciales inestables, se obtiene un régimen de crecimiento rugoso, con exponente de rugosidad $\alpha \simeq 0.75$, que coincide con el obtenido en los experimentos, mientras que en lo relativo al comportamiento temporal, existen dos etapas claramente diferenciadas: una primera donde se observa una ley de potencia con exponente $\beta \simeq 0.4$, y una segunda donde el comportamiento es exponencial. Las regiones de parámetros en las que existen modos espaciales inestables dan cuenta de la inestabilidad morfológica.

¹J.M. Pastor and Miguel A. Rubio, *Phys.Rev. Lett.* **76**, 1848 (1996).

Panel P12 :

AGUJEROS DE AMPLITUD PROPAGATIVOS EN CONVECCION CON CALENTAMIENTO LATERAL

Javier Burguete

*Dpto. de Física y Matemática Aplicada,
Universidad de Navarra, E-31080 Pamplona.*

François Daviaud

*Service de Physique de l'Etat Condensé, CEA,
Centre d'Etudes de Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette Cedex, Francia.*

Últimamente se han propuesto una amplia variedad de familias de soluciones analíticas para modelos basados en la ecuación de Ginzburg-Landau compleja (CGLE) [1][2]. Dichas soluciones consisten en ondas propagativas cuya característica más relevante es la existencia de regiones localizadas del espacio (unidimensional) en las que el módulo de la amplitud decae hasta valores próximos pero nunca iguales a cero (agujeros).

En este trabajo se presenta evidencia experimental de la existencia de agujeros aislados no estacionarios en ondas propagativas en una configuración de calentamiento lateral[3]. Se han estudiado características tales como la evolución temporal del valor mínimo del módulo de la amplitud, anchura del agujero, salto de fase, estabilidad, que están más acordes con las conclusiones de modelos CGLE de orden 5 [4] que con los trabajos originales realizados a orden 3 [1].

[1] Bekki N. and Nozaki K. *Physics Letters* **110A** (1985) 133.

[2] Lega J., Janiaud B., Jucquois S. and Croquette V. *Physical Review A* **45** (1992) 5596.

[3] Daviaud F. and Vince J.M. *Physical Review E* **48** (1993) 4432.

Burguete J. and Daviaud F. *en preparación.*

Ver también el poster de M.A. Pelacho acerca de este tema.

[4] Stiller O., Popp S., Aranson I. and Kramer L. *Physica D* **87** (1995) 361.

Panel P13 :

TRANSICION A FLUJO MULTICELULAR EN CAVIDADES INCLINADAS CON GRADIENTE AXIAL DE TEMPERATURA

R. D. Buscalioni y E. Crespo del Arco

*Departamento de Física Fundamental, Universidad de Educacion a
Distancia*

C/ Senda del Rey s/n, E-28040, Madrid, Spain.

Se presenta un estudio sobre el flujo convectivo en cavidades rectangulares inclinadas sometidas a gradientes de temperatura en la dirección del eje mayor de la cavidad. La estructura del flujo depende del número de Rayleigh, R el número Prandtl, Pr y el ángulo de inclinación, α . El parámetro de control del sistema es el número de Rayleigh. Para valores del número de Rayleigh suficientemente bajos, el flujo es unicelular, esto es, un único rollo convectivo que abarca toda la cavidad. El estudio de la estabilidad del flujo medio unicelular en la zona central de la cavidad frente a perturbaciones infinitesimales en modos normales muestra que para valores suficientemente altos del número de Rayleigh existe transición a movimiento multicelular. La estructura del flujo por encima del número de Rayleigh crítico de la transición depende de tipo de fluido (i.e., del número de Prandtl) y del ángulo de inclinación. Para valores pequeños de Pr (< 0.2) y para cualquier inclinación no nula, la inestabilización del flujo unicelular es debida a la zizalla del flujo medio (inestabilidad hidrodinámica), la estructura del flujo multicelular consiste en rollos estacionarios cuya longitud de onda típica es del orden del espesor de la cavidad. Para Pr más altos (> 0.7) la transición se presenta en forma de rollos convectivos de carácter oscilatorio con longitudes de onda del orden de 6 veces el espesor de la cavidad. Estas inestabilidades oscilatorias son de origen térmico en tanto están originadas por la acción del empuje gravitatorio en la dirección del eje mayor de la cavidad, sin embargo los efectos hidrodinámicos (asociados al flujo medio) son responsables del su carácter oscilatorio y de la finitud del número de onda. Esto las diferencia esencialmente de las inestabilidades térmicas en cavidades verticales ($\alpha = 0$). Para $0.2 < Pr < 0.7$, el tipo de inestabilidad depende de la inclinación: oscilatoria a ángulos bajos y estacionaria a inclinaciones mayores. Además de obtener las regiones de estabilidad, se han realizado simulaciones numéricas del flujo en cavidades de diversos factores de forma. Los resultados han sido obtenidos con un método pseudo-espectral inestacionario que resuelve las ecuaciones de Navier-Stokes y calor en su forma completa. Los resultados numéricos confirman las predicciones del análisis de estabilidad. Se ha observado que las paredes terminales pueden inducir transiciones imperfectas para factores de forma suficientemente bajos. Fenómenos análogos han sido reportados en anteriores trabajos.

Panel P14 :

**Resonancia estocástica inducida por ruido paramétrico
exponencialmente correlacionado (SR induced by exponentially
correlated parametric noise)**

J.L. Cabrera y F.J. de la Rubia

*Depto. de Física Fundamental, U.N.E.D, Apdo. 60141,
28080 Madrid.*

Presentamos una nueva clase de resonancia estocástica en un sistema sin fuerza externa periódica, pero perturbado por un ruido de color multiplicativo. El fenómeno, obtenido como una función del tiempo de correlación del ruido, en vez de la usualmente considerada intensidad del ruido, ocurre en la vecindad de una bifurcación de Hopf. Conjeturamos, que este fenómeno podría ser observado en una amplia gama de modelos con comportamiento bifurcativo similar.

We present a new kind of stochastic resonance effect in a system without periodic external force, but perturbed by a multiplicative colored noise. The phenomenon, obtained as a function of the correlation time of the noise instead of the usually considered noise intensity, occurs in the vicinity of a Hopf bifurcation, and could be observed in a wide range of models with similar bifurcation behavior.

Panel P15 :

Quantum Noise in the degenerate OPO operating under cascade non-linearities regime

C. Cabrillo and P. Garcia Fernandez, Instituto de Estructura de la Materia,
Serrano 123, 28006, Madrid, Spain

Previous studies have illustrated the advantages of competing non-linearities for quantum noise reduction in cavity configurations [1, 2, 3]. Similar effects appear also in cw configurations whenever cascade non-linearities [4] are allowed by phase-mismatch conditions. Here, an equivalence between the phase-mismatch typical of the cascade non-linearities and detuning in the pump mode of an OPO is established. Consequently, an effective $\chi^{(3)}$ term appears after an adiabatic elimination of the pump mode. The evolution equation is compared with that of a system with real $\chi^{(2)}$ and $\chi^{(3)}$ competing non-linearities. The only formal difference is an extra imaginary component in the parametric amplification factor (i.e., the factor going with the linear term in the conjugate variable). This extra term expands the parameter space in such a way that allows for perfect squeezing for any given output power, something forbidden either in the standard OPO without detuning or in the $\chi^{(2)} - \chi^{(3)}$ competing non-linearities system. Surprisingly, then, detuning in the pump mode shows to be very advantageous in the generation of bright squeezing.

References

- [1] C. Cabrillo and F. J. Bermejo, Phys. Lett. A170, 300 (1992).
- [2] C. Cabrillo and F. J. Bermejo, Phys. Rev. A48, 2433 (1993)
- [3] M. A. Marte, J. Opt. Soc. Am. B12, 2296 (1995).
- [4] R. D. Li and P. Kumar. Opt. Lett. 18, 1961 (1993).

Panel P16 :

WEAK NOISE EXPANSIONS IN STOCHASTIC PROCESSES

H. Calisto

*Departament de Física, Universitat de les Illes Balears
E-07071 Palma de Mallorca, Spain*

Weak noise expansions for correlation functions and cumulants of stochastic processes are present. The purpose is the study of noise induced transitions for weak noise. In view of this the effective potential is also discussed.

Panel P17 :

**TERCERA LEY DE LA TERMODINAMICA EN PRESENCIA
DE UN FLUJO DE CALOR**

J. Camacho

*Dept. de Física, Física Estadística, Universidad Autónoma de Barcelona,
08193 Bellaterra, Barcelona.*

Mediante el formalismo de maximización de la entropía, estudiamos las propiedades térmicas de un cristal unidimensional atravesado por un flujo de calor: evaluamos la temperatura de no equilibrio, el calor específico, y la entropía en función de la energía interna y del flujo de calor en los límites clásico y cuántico. Se muestran algunas analogías entre el comportamiento de sistemas en equilibrio a bajas temperaturas absolutas, y el de estados de no equilibrio con valores elevados del flujo de calor, lo que sugiere una posible generalización de la tercera ley fuera de equilibrio.

J. Camacho, *Phys. Rev. E* **51**, 220–225 (1995).

Panel P18 :

**Experimentos en una celda de
Hele-Shaw en rotación**

Ll. Carrillo, F.X.Magdaleno, J. Casademunt, J. Ortín

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de
Barcelona,*

Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona.

Presentamos el estudio experimental de la inestabilidad que tiene lugar en la interficie entre dos fluidos contenidos en una celda de Hele-Shaw circular cuando se la hace girar de manera controlada. En este caso la inestabilidad se induce por la diferente densidad entre ambos fluidos (aceite y aire). En el régimen lineal verificamos la relación de dispersión hallada teóricamente. Para caracterizar las estructuras desarrolladas estudiamos la evolución de algunas longitudes características, encontrando un buen colapso de los datos para el radio de giro de la estructura y para la longitud radial de los dedos. Estas magnitudes parecen evolucionar linealmente con el tiempo en el régimen no lineal.

Comunicación Oral **Sábado 25, 10h15 - 10h30** :

**Global Diffusion in a Realistic Three-Dimensional
Time-Dependent Nonturbulent Fluid Flow**

Julyan H. E. Cartwright,

*Departament de Física, i Centre de Càlcul i Informatització, Universitat de
les Illes Balears, 07071 Palma de Mallorca, Spain.*

Mario Feingold,

Department of Physics, Ben-Gurion University, Beer-Sheva 84105, Israel.

Oreste Piro,

*Departament de Física, Universitat de les Illes Balears, i Institut
Mediterrani d'Estudis Avançats (CSIC–UIB), 07071 Palma de Mallorca,
Spain*

We introduce and study the first model of an experimentally realizable three-dimensional time-dependent nonturbulent fluid flow to display the phenomenon of global diffusion of passive-scalar particles at arbitrarily small values of the nonintegrable perturbation. This type of chaotic advection, termed *resonance-induced diffusion*, is generic for a large class of flows.

Panel P19 :

Dinamica de particulas neutras en flujos incompresibles y control de caos hamiltoniano.

Julyan H. E. Cartwright,

Departament de Física, i Centre de Càlcul i Informatització, Universitat de les Illes Balears, 07071 Palma de Mallorca, Spain.

Oreste Piro,

Departament de Física, Universitat de les Illes Balears, i Institut Mediterrani d'Estudis Avançats (CSIC–UIB), 07071 Palma de Mallorca, Spain

Estudiamos la dinámica de partículas de tamaño finito e igual densidad que el fluido en movimiento bidimensional en el cual se encuentran suspendidas. Se encuentra analíticamente y se comprueba numéricamente que las trayectorias de estas partículas pueden diferir de las trayectorias de las partículas del fluido y en particular se separan de estas exponencialmente en las regiones donde el flujo base es suficientemente hiperbólico (donde el autovalor del jacobiano del flujo es mayor en valor absoluto que el coeficiente del término de Stokes). Como consecuencia, las partículas neutras tienden a explorar las regiones de un grado de inestabilidad determinado en flujo base. Reemplazando el fluido en movimiento por un campo vectorial hamiltoniano caótico arbitrario, este resultado puede ser utilizado para seleccionar trayectorias con un exponente de Liapunov controlable.

Panel P20 :

DISTRIBUCIÓN PRE-HISTÓRICA PARA RUIDO BLANCO

J. M. Casado, J. Gómez Ordoñez y M. Morillo

Área de Física Teórica, Universidad de Sevilla, Apdo. 1065, 41080 Sevilla

En los últimos años se han desarrollado nuevos métodos para el estudio de sucesos poco probables en sistemas dinámicos estocásticos. Uno de dichos métodos es el que introduce la denominada *densidad de probabilidad pre-histórica*. El llamado *problema de la pre-historia* puede formularse como sigue. Consideremos que un sistema estocástico se encuentra en equilibrio y sea su densidad de probabilidad $P_{eq}(x)$. Si sabemos con certeza que en el instante t_f la variable estocástica toma el valor x_f , ¿cuál es la densidad de probabilidad, $p_h(x, t; x_f, t_f)$, de que haya tomado el valor x en un instante de tiempo t anterior, ($t < t_f$)?

El problema de la pre-historia es relevante cuando x_f es un punto lo suficientemente alejado del atractor (o atractores) del sistema como para que la función de distribución de equilibrio le asigne probabilidades muy pequeñas. El análisis de la distribución pre-histórica nos proporciona una forma de estudiar la probabilidad de ocurrencia de sucesos que tienen muy poca probabilidad de ocurrir.

Recientemente [1], se ha analizado este problema para sistemas estocásticos monodimensionales biestables gobernados por una dinámica de Langevin con ruido blanco, mediante la formulación de un principio variacional cuya solución proporciona tanto el denominado *camino óptimo*, la trayectoria generada por el máximo de la distribución pre-histórica, como las fluctuaciones en torno a él. Los resultados teóricos, válidos, en principio, cuando la intensidad del ruido tiende a cero, presentaban ciertas discrepancias respecto a resultados obtenidos mediante una simulación análogica.

Nosotros hemos abordado este problema empleando tanto la resolución numérica de la ecuación de Fokker-Planck como mediante la simulación mediante dinámica browniana de la ecuación de Langevin. El empleo de las relaciones de simetría temporal de las funciones de distribución conjuntas de dos tiempos, válidas para sistemas Markovianos, nos permite abordar el cálculo de la distribución pre-histórica (para $t < t_f$), en términos de la evolución temporal para tiempos $t > t_f$. Dicho método proporciona resultados para procesos Markovianos con gran economía de cálculo. El análisis del problema nos ha permitido verificar que la *aproximación gaussiana* desarrollada en [1] es válida en el caso de que la intensidad de ruido sea finita, en tanto en cuanto x_f no se encuentre demasiado cerca del punto de inestabilidad del potencial.

REFERENCIAS:

- [1] M. I. Dykman, P. V. E. McClintock, V. N. Smelyansky, N. Stein and N. G. Stocks, *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 2718 (1992)

Panel P21 :

**COMPORTAMIENTO RESONANTE DE UN PROCESO DE
POISSON
SOMETIDO A UNA SEÑAL PERIÓDICA**

J. Casado-Pascual, B. Sánchez-Rey* y J. J. Brey

*Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de Sevilla
Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla.*

**Física Aplicada, E.P. Superior, Universidad de Huelva
Ctra. Palos de la Frontera s/n, 21819 La Rábida (Huelva).*

En este trabajo analizamos diversas propiedades estadísticas relacionadas con el tiempo de permanencia sobre un segmento de línea de un proceso de Poisson sometido a una señal sinusoidal. La simplicidad del modelo nos permite obtener expresiones analíticas para la función de distribución de tiempos de primer paso (FPTDF) y el tiempo medio de primer paso (MFPT). Un estudio detallado de estas expresiones pone de manifiesto la presencia de un comportamiento resonante análogo al de los sistemas confinados en potenciales monoestables y biestables.

Panel P22 :

**A MODEL FOR MEMBRANES, VESICLES AND MICELLES
IN AMPHIPHILIC SYSTEMS**

A.M. Somoza, E. Chacón

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, C.S.I.C, Campus de la
Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

P. Tarazona

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada (C-V),
Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

We present a microscopic model for the aggregates of amphiphilic molecules based on a simple density functional approximation for the free energy. The different molecular aggregates are described as self-structured density distributions at the relative minima of the grand potential energy. We search for these structures with planar, spherical and cylindrical geometries, and obtain the phase diagram for bilayer membranes, and the curvature energies for spherical and cylindrical vesicles and different types of micelles. The study of a global phase diagram, to get the density of micelles and isolated amphiphilic molecules, at equilibrium with free membranes, requires the link between two description levels of micelles: as self-structured density distributions, or as molecular cluster in the solution of amphiphilic molecules in water. This is done with the help of a simple harmonic model which provides an appropriate choice of the configurational unit cell for micelles.

Panel P23 :

**ANALISIS DE UN MODELO BROWNIANO PARA EL
TRANSPORTE DE PROTEINAS EN EL CITOESQUELETO
CELULAR**

Sofía Cilla

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Instituto de Ciencia de
Materiales de Aragón. Universidad de Zaragoza, C.S.I.C., E-50009
Zaragoza, Spain.*

En los organismos eucariotas, el compromiso entre un correcto funcionamiento metabólico y las propias dimensiones celulares, obliga a que los fenómenos de transporte intracelular sean más complejos que los mecanismos de difusión o de transporte activo a través de membranas: el transporte de la quinesina a través de las fibras de tubulina es un buen ejemplo.

Partiendo de un esquema simplificado de los mecanismos biológicos y físicos que tienen lugar en tal proceso, se ha analizado con un modelo sencillo el transporte de proteínas de tales características. El gran interés que está despertando este tema radica en que permite ahondar sobre la fundamentación de la segunda ley de la Termodinámica y cuestionarse acerca de los mecanismos que destruyen el balance detallado.

Panel P24 :

**SINCRONIZACION EN UNIONES DESORDENADAS DE
JOSEPHSON**

Pere Colet

*Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Serrano 123, E-28006 Madrid
e Instituto Mediterráneo de Estudios Avanzados (CSIC-UIB) 07071 Palma
de Mallorca*

Kurt Wiesenfeld

*School of Physics, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332,
USA.*

Steven H. Strogatz

*Theoretical and Applied Mechanics, Kimball Hall, Cornell University,
Ithaca, NY 14853, USA.*

Se estudia la sincronización de uniones superconductoras de Josephson no idénticas conectadas en serie. Mostramos la existencia de dos transiciones. Una transición corresponde a la aparición de sincronización parcial y la otra a phase-locking de todas las uniones. En el límite de acoplamiento y desorden débil, mostramos como el sistema puede ser descrito en términos de un modelo matemático soluble introducido por Kuramoto y, en base al mismo, como pueden calcularse los puntos de transición de forma precisa.

Comunicación Oral **Jueves 23, 19h15 - 19h30** :

**CRITICALIDAD AUTO-ORGANIZADA Y FENÓMENOS DE
SINCRONIZACIÓN EN MODELOS DE OSCILADORES
BIOLÓGICOS, TERREMOTOS, PILAS DE ARENA, ETC.**

Álvaro Corral[†], Conrad J. Pérez, Albert Díaz-Guilera y Alex Arenas

*Departament de Física Fonamental, Facultat de Física,
Universitat de Barcelona, Diagonal 647, E-08028 Barcelona, Spain*

[†]*Correo electrónico: alvaro@ulyses.ffn.ub.es*

Modelos de osciladores "integrate-and-fire" acoplados a pulsos localmente pueden describir sistemas tan diversos como células marcapasos cardíacas, neuronas del sistema nervioso, poblaciones de luciérnagas centelleantes, fallas tectónicas, pilas de arena... Los resultados indican que estos sistemas disipativos, con muchos grados de libertad extendidos espacialmente, presentan comportamientos asintóticos muy variados: sincronización, periodicidad, "phase-locking", etc. En particular se presenta una ruta hacia la criticalidad auto-organizada: variando únicamente un parámetro de los osciladores el estado sincronizado deja de ser un atractor de la dinámica y aparecen ciclos límite de período largo. Sucesivos incrementos de este parámetro dan lugar a atractores más complicados, para llegar finalmente, para un rango de valores dado, a un comportamiento sin escalas características y por tanto crítico.

Bibliografía:

R. E. Mirollo y S. H. Strogatz, *SIAM J. Appl. Math.* **50**, 1645 (1990).

P. Bak, C. Tang y K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 381 (1987).

A. Corral, C.J. Pérez, A. Díaz-Guilera y A. Arenas, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 118 (1995).

A. Corral, C.J. Pérez, A. Díaz-Guilera y A. Arenas, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3697 (1995).

Panel P25 :

TRACER DISPERSION IN A SELF-ORGANIZED CRITICAL SYSTEM

Kim Christensen,^{*†} Álvaro Corral,[‡] Vidar Frette,^{*§} Jens Feder,^{*} and
Torstein Jøssang^{*}

^{*}*Department of Physics, University of Oslo, P.O. Box 1048, Blindern,
N-0316 Oslo 3, Norway*

[†]*Present address: Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de
Janeiro, UFRJ, Cxp. 68528, 21945-970 Rio de Janeiro, RJ, Brazil*

[‡]*Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Diagonal
647, E-08028 Barcelona, Spain*

[§]*Present address: Department of Physics of Complex Systems, The
Weizmann Institute of Science, Rehovot 76100, Israel*

[‡]*Electronic mail: alvaro@ulyses.ffn.ub.es*

We have studied experimentally transport properties in a slowly driven granular system which recently was shown to display self-organized criticality [Frette *et al.*, *Nature* **379**, 49 (1996)]. Tracer particles were added to a pile and their transit times measured. The distribution of transit times is a constant with a crossover to a decaying power law. The average transport velocity decreases with system size. This is due to an increase in the active zone depth with system size. The relaxation processes generate coherently moving regions of grains mixed with convection. This picture is supported by considering transport in a 1D cellular automaton modeling the experiment.

Bibliography:

V. Frette, K. Christensen, A. Malthe-Sørensen, J. Feder, T. Jøssang, and P. Meakin, *Nature* **379**, 49 (1996).

K. Christensen, A. Corral, V. Frette, J. Feder, and T. Jøssang, submitted to *Physical Review Letters*.

Panel P26 :

SIMULACION NEMD DE COEFICIENTES DE VISCOSIDAD EN CRISTALES LIQUIDOS NEMATICOS

S. Cozzini y L. F. Rull

*Dpto. de Física, Atómica, Molecular y Nuclear,
Apto. 1065, Universidad de Sevilla, 41080 Sevilla.*

G. Ciccotti

*Dpt. de Fisica, Università la Sapienza,
Piazzale Aldo Moro 2, 00185 Roma Italia*

La viscosidad en un cristal líquido es mucho más compleja que en el correspondiente líquido isótropo. En general la viscosidad viene descrita por un tensor de cuarto orden mientras que en el caso del líquido isótropo tiene solamente tres componentes independientes. Para un cristal líquido axialmente simétrico la más baja simetría de esta fase permite el acoplamiento entre tensores de diferente rango en las ecuaciones fenomenológicas. Esto implica que hay siete componentes independientes del tensor de viscosidad.

En nuestros cálculos medimos estos siete coeficientes para un modelo de Gay-Berne por medio de simulación en ordenador con el método de Dinámica Molecular de No-Equilibrio (NEMD). Utilizamos el llamado método de la Aproximación Dinámica en nuestras simulaciones. Comparamos los resultados obtenidos en esta manera con los de la evaluación directa utilizando las relaciones de Green-Kubo a partir del método estándar de Dinámica Molecular de equilibrio. Las simulaciones han sido realizadas manteniendo constante la velocidad angular del director o con el director libre para poder estudiar la influencia de esta restricción.

Conferencia **Jueves 23, 18h - 18h30** :

**DE ESTRUCTURAS PERIÓDICAS A SUPERFICIES
RUGOSAS:
EROSIÓN DE SUPERFICIES POR BOMBARDEO CON IONES**

R. Cuerno^{§,†}, A. L. Barabási[†], K. B. Lauritsen[†], H. A. Makse[†], S.
Tomassone[‡],
S. T. Harrington[†] y H. E. Stanley[†]

[§] *Departamento de Matemáticas, Escuela Técnica Superior,
Universidad Carlos III de Madrid, C/ Butarque 15, 28911 Leganés*

[†] *Center for Polymer Studies and Dept. of Physics, Boston University,
Boston, MA 02215, EE. UU.*

[‡] *Department of Physics, Northeastern University, Boston, MA 02115, EE.
UU.*

Recientemente se ha observado que las morfologías de las superficies erosionadas por bombardeo con iones (ion sputtering, IS) pueden ser muy variadas, desde estructuras periódicas sencillas hasta superficies rugosas y aperiódicas. En esta comunicación se describe una serie de trabajos recientes, que consideran la evolución temporal de superficies sometidas a IS en el contexto más general de las superficies rugosas fuera del equilibrio. Hemos estudiado estos sistemas por medio de ecuaciones estocásticas no lineales y de la formulación de modelos discretos inspirados en la fenomenología. La conclusión general es que, al menos en una dimensión espacial, una superficie inicialmente plana evoluciona desde una morfología casi periódica a una geometría rugosa en la clase de universalidad de Kardar-Parisi-Zhang [1]. En general, la dinámica de las superficies resulta descrita por una versión estocástica y anisótropa de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky [2], cuyos coeficientes dependen de los parámetros fenomenológicos del modelo, siendo posible la existencia de transiciones entre distintos regímenes de escala en función de dichos parámetros.

[1] M. Kardar, G. Parisi y Y.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889 (1986).

[2] Y. Kuramoto y T. Tsuzuki, *Prog. Theor. Phys.* **55**, 356 (1976); G. I. Sivashinsky, *Acta Astronaut.* **4**, 1177 (1977).

Comunicación Oral **Jueves 23, 12h30 - 12h45 :**

SEPARACIÓN DE FASES EN MEZCLAS DE PARTÍCULAS DURAS

José A. Cuesta

*Depto. de Matemáticas, Universidad Carlos III de Madrid, c/ Butarque, 15.
28911 – Madrid.*

Desde los tempranos trabajos de Onsager sobre cristales líquidos con interacción repulsiva dura, se ha acumulado una gran cantidad de resultados, tanto numéricos como de simulación, en apoyo de la idea de que las transiciones usuales en los líquidos resultan esencialmente de un balance puramente entrópico. Sin embargo, algunas transiciones, como la separación de fases en mezclas, han ofrecido una fuerte resistencia a esta conclusión. La “responsabilidad” de este hecho hay que buscarla en la solución de la ecuación de Ornstein-Zernike (O-Z) en aproximación de Percus-Yevick para una mezcla de esferas duras [1]. Una de las consecuencias de este resultado es la predicción de la estabilidad de dicha mezcla en cualquier régimen de densidades y concentraciones relativas [2]. Pero esta conclusión fue cuestionada hace unos años por Biben y Hansen tras resolver la ecuación de O-Z con una aproximación de cierre más precisa [3]. De acuerdo con sus cálculos, la mezcla de esferas duras puede volverse inestable si la relación de diámetros es mayor que 5. Lamentablemente, una simulación de este modelo es inviable debido a los elevados tiempos de relajación. Recientemente, sin embargo, se ha llevado a cabo una simulación en un sistema próximo: cubos duros paralelos en una red cúbica [4], en el cual puede observarse una transición de separación de fases para una relación de tamaños igual a 3.

En el presente trabajo se calcula la función de correlación directa de una mezcla fluida de cubos duros paralelos en el continuo, mediante la técnica conocida como *teoría de las medidas fundamentales* [5,6]. A partir de esta función puede obtenerse la energía libre de la mezcla binaria y deducirse *analíticamente* la curva espinodal. El resultado es que la mezcla resulta ser inestable para una relación de tamaños mayor o igual que 10. Tal resultado está cualitativamente de acuerdo con la simulación en la red; la discrepancia cuantitativa es parcialmente achacable al mayor número de estados accesibles que hay en el modelo continuo frente al modelo de red. El cálculo se ha realizado también para el mismo sistema en dos dimensiones y, al igual que en la simulación sobre la red, la mezcla resulta siempre estable.

La importancia de este resultado sobre los precedentes es que, hasta donde el autor sabe, es el único modelo existente en el que, aunque de forma aproximada, se puede obtener analíticamente la inestabilidad espinodal de una mezcla de partículas duras.

[1] J.L. Lebowitz, *Phys. Rev. A* **133**, 895 (1964).

[2] J.L. Lebowitz y J.S. Rowlinson, *J. Chem. Phys.* **41**, 133 (1964).

[3] T. Biben y J.-P. Hansen, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2215 (1991).

- [4] M. Dijkstra y D. Frenkel, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3831 (1994).
- [5] Y. Rosenfeld, *J. Chem. Phys.* **89**, 4272 (1988).
- [6] Y. Rosenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 980 (1989).

Panel P27 :

CONTROL DE LOS PROCESOS DE RELAJACION EN SISTEMAS CUANTICOS DISIPATIVOS SOMETIDOS A CAMPOS EXTERNOS

C. Denk y M. Morillo

Física Teórica. Universidad de Sevilla.

Apdo. Correos 1065. 41080 Sevilla

Se investiga la posibilidad de controlar los procesos de relajación en sistemas cuánticos interaccionando con un medio denso, mediante la aplicación de campos externos intensos, en general dependientes del tiempo. En particular, se analiza la posibilidad de controlar los procesos de transferencia de cargas por efecto túnel entre estados localizados de sistemas de cuatro niveles. Estos están definidos por una superficie de energía potencial de doble pozo simétrico que soporta dos dobletes por debajo del máximo de la barrera de potencial, lo cual es típico en muchos puentes de hidrógeno. El campo externo dependiente del tiempo se acopla al operador momento dipolar del sistema que pasa de un estado a otro por efecto túnel. En un sistema multiniveles existe la posibilidad de transiciones entre niveles debidas a la relajación vibracional y a la acción del campo externo que compiten con los procesos de relajación por efecto túnel, a su vez también influenciadas por la acción de los grados de libertad del medio y del campo externo. Para dar cuenta de los diversos mecanismos, hemos llevado a cabo una generalización de la teoría de Redfield. Hemos obtenido una ecuación cinética que describe la evolución del operador densidad reducida del sistema, válida para campos externos e interacciones sistema-baño fuertes, en el límite en que los acoplos por efecto túnel renormalizado por las fluctuaciones del baño son pequeños. La ecuación cinética obtenida difiere sustancialmente de la que se obtendría en ausencia de campo. El efecto del campo externo se manifiesta incluso en el término de relajación que resulta ser no local en el tiempo y con una estructura que no es de convolución. Hemos obtenido mediante el programa Mathematica la estructura del tensor de relajación de Redfield, y hemos resuelto numéricamente la ecuación cinética en diversas situaciones de interés.

Los campos posibles de aplicación de estas ideas son, entre otros, el control de la cinética de las reacciones de transferencia de protones y electrones en sólidos y líquidos, el control de los procesos de difusión de impurezas en microestructuras metálicas a bajas temperaturas, y el control de los procesos de almacenamiento y procesado de información en dispositivos electrónicos moleculares.

Panel P28 :

EVIDENCIA SOBRE UNA POSIBLE NUEVA CLASE DE UNIVERSALIDAD EN CRECIMIENTO DE INTERFASES RUGOSAS

Enrique Diez y Angel Sánchez

Departamento de Matemáticas y Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complicados

*Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid
c/ Butarque, 15, 28911 Leganés, Madrid*

En los últimos años, diversos experimentos sobre crecimiento de interfases y superficies han proporcionado resultados contradictorios que además no coinciden con las predicciones de las teorías usuales (KPZ, EW).¹⁻⁵ Esto es así en particular en el caso del crecimiento de electrodepositos compactos.¹⁻³ Con la intención de aclarar en la medida de lo posible este complejo panorama, hemos estudiado este problema mediante simulaciones de MBDLA (*Multiparticle Biased Diffusion-Limited Aggregation*). Este modelo fue introducido en la Ref. 6, trabajo en el que se demostró su acuerdo *cuantitativo* con experimentos de electrodeposición.

Los resultados de las simulaciones son concluyentes y se encuentran en completo acuerdo con los experimentos de Pastor y Rubio³ sobre todo, pero también explican los resultados de Iwamoto *et al.*² En concreto, obtenemos un exponente de rugosidad $\alpha = 0.70 \pm 0.05$ a tiempos cortos. En cuanto a la evolución temporal, la imagen es más compleja: a tiempos muy cortos, observamos *scaling* temporal con $\beta \approx 1/2$ al igual que en la Ref. 2; a continuación, hay un *crossover* a un comportamiento aproximadamente exponencial para tiempos intermedios, privando de sentido al exponente dinámico β . Por último, encontramos que a tiempos más largos se desarrolla una inestabilidad morfológica muy similar a la descrita en la Ref. 3, que igualmente lleva aparejada una aceleración del crecimiento. Todo ello confirma plenamente la interpretación que Pastor y Rubio hacen³ de la visión de conjunto que dan su trabajo y el de Iwamoto *et al.*²

Las conclusiones más importantes que extraemos de este trabajo son i) la confirmación inequívoca de la imagen del proceso de Pastor y Rubio³ y por tanto de la incapacidad de los modelos KPZ/EW de describir estas interfases, ii) la confirmación de que las anomalías encontradas son intrínsecas al proceso y no debidas a influencias incontroladas en el experimento (por ejemplo, impurezas o inhomogeneidades), iii) la identificación de los procesos físico-químicos clave para entender estos experimentos, y iv) la segunda confirmación de la validez cuantitativa del modelo MBDLA⁵ en el contexto de la electrodeposición.

Finalmente, si tenemos en cuenta que los parámetros observados en experimentos muy diferentes, como los de Vázquez *et al.* sobre deposición química de vapor, o los de Kur-naz y Maher sobre sedimentación, son compatibles con los del modelo MBDLA, y que

este algoritmo describe también los principales procesos que intervienen en los mencionados experimentos, parece claro que el modelo MBDLA⁶ constituye una nueva clase de universalidad íntimamente conectada con los experimentos actualmente disponibles.

¹G. L. K. M. S. Kahanda, X.-Q. Zhou, R. Farrell y P.-Z. Wong, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3741 (1992).

²A. Iwamoto, T. Yoshinobu y H. Iwasaki, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4025 (1994).

³J. M. Pastor y M. A. Rubio, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1848 (1996); *Physica D*, en prensa.

⁴L. Vázquez, R. C. Salvarezza, P. Herrasti, P. Ocón, J. M. Vara y A. J. Arvia, *Surf. Sci.* **345**, 17 (1996); L. Vázquez, J. M. Albella, R. C. Salvarezza, A. J. Arvia, R. A. Levy y D. Perese, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 1285 (1996).

⁵M. L. Kurnaz y J. V. Maher, *Phys. Rev. E* **53**, 978 (1996).

⁶A. Sánchez, M. J. Bernal y J. M. Riveiro, *Phys. Rev. E* **50**, R2427 (1994).

Panel P29 :

GENERACION DE CONCEPTOS DE TRES ESTADOS EN UNA RED NEURONAL QUE ALMACENA EJEMPLOS PEQUEÑOS

David.R.C.Dominguez

*Depto. de Física Teórica, Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco
28049 Madrid.*

Dos tareas basicas son relevantes en los modelos de redes neuronales atractivas: la recuperacion de patrones memorizados y la generalización para conceptos que no sean los originalmente almacenados. El problema de la recuperación de patrones esta bastante bien comprendido hoy. El desempeño de una memoria asociativa depende de su estoque de patrones, y de su actividad (numero de sítios no nulos), bien como de la forma de la función de transferencia neuronal, ademas de la regla de aprendizaje empleada. Memorizando pequeños patrones (baja actividad), la capacidad de estocaje y de recuperación es ampliamente mejorada. La capacidad de generalización depende principalmente de la correlación b entre los patrones, y la regla de Hebb puede ser usada para almacenar s ejemplos de cada uno de p conceptos, resultando en que los conceptos sean punto fijos de la dinámica siempre que b o s sean suficientemente grandes.

Las variables de los ejemplos $\eta_i^{\mu\rho}$ pueden ser generadas, en el aprendizaje a partir de conceptos ξ_i^μ , por la regla estocástica (para cada neurona i) $\eta^{\mu\rho} = \xi^\mu \lambda^{\mu\rho}$, donde las variables aleatorias λ tienen distribución $p(\lambda) = \frac{a+b}{2}\delta(\lambda-1) + (1-a)\delta(\lambda) + \frac{a-b}{2}\delta(\lambda+1)$. Sin embargo, la generación de patrones a partir de ejemplos pequeños ($a = b < 1$) lleva a un comportamiento bastante más rico que el de una red que aprende ejemplos binarios ($a = 1$). La generación de conceptos binarios fue estudiada recientemente, y muestra que la capacidad de generalización crece en la medida que los ejemplos se van empequeñeciendo.

Nosotros hemos estudiado la generación de conceptos con simetria ternaria, con actividad A , y la transición de la fase de recuperación para la generalización, empleando una función de transferencia con 3 estados, en que el potencial postsináptico tiene que sobrepasar un umbral θ para que la respectiva neurona dispare. Las ecuaciones dinámicas para el overlap de generalización $M_t^\mu \equiv \frac{1}{Na} \sum_i \xi_i^\mu \sigma_{it}$ y para la actividad neural $Q_t \equiv \frac{1}{N} \sum_i (\sigma_{it})^2$, en cualquier tiempo t , son obtenidas en el limite diluido asimétrico de las sinápsis. Se muestra que con pequeños b, s , la red se comporta como reconocedora de patrones, mientras cuando son grandes funciona como generalizadora. Si usamos $A \ll 1$, los conceptos serán optimamente recuperados, en tanto en cuanto la variable de control θ sea adecuadamente sintonizada.

Panel P30 :

MODELOS UNIDIMENSIONALES DE AGREGADOS ANFIFILICOS

Daniel Duque y Pedro Tarazona

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada (C-V)
Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

Recientemente se han venido utilizando modelos físicos tomados de teorías de líquidos inhomogéneos para describir el complicado diagrama de fases que presentan las disoluciones de moléculas anfifílicas. Mediante la minimización numérica de un funcional de la densidad, que trata de manera adecuada los efectos de núcleos duros, y contiene un término de campo medio para un potencial anisotrópico efectivo, se obtienen agregados con características similares a los que se observan experimentalmente. Sin embargo, la mayor dificultad aparece al incluir la entropía asociada a los grados de libertad traslacionales de estos agregados, ingrediente necesario para enlazar dos niveles de descripción estadística, a escalas molecular y mesoscópica. Este problema se intenta abordar considerando modelos en una dimensión, que pueden resolverse exactamente, combinando las soluciones de un fluido de barras duras y de un modelo de Ising.

Comunicación Oral **Viernes 24, 13h15 -13h30 :**

**Orbitas heteroclinas en convección de Bénard-Marangoni con
pequeña relación de aspecto**

Blas Echebarria y Carlos Pérez-García

*Departamento de Física y Matemática Aplicada, Facultad de Ciencias,
Universidad de Navarra, 31080 Pamplona*

La convección en fluidos es uno de los sistemas físicos que permiten estudiar las bifurcaciones con simetría o el caos espaciotemporal. En particular, la dinámica en celdas convectivas de pequeña relación de aspecto (razón entre las dimensiones horizontales y verticales del sistema) puede ser descrita mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias para los modos que resultan inestables al aparecer la convección. La forma de estas ecuaciones depende crucialmente de las simetrías del problema. Para un sistema con simetría $O(2)$, pero sin la de reflexión respecto a un plano medio, Proctor y Jones mostraron [1] que presenta una dinámica compleja, que incluye una **órbita heteroclina** estructuralmente estable frente a pequeñas alteraciones de los parámetros. Hemos estudiado teóricamente la convección de Bénard-Marangoni (que presenta la superficie superior abierta al aire) en un recipiente cilíndrico, por ser uno de los sistemas físicos más sencillos donde los resultados anteriores pueden ser observables. Rosenblat *et al* [2] analizaron teóricamente esta situación. Sus resultados para el análisis lineal han podido ser corroborados experimentalmente [3]. Sin embargo, estos autores no tuvieron en cuenta la dinámica de fases, responsable de la órbita heteroclina. Nuestros cálculos [4] demuestran que dicha órbita es estable para un amplio intervalo de parámetros, por lo que podría ser observable experimentalmente.

Referencias:

- [1] C.A. Jones and M.R.E. Proctor, Phys. Lett. A 121 (1987) 224; M.R.E. Proctor and C.A. Jones, J. Fluid Mech. 188 (1988) 301.
- [2] S. Rosenblat, G.M. Homsy and S.H. Davis, J. Fluid Mech., 120 (1982) 123.
- [3] T. Ondarcuhu, J. Millán, H.L. Mancini, A. Garcimartín and C. Pérez-García, Phys. Rev. E, 48 (1993) 1051.
- [4] B. Echebarria, D. Krmpotić and C. Pérez-García, preprint.

Panel P31 :

Relación entre distintas propiedades en un material amorfo durante el proceso de envejecimiento físico

Isabel Echeverría¹, Sindee L. Simon² y Donald J. Plazek³

¹ *Dpto. Física Fundamental, U.N.E.D. c/ Senda del Rey s/n, 28040-Madrid.*

² *Dept. Chemical Engineering,* ³*Dept. Materials Science, Univ. of Pittsburgh, Pittsburgh, PA 15261, USA.*

Presentamos resultados de experimentos de relajación de volumen, función de fluencia ($J(t)$) y entalpía a temperaturas cercanas y menores que la temperatura vítrea (T_g), en un material amorfo (poli-éter-imida), realizados con el fin de estudiar la relación entre estas propiedades durante el proceso de envejecimiento físico. Nuestro interés se centra en el estudio y comparación de los tiempos característicos de retardo de las distintas propiedades. Para ello, hemos realizado experimentos clásicos de salto de temperatura desde ligeramente por encima a una temperatura por debajo de T_g , que colocan al material en una configuración fuera del equilibrio, para observar después la evolución de las tres propiedades a lo largo del tiempo.

El tiempo necesario para alcanzar el equilibrio a temperaturas por debajo de T_g resulta ser el mismo para el volumen, la función de fluencia y la entalpía. La dependencia con la temperatura de los factores de desplazamiento necesarios para construir las curvas reducidas también es la misma. Si embargo, la aproximación al equilibrio es distinta para las distintas propiedades aun cuando los tiempos efectivos de retardo observados son los mismos.

Así mismo hemos estudiado la capacidad de varios modelos fenomenológicos para ajustar los datos experimentales.

Panel P32 :

GRAVITY AS A SOURCE OF PHASE TRANSITIONS

E. Elizalde,¹ S. Leseduarte,² S.D. Odintsov³ and A. Romeo⁴

^{1,4}*Center for Advanced Studies CEAB, CSIC, Camí de Santa Bàrbara,
17300 Blanes,*

^{1,2,3}*Department ECM and IFAE, Faculty of Physics, University of
Barcelona,*

Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain

After going through several distinguished examples, we argue that gravity is definitely a source of phase transitions of quite different nature: usual scalar effective potential ones, chiral symmetry transitions and transitions involving even the chromomagnetic vacuum. In such context, we emphasize the fact that curvature-induced phase transitions of those kinds —where an interplay between general relativity and elementary particle physics occurs— should be relevant in the construction of models of the inflationary universe.

Phase transitions are considered to be crucial in early universe cosmology. Among their different types, the ones which are most used in cosmological applications are phase transitions where symmetry breaking and/or restoration occur under the action of temperature. More specifically, some models of inflationary universe are based on phase transitions, which take place during the reheating of the universe in the grand unification epoch. Gravity serves as a source for phase transitions in a whole variety of symmetry breaking/restoration phenomena. It was realized long ago that the scalar Coleman-Weinberg effective potential, when considered in the presence of gravity, may lead to a phase of broken symmetry.

Owing to the fact that in the inflationary era the curvature is far from being non-essential, these phase transitions ought to be actually taken into account in the construction of models for the inflationary universe. This is the most common example of curvature-induced phase transitions which continue to be present even when gravity itself is quantized. Phase transitions of this type may occur near black hole backgrounds (in a qualitatively modified fashion).

But there exist more exotic examples of curvature-induced phase transitions, which are connected with chiral symmetry breaking, as in the example of the four-fermion theory in curved spacetime.

Our last —and even more exotic— example of a phase transition induced by curvature has to do with the chromomagnetic vacuum of a Yang-Mills theory.

1. E. Elizalde and S.D. Odintsov, *Phys. Lett.* **B333** (1994) 331.
2. E. Elizalde, S. Leseduarte and S.D. Odintsov, *Phys. Rev.* **D49** (1994) 5551, and *Phys. Rev. D*, in press.
3. E. Elizalde, S.D. Odintsov and A. Romeo, *Nucl. Phys. B*, in press.

Panel P33 :

GAUSSIANTY AND INITIAL CONDITIONS IN THE LARGE-SCALE MATTER DISTRIBUTION

E. Elizalde,¹ P. Fosalba-Vela² and E. Gaztañaga³

^{1,2,3}*Center for Advanced Studies CEAB, CSIC, Camí de Santa Bàrbara,
17300 Blanes,*

¹*Department ECM and IFAE, Faculty of Physics, University of Barcelona,
Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain*

It is generally accepted that the fluctuations generated during a standard inflationary era would be Gaussian, and from them a scale-invariant power spectrum is expected. However, non-standard (e.g., power law) inflationary models lead to departures from scale invariance due to the non-Gaussian (NG) nature of the primordial fluctuations generated in this framework.

What is more, initially Gaussian fluctuations become NG once non-linear gravitational clustering has acted upon them. Therefore, there is an increasing demand for NG statistics to deal with both the initial and current pictures of the structure formation process.

On the other hand, it is believed that the observed structure in the universe is largely independent of the initial conditions of the gravitational instability picture. According to that, the current density and velocity fields are eventually dominated by the gravity force, irrespective of the interactions which determined their early evolution. Under this assumption, starting with Gaussian initial conditions, any NG imprint left on the dynamical fields should be entirely produced by the non-linear gravitational evolution.

In this contribution, we focus on the role the features of the initial distribution of fluctuations could play in quantifying departures from Gaussianity. In particular, we carry out numerical calculations for a wide variety of probability density functions (pdf) in which a cut off is set at $\delta = -1$ (δ being the argument of the distribution) as required on physical grounds.

As will be clear from the results obtained below, the higher order moments of the *Normal* pdf are seriously affected by the truncation performed on it. In fact, the values for the ‘skewness’ and ‘kurtosis’ of the distribution are shown to be much higher than those one would obtain if the cut off were removed. Moreover, the magnitude of these moments can be comparable to or even larger than those arising from the sole effect of gravity. On top of that, we also find high values for the moments of a number of NG density functions which incorporate a cut-off in a natural fashion.

Summing up, all these results cast serious doubts on the statement according to which the evolved picture of structure formation is fairly independent of the initial conditions.

1. A. Babul et al., *Astrophys. J.* **160** (1994) 1.

2. P. Coles and J.D. Barrow, *MNRAS* **228** (1987) 407.

3. E. Elizalde, P. Fosalba-Vela and E. Gaztañaga, CEAB preprint, to be published.

Panel P34 :

APROXIMACION POR DINAMICA MOLECULAR AL REGIMEN HIDRODINAMICO DE FLUIDOS DENSOS

E. Enciso, N. G. Almarza, y M. A. Gonzalez.

*Departamento de Química-Física I, Facultad de Ciencias Químicas,
Universidad Complutense, 28040 Madrid.*

Simulaciones de dinámica molecular a gran escala han sido diseñadas para estudiar el factor de estructura dinámico de fluidos densos en la región intermedia del plano (k,w) , inalcanzable a otras técnicas de laboratorio (dispersión de luz o neutrones, etc.), y donde tiene lugar la transición del del regimen cinético (microscópico) al regimen hidrodinámico.

Se presentan resultados para átomos LJ que modelan el argon en las proximidades del punto triple, y mezclas binarias de gases densos cuyos componentes tienen masas muy diferentes (helio/neón, helio/argon). En la mezclas se ha estudiado el amortiguamiento del modo sónico hidrodinámico y la aparición de dos modos dispersivos mantenidos mayoritariamente por cada uno de los componentes de la mezcla.

E. Enciso y col. Phys. Rev. E, **50**, 1336 (1994); E. Enciso y col. Phys. Rev. Lett. **74**. 4233 (1995).

Panel P35 :

RAMIFICACION DE FRACTURAS RAPIDAS EN MEDIOS ISOTROPOS FRAGILES

Pep Español, Miguel A. Rubio e Ignacio Zúñiga
Dpto. de Física Fundamental, UNED, 28040 Madrid.

Presentamos resultados de simulación de dinámica molecular de fracturas rápidas que se propagan en redes triangulares bidimensionales. Nuestra intención es simular la fractura en Modo I de materiales isotropos frágiles. Para ello proponemos una ley de fuerza que respeta la isotropía del material. La simulación reproduce correctamente los valores de las velocidades de ondas transversales c_{\perp} , longitudinales c_{\parallel} y superficiales V_R . Estudiamos el efecto de la longitud de la muesca que inicia la propagación de la fractura.

Observamos que las fracturas son inicialmente rectas y se aceleran. La aceleración es mayor para muescas más cortas. Además, existe un valor crítico $c^* \approx 0.73V_R$ para la velocidad a partir del cual la fractura ramifica.

Panel P36 :

MECANISMOS EN PUENTES SOLIDOS

Pep Español, Ignacio Zúñiga

Dpto. de Física Fundamental, UNED, 28040 Madrid.

Nicolás Agraït *Laboratorio de Bajas Temperaturas C-III, Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid.*

En el proceso de deformación plástica de los nanocontactos formados entre la punta metálica de un microscopio de efecto túnel o de fuerzas atómicas y un substrato metálico se producen variaciones discontinuas tanto en la conductancia como en la medida de la fuerza. Estas discontinuidades han sido explicadas como saltos entre configuraciones atómicas cuyas longitudes difieren en una capa cristalina.

Medidas muy recientes muestran otro aspecto espectacular de este mismo fenómeno: al repetir el proceso de deformación plástica bajo ciertas condiciones se llega a un estado en el que la señal de conductancia y la fuerza son perfectamente reproducibles.

Para entender esta fenomenología hemos simulado un puente sólido de partículas Lennard-Jones. En la simulación obtenemos regímenes en los que la señal de la fuerza es repetible, como consecuencia de un mecanismo de deslizamiento a lo largo de fallas. A pesar de que un sólido Lennard-Jones no representa bien las propiedades metálicas de las puntas del microscopio, obtenemos resultados consistentes con los experimentos. Eso sugiere que el mecanismo encontrado es de carácter topológico y universal.

Conferencia **Sábado 25, 12h - 12h30** :

SIMULACIÓN DEL CAMBIO DE FASE SÓLIDO-LÍQUIDO EN DOS DIMENSIONES

J.J. Alonso

*Laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes (ESPCI)
10 rue Vauquelin, 75231 PARIS Cedex 05, Francia*

J.F. Fernández

*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón
Facultad de Ciencias, 50009-Zaragoza*

Se presentan resultados de simulaciones de Monte Carlo del cambio de fase sólido-líquido de sistemas bidimensionales de N discos duros, para $N = 64, 256, 400, 576$ y 1024 , con condiciones de contorno periódicas, en la colectividad NpT . Simulaciones mucho más largas que cualquier otra anterior (por ejemplo, hasta 3×10^8 pasos de Monte Carlo por partícula, para $N=1024$) permiten obtener resultados de equilibrio. Se obtienen valores medios y fluctuaciones del volumen, v , y del parámetro del orden orientacional, ϕ , así como las probabilidades, $P(v)$ y $P(\phi)$. Nuestras conclusiones principales son: (1) las fluctuaciones de volúmenes específicos se anulan en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$) (lo que indica que el cambio de fase es de segundo orden); (2) la barrera de energía de nucleación de la otra fase aumenta con N para $N \lesssim 400$, pero se hace constante para $N \gtrsim 400$ (lo que es propio de un cambio de fase de segundo orden); (3) $\langle \phi \rangle$ salta discontinuamente en el punto crítico, de $\langle \phi \rangle \approx 0.74$ en la fase cristalina a $\langle \phi \rangle = 0$ en la fase fluida, tal como está previsto en la teoría de Halperin y Nelson.

Conferencia Invitada **Jueves 23, 9h30 - 10h30 :**

Interest-Rate Risk Management in Banking

Bruce M. Forrest

Swiss Bank Corporation, Zurich

An introduction to the analysis of interest-rate risks in banking will be given. The analytical tools which are nowadays necessary to properly assess the financial risks that a bank is exposed to have necessarily become more sophisticated. With the globalisation of financial markets and the rapid growth in the use of derivative products, these risks have become increasingly complex. The effect on a bank's balance sheet of future changes in interest rates (or foreign-exchange rates) are typically analysed with tools familiar to statistical physicists: the underlying models used for simulating various scenarios of possible interest-rate movements are based on stochastic calculus. Indeed, such stochastic models have become standardised and commonplace in evaluating interest-rate derivative products. The use of Monte Carlo simulations, which are also finding increasingly widespread use among financial institutions, will also be discussed. These are used in order to estimate the probability distribution of profit and loss, given the bank's current balance-sheet and possible future interest-rate developments.

Panel P37 :

RELAJACIONES PROPAGANTES EN UN MEDIO CONTINUO

J. Galeano ^{*,**} y M.A. Rubio ^{**}

^{*}*Dpto. Ciencia y Tecnología aplicadas a la I.T. Agrícola, U.P.M.
c/ Ciudad universitaria s/n, 28040-Madrid*

^{**}*Dpto. Física Fundamental, U.N.E.D.
c/ Senda del Rey s/n, 28040-Madrid.*

Presentamos nuevos resultados experimentales en un sistema que simboliza la dinámica de una falla de un terremoto. El sistema está formado por un gel confinado entre dos cilindros coaxiales, donde el cilindro interior gira con velocidad constante y el exterior se mantiene fijo.¹ La rigidez del gel se puede regular a través de la temperatura por medio de un baño térmico. Estudiamos las relajaciones en el campo de tensiones por medio de técnicas de fotoelasticidad.

Hemos encontrados diferentes regímenes: deslizamiento constante, relajaciones globales y soluciones propagantes. Todos estos regímenes experimentales observados son similares a las soluciones analíticas encontradas para el modelo de bloques y muelles², introducido por Burridge y Knopoff para modelizar la falla de un terremoto.³

También hemos encontrado otros regímenes donde coexisten varias ondas propagantes en el medio; utilizando la temperatura como parámetro de control aparecen transiciones entre regímenes con diferente número de zonas de relajación propagante. Este tipo de comportamiento coincide cualitativamente con simulaciones del modelo de Burridge y Knopoff.⁴

¹M.A. Rubio y J. Galeano, *Phys. Rev. E* **50**, 1000 (1994).

²J.M. Carlson and J.S. Langer, *Phys. Rev. A*, **40**, 6470 (1989).

³R. Burridge and L. Knopoff, *Bull. seism. Soc. Am.* **57**, 341 (1967).

⁴P. Español, *Phys. Rev. E* **50**, 227 (1994).

Panel P38 :

**ESTUDIO DE LA SUSCEPTIBILIDAD DINAMICA DE
PARTICULAS SUPERPARAMAGNETICAS MEDIANTE
DINAMICA MOLECULAR DE LANGEVIN**

J.L. García y F.J. Lázaro

*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón
Universidad de Zaragoza-CSIC. 50015 Zaragoza*

Panel P39 :

**COMPENSACIÓN DE LA DISPERSIÓN CROMÁTICA EN
FIBRAS NO LINEALES PARA PULSOS REALISTAS DE
DIODOS LÁSER EN SISTEMAS IM/DD A ALTA VELOCIDAD**

A. Sánchez Díaz y P. García Fernández

Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Serrano 123, 28006 Madrid

J.M. Soto Crespo

Instituto de Óptica, CSIC, Serrano 121, 28006 Madrid

Los efectos combinados de la dispersión cromática, *Efecto Kerr* y *chirp* del láser son numéricamente investigados para un sistema modulado en intensidad (IM/DD) a 10 Gbit/s en el esquema NRZ (Non Return to Zero) sobre un distancia de 100 Km de fibra estándar, considerando señales de entrada realistas obtenidas resolviendo las ecuaciones estocásticas de balance de láseres de semiconductor monomodo.

La pre- y postcompensación con fibra han sido estudiadas y comparadas resultando que la precompensación de la dispersión cromática conduce a una penalización de apertura de ojo (EOP, Eye Opening Penalty) menor que la postcompensación y a una independencia del EOP frente a la potencia de entrada para un intervalo considerable.

La longitud de onda del láser es de $1.55 \mu\text{m}$ y hemos analizado diferentes valores del factor de ensanchamiento de línea α (que está directamente relacionado con el *chirp* de láser), corriente de *bias* y longitud de la fibra.

La ecuación de Schrödinger No Lineal, que describe la propagación en la fibra, ha sido resuelta numéricamente mediante el *Split Step Fourier Method* para un coeficiente de dispersión lineal $\beta_2 = -16 \text{ ps}^2\text{Km}^{-1}$ y un parámetro no lineal $\gamma = 0.002 \text{ mW}^{-1} \text{ km}^{-1}$. Una vez propagado el tren de pulsos hemos calculado el EOP en el caso de pre- y postcompensación en función de la potencia de entrada en la fibra, corriente de *bias* y longitud del tramo de fibra compensadora (el coeficiente de dispersión es de signo opuesto).

Comunicación Oral **Jueves 23, 12h45 - 13h :**

TRANSICION DE FASE DE NO EQUILIBRIO EN UNA MEZCLA BINARIA

C. Marín, V. Garzó y A. Santos

*Departamento de Física, Universidad de Extremadura,
06071 Badajoz.*

Una transición de fase de no equilibrio es exactamente identificada a partir de una solución exacta de la ecuación de Boltzmann para moléculas de Maxwell [1]. Dicha solución describe una mezcla binaria bajo flujo tangencial uniforme en el límite de partículas trazadoras ($n_1/n_2 \ll 1$). Existe un valor crítico del gradiente de velocidades a_c (el cual depende de la razón de masas m_1/m_2 y de la razón de las constantes de fuerza κ_{22}/κ_{12}) tal que para gradientes de velocidad $a > a_c$, la especie 1 en defecto (cuya concentración es despreciable) tiene una contribución *finita* a las propiedades de la mezcla [2]. Dicha transición desaparece para valores suficientemente grandes de m_1/m_2 y/o κ_{22}/κ_{12} . Para potenciales repulsivos generales, el mismo problema es estudiado partiendo de un modelo cinético sencillo. Los resultados indican que dicha transición está también presente, aunque el fenómeno es menos intenso a medida que la repulsión se hace más dura [3].

1. C. Marín, V. Garzó, and A. Santos, Phys. Rev. E **52** 3812 (1995).
2. C. Marín, A. Santos, and V. Garzó, Europhys. Lett. **33** 599 (1996).
3. C. Marín and V. Garzó, Phys. Fluids. Enviado para su publicación.

Panel P40 :

**ALGUNOS ASPECTOS DE LA NUCLEACION ESPONTANEA
EN UN LIQUIDO L-J SUBENFRIADO MEDIANTE
DINAMICA MOLECULAR**

José Manuel Gómez Alós

*Universidad de Huelva. Dpto. Física Aplicada e Ingeniería Eléctrica.
E.P.S. La Rábida. Palos de la Frontera.
21819 Huelva*

José Gómez Ordóñez

*Universidad de Sevilla. Facultad de Física, Física Teórica, Apdo. Correos
1065,
41080 Sevilla*

Se sabe que la estructura más estable para los cristales de partículas interaccionando entre ellas con un potencial L-J es la fcc. Si se permite una nucleización espontánea manteniendo el sistema aislado, se observa, haciendo una análisis de los poliedros de Voronoi, que ésta es la estructura dominante. Sin embargo, si la temperatura del sistema se va reduciendo muy suavemente por debajo de la temperatura de fusión el sistema cae en estados bcc, de menor compactación que el fcc pero altamente metaestables.

Se establece una comparación entre los dos tipos de nucleización y, además, se examina la influencia de la temperatura y del número de partículas en la cristalización del sistema aislado.

Comunicación Oral **Jueves 23, 13h15 - 13h30** :

**TRANSPORTE EN UNIONES SEMICONDUCTORAS: UN
EJEMPLO DE
TRANSPORTE EN SISTEMAS CON UNA INTERFASE.**

G. Gomila y J.M. Rubí.

*Departament de Física Fonamental
Facultat de Física
Universitat de Barcelona
Diagonal 647, 08028 Barcelona*

Como ejemplo de transporte en sistemas con una interfase, hemos analizado los procesos de transporte a través de uniones semiconductoras. Para este fin hemos desarrollado, usando los métodos de la Termodinámica de No-Equilibrio, un modelo unidimensional general para describir los procesos de difusión-convección a través de las mismas [1]. Este modelo incluye desde un punto de vista fundamental tanto las ecuaciones que describen el transporte en las partes volúmicas del sistema, como las que rigen la evolución de las magnitudes interfaciales y las correspondientes condiciones de contorno (o relaciones de discontinuidad). Especial mención merecen estas últimas, por cuanto habitualmente no son incluidas desde un punto de vista fundamental en los modelos de transporte. Una característica relevante de estas condiciones de discontinuidad es que en general, y al contrario de lo que sucede en las partes volúmicas, relacionan de una manera no lineal las magnitudes relevantes en el transporte (flujos y fuerzas superficiales), como ha podido ser comprobado estudiando el problema de la emisión termoiónica en dichas uniones [2]. La generalidad en la formulación del modelo va a permitir la incorporación en el mismo de los efectos de las fluctuaciones de una manera inmediata.

Bibliografía:

- [1] G. Gomila y J.M. Rubí (enviado a publicar). Preprint en con-mat/9603066.
- [2] G. Gomila, A. Pérez-Madrid y J.M. Rubí (enviado a publicar). Preprint en cond-mat/9604105.

Panel P41 :

**SIMULACIONES PHASE FIELD PARA EL CRECIMIENTO
DE INTERFASES FUERTEMENTE ANISOTROPAS**

R. González Cinca y L. Ramírez-Piscina

*Dept. Física Aplicada, U.P.C., Campus Norte-B5, J. Girona Salgado s/n,
08034 Barcelona*

J. Casademunt y A. Hernández-Machado

Dept. E.C.M., Fac. de Física, U.B., Diagonal 647, 08028 Barcelona

L. Kramer

Ins. of Physics, U. Bayreuth, 95440 Bayreuth, Alemania

Á. Buka

*KFKI, Research Ins. for Solid State Physics, P.O.B. 49, 1525 Budapest,
Hungria*

Se presentan resultados de la aplicación del modelo *phase field* en el crecimiento de interfases que muestran una fuerte anisotropía en su tensión superficial. Se han estudiado las situaciones de cuasi-equilibrio y de crecimiento rápido para interfases nemático-esméctico-B. Las simulaciones reproducen cualitativamente la gran variedad de morfologías observadas en los experimentos para diferentes valores del enfriamiento (*undercooling*). Se obtiene desde formas facetadas en cuasi-equilibrio hasta dendritas muy desarrolladas cuando el enfriamiento es mucho mayor. Los ingredientes básicos que determinan el crecimiento son pues, la anisotropía en la tensión superficial y el *undercooling*, sin embargo efectos cinéticos pueden adquirir importancia en casos de gran enfriamiento y débil anisotropía. Finalmente, la introducción de un coeficiente de difusión anisótropo permite reproducir experimentos en los que se observa una asimetría en la velocidad de crecimiento de las dendritas.

Panel P42 :

**Dependencia con el retardo temporal de las soluciones
del modelo de regulación retardada**

J. Gorroñoigoitia, J.L. Cabrera y F.J. de la Rubia

*Depto. de Física Fundamental, U.N.E.D, Apdo. 60141,
28080 Madrid.*

En el estudio de procesos biológicos se han propuesto modelos discretos con retardo temporal. En este trabajo consideramos un modelo que ha encontrado aplicación en la biología de poblaciones y en el estudio de redes neuronales con periodo refractario: el modelo de regulación retardada. Estudiamos un aspecto particular de este modelo, la influencia del valor del retardo sobre las características de su solución, investigando el comportamiento bifurcativo del sistema y las propiedades de su solución alrededor de la bifurcación de Hopf. Calculamos el espectro de Lyapunov de este sistema dinámico multidimensional, analizando la estabilidad de sus soluciones. Finalmente, consideramos otros parámetros estadísticos como la dimensión y la entropía del sistema. Encontramos que un aumento en la magnitud de la memoria reduce la región de parámetros donde el sistema presenta soluciones acotadas.

Panel P43 :

VELOCIDAD DE PROPAGACIÓN DE LA SINCRONIZACIÓN EN SISTEMAS DE LORENZ CONECTADOS.

J. Güémez and C. Martín

*Departamento de Física Aplicada. Univ. de Cantabria.
39005 Santander.*

M. A. Matías

*Area de Física Teórica. Univ. de Salamanca.
37008 Salamanca.*

Se estudia la velocidad de propagación de la sincronización en sistemas de Lorenz conectados y se relaciona esta velocidad con el exponente de Liapunov transverso más alto que caracteriza la conexión director-seguidor entre dos sistemas.

Los sistemas caóticos se conectan utilizando un nuevo método de sincronización introducido recientemente [Phys. Rev. E **52**, R2145 (1995)], una modificación del método de sincronización de Pecora y Carroll, y se utilizan diferentes geometrías de conexión, en cascada y en alternancia, para llevar a cabo este estudio.

Los resultados obtenidos indican que para conjuntos homogéneos (todos los sistemas evolucionan con el mismo conjunto de parámetros) de sistemas caóticos el número de sistemas sincronizados aumenta linealmente con el tiempo. A su vez, las diferentes velocidades de propagación de la sincronización, es decir, para conjuntos homogéneos con diferentes parámetros, se relacionan de forma exponencial con el mayor exponente de Liapunov transverso de la conexión director-seguidor correspondiente.

Comunicación Oral **Viernes 24, 13h - 13h15** :

UNA INESTABILIDAD TIPO ECKHAUS PARA ONDAS TURBULENTAS

Raúl Montagne^{1,*}, Emilio Hernández-García^{1,2} y Maxi San Miguel^{1,2}

¹*Departament de Física, Universitat de les Illes Balears*

²*Instituto Mediterráneo de Estudios Avanzados (CSIC-UIB)
07071 Palma de Mallorca*

**Dirección permanente: Universidad de la República (Uruguay)*

La caracterización de fases y transiciones de fase entre estados espacio-temporalmente caóticos es un campo de intensa actividad actual. Una de las preguntas que empuja estos estudios es determinar de qué manera las ideas de la mecánica estadística pueden ser útiles en la descripción de sistemas complejos fuera del equilibrio.

Uno de los modelos paradigmáticos en el estudio de caos espacio-temporal es la ecuación de Ginzburg-Landau compleja (CGLE). Es una ecuación de amplitud para los modos inestables en una bifurcación de Hopf en sistemas extendidos. Convección en mezclas binarias de fluidos, efectos transversales en láseres de área ancha, o turbulencia química, son situaciones que pueden ser descritas por la CGLE en el adecuado rango de parámetros.

Damos aquí una caracterización del régimen denominado de turbulencia de fase en términos de un número de rotación (winding number). Esta cantidad juega el papel de un parámetro de orden clasificando diferentes fases. Mostramos que en el régimen de turbulencia de fase se produce una inestabilidad (con similitudes cualitativas con la inestabilidad de Eckhaus) tal que el número de rotación es una cantidad conservada sólo si toma valores dentro de un cierto rango. Interpretamos la transición entre el régimen de turbulencia de fase y el de turbulencia de amplitud (otra fase desordenada de la CGLE) como una restauración de ergodicidad que ocurre cuando el rango de números de rotación conservados tiene anchura cero. Se describen también diferentes estados desordenados de turbulencia de fase a número de rotación no nulo.

Panel P44 :

**CORRIENTES SOSTENIDAS POR RUIDO EN
TURBULENCIA CUASIGEOSTRÓFICA SOBRE
TOPOGRAFÍA**

Alberto Álvarez¹, Emilio Hernández-García^{1,2} y Joaquín Tintoré^{1,2}

¹*Departament de Física, Universitat de les Illes Balears*

²*Instituto Mediterráneo de Estudios Avanzados (CSIC-UIB)*

07071 Palma de Mallorca

Estudiamos el efecto de un término de forzamiento estocástico en las ecuaciones cuasigeostróficas para un modelo simple de dinámica oceánica, teniendo en cuenta disipación y la topografía del fondo marino. El resultado es la aparición de corrientes promedio que siguen las líneas de profundidad constante. El efecto requiere la presencia tanto del término no lineal como del término estocástico en las ecuaciones, y puede entenderse como la organización del aporte estocástico de energía por el efecto combinado de no linealidad y topografía. El estado estadísticamente estacionario es bien descrito por una distribución canónica generalizada con energía media y entropía media determinadas por un balance entre forzamiento y disipación. Un *coarse-graining* de las pequeñas escalas permite explicar el fenómeno en términos de una viscosidad efectiva que empuja el sistema no hacia el reposo, sino hacia un estado con corrientes siguiendo la topografía.

Conferencia Invitada **Viernes 24, 9h - 10h** :

SIMULACION DE CRISTALES LIQUIDOS DIPOLARES

Simon McGrother, Alejandro Gil-Villegas, George Jackson

Department of Chemistry. University of Sheffield, Sheffield S37HF, U.K.

El efecto de un dipolo sobre las transiciones de fase en sistemas de cristales líquidos se estudia con el método de Monte Carlo. El modelo es un esferocilindro duro con un dipolo puntual en el centro con diferentes orientaciones. El dipolo desestabiliza la fase nemática pero estabiliza la fase esméctica especialmente a temperaturas bajas. Aparecen fases moduladas con vórtices en el plano esméctico para el sistema con un dipolo transversal. Se examina la implicación de nuestros resultados para comprender sustancias reales.

Panel P45 :

**STATISTICAL MECHANICS OF THE INFORMATION
PROCESSING
BY A PERCEPTRON IN THE PRESENCE OF INPUT AND
OUTPUT NOISE**

E.Korutcheva, A.-M.Turiel , J.-P.Nadal and N.Parga
Universidad Autonoma de Madrid, Canto Blanco, 28049 Madrid, Spain
and Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris, France

By using statistical mechanics techniques we investigate the information processing in the case of a network with perceptron architecture , binary outputs and noisy inputs in the context of an unsupervised learning task. The network is asking to provide the best possible neural representation of a given input distribution by using different criteria from information theory ^{1,2}. It is shown that a network with a large number of binary outputs transmits the same amount of information as a particular linear network with an effective quantization output noise ³. The effect of the input noise is analytically studied in different asymptotic regimes of the parameters also within the optimization problem and the results are compared to the noiseless case ⁴ .

Similar investigations are performed in the case of a neural network with stochastic outputs ⁵. We generalize the investigation of J.-P. Nadal and N.Parga , performed for a deterministic channel ⁴, using again Replica Symmetry (RS) technique. Moreover, we find an exact, non RS ansatz using derivation for the Mutual Information (MI) for small values of α - the parameter of loading. Finally, using exact analytical methods we show that a phase transition of the behavior of the MI for some finite value of α could exist.

1. R. Linsker *Self-organization in a perceptual network*, Computer , 21(1988)105.
2. J.J.Atick and A.Redlich *Towards a theory of early visual processing* Neural Computation 2(1990)308.
3. E.Korutcheva, J.-P.Nadal and N.Parga, preprint 1995.
4. J.-P.Nadal and N.Parga *Information processing by a perceptron in an unsupervised learning task* Network 4(1993)295.
5. A.-M.Turiel, E.Korutcheva and N.Parga , Preprint UAM'96.

Panel P46 :

**EFEECTO DE LA INTERACCION LATERAL EN EL
COMPORTAMIENTO
OSCILATORIO DE LA OXIDACION DEL MONOXIDO DE
CARBONO**

M.C. Lemos, J.J. Luque y F. Jiménez-Morales

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Sevilla,
P.O.Box 1065, 41080-Sevilla.*

A partir de un modelo cinético basado en la oxidación del monóxido de carbono sobre una superficie sólida, hemos obtenido biestabilidad y oscilaciones de concentraciones y temperatura para ciertos valores de los parámetros que caracterizan el modelo. Las ecuaciones cinéticas para las densidades de monómeros, n_{CO} y n_O , y parejas, n_{CO-CO} , n_{CO-O} y n_{O-O} , se obtienen usando una aproximación de cierre de tipo campo medio y se completan con una ecuación para la temperatura de la superficie con el fin de analizar especialmente el comportamiento oscilatorio de la reacción. Hemos considerado explícitamente la interacción entre las especies adsorbidas más inmediatas al objeto de estudiar cómo afecta dicha interacción en el comportamiento oscilatorio de la oxidación del monóxido de carbono. Así, cuando sólo se considera una interacción atractiva entre parejas CO-CO y O-O, se facilita la formación de parejas CO-O y, por tanto, se favorece la producción de CO_2 . De este modo, la densidad de parejas CO-O es mayor que en el caso en el que la interacción no se considere. Resumiendo, una interacción que facilite la formación de parejas CO-CO y O-O aumenta la producción de parejas CO-O y dificulta el envenenamiento de la superficie.

Comunicación Oral **Jueves 23, 18h45 - 19h :**

COMPORTAMIENTO ANOMALO DE LOS PROCESOS DE CRECIMIENTO DE SUPERFICIES NO AUTOAFINES

Juan M. López y Miguel A. Rodríguez

*Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC), Avda. Los Castros, E-39005
Santander, Spain.*

En la teoría de scaling que describe los procesos de crecimiento de superficies e interfases rugosas, la hipótesis de auto-afinidad constituye el ingrediente principal. El scaling habitual de la interfase es conocido como *hipótesis de scaling dinámico de Family-Vicsek* y su validez se ha comprobado en numerosos experimentos y modelos numéricos. Estudios recientes en ecuaciones relacionadas con el crecimiento epitaxial por haces moleculares (MBE) han demostrado que en el caso de super-rugosidad (*i.e.* exponente de rugosidad $\chi > 1$) el scaling de la interfase es *anómalo* en el sentido de que el *ansatz* de Family-Vicsek no se cumple. Se piensa que esta anomalía es debida al carácter no auto-afín de una interfase con $\chi > 1$. En este trabajo presentamos resultados recientes que muestran que el scaling de Family-Vicsek falla también en casos en los que la rugosidad sea $\chi < 1$. Mediante la comparación de resultados analíticos con simulaciones de una serie de modelos que incluyen subdifusión, ruido térmico y/o desorden congelado, encontramos que la propiedad de auto-afinidad es mas una excepción que una regla. Nuestro análisis indica que solo pueden existir superficies auto-afines para exponentes de rugosidad $\chi = 1/2, 1$. Guiados por los resultados analíticos en nuestros modelos, proponemos un nuevo scaling para describir la interfase que explica satisfactoriamente el *scaling anómalo* y está en excelente acuerdo con las simulaciones.

Panel P47 :

INTERFASES RUGOSAS EN MEDIOS POROSOS

Juan M. López y Miguel A. Rodríguez

*Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC), Avda. Los Castros, E-39005
Santander, Spain.*

En los últimos años se ha venido trabajando intensamente en el problema de la dinámica de interfases rugosas moviéndose en un medio con desorden estático o congelado (quenched disorder). Este es un problema muy general con numerosas aplicaciones como el desplazamiento de fluidos en medios porosos, frentes de quemado, fracturas, etc. Los experimentos que se han realizado en algunos de estos sistemas han hecho pensar en la posibilidad de una descripción unificada en unas pocas Clases de Universalidad. Sin embargo, existen grandes discrepancias entre las observaciones experimentales y los análisis tanto teóricos como numéricos. La teoría estandar supone que la interfase rugosa es auto-afín y que la dinámica puede caracterizarse mediante la hipótesis de *scaling* dinámico de Family-Vicsek que se ha demostrado tan útil en muchos otros problemas de crecimiento de superficies rugosas. En nuestras simulaciones demostramos que realmente la interfase no es auto-afín de manera que el *scaling* dinámico falla para este problema. Aplicamos un nuevo *ansatz* para describir la interfase en acuerdo excelente con las simulaciones y experimentos. La conclusión más importante es que el exponente de rugosidad medido en los experimentos debe verse como un exponente efectivo y que el exponente real queda fuera del alcance de los experimentos por los métodos habituales.

Comunicación Oral **Jueves 23, 11h15 - 11h30** :

**Temperature and field assisted tunneling in Mn12Ac studied with
ac magnetic susceptibility**

F. Luis, J. Bartolomé, and J. F. Fernández

*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, Univ. de Zaragoza- C.S.I.C.
50009 Zaragoza*

J. Tejada, J. M. Hernández and X.X. Zhang

*Facultat de Física, Universitat de Barcelona
08028 Barcelona*

R. Ziolo

*Wilson Center for Research and Technology, Xerox Corporation, Webster
NY
14580 USA*

The magnetic ac susceptibility χ of oriented Mn12Ac crystallites has been measured as a function of temperature, field, and frequency. The field has been applied at different values of the angle θ with respect to the sample easy axis. For $T=5$ K, the isothermal and adiabatic limits of χ have been determined as a function of field. For $\theta = 0$ and intermediate frequencies, Lorentzian shaped peaks have been observed at magnetic field values $H_n = nH_1$ where $H_1 = 4.1$ kOe. As θ increases, these maxima shift to higher fields and decrease in amplitude. The relaxation time follows Arrhenius law with respect to temperature and decreases sharply at $H = H_n$. The observed phenomenology unambiguously proves the existence of resonant tunneling between excited magnetic states which are thermally populated. At 5K, the effective activation energy, the average tunneling frequency, and the spin levels involved in the tunneling process have been experimentally obtained. The eigenvalues and eigenvectors of the Mn12Ac molecule spin Hamiltonian have been numerically obtained as a function of H and θ . As a result, the magnetic relaxation time has been calculated considering coherent (quantum tunneling) and incoherent (phonon induced) transitions between states of different spin orientation. Its calculated field dependence reproduces the experimentally observed behaviour.

Panel P48 :

**Resultados exactos en dinámica de competición de dedos
de Saffman-Taylor sin tensión superficial**

F.X.Magdaleno y J. Casademunt,

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de
Barcelona,*

Av. Diagonal 647, 08028 Barcelona.

Hemos estudiado una clase de soluciones integrables no singulares a todo tiempo en el problema de Saffman-Taylor en ausencia de tensión superficial. Este subespacio de soluciones contiene situaciones con uno o dos dedos y permite por tanto estudiar la dinámica de competición de dedos. En estas condiciones, y utilizando técnicas de representación conforme, hemos determinado exactamente la cuenca de atracción de la solución estacionaria de un solo dedo. Se obtienen nuevos puntos fijos inexistentes para el problema físico (con tensión superficial). La dependencia de los mismos en la anchura de los dedos define una anchura crítica, $\lambda_c = 1/3$, que separa comportamientos dinámicos cualitativamente diferentes. Estos resultados son relevantes para la discusión del papel de la tensión superficial en la dinámica de competición de dedos y en general para problemas de apantallamiento en crecimiento laplaciano.

Comunicación Oral **Jueves 23, 11h - 11h15 :**

MODOS INTRINSECOS LOCALIZADOS: EXISTENCIA Y ESTABILIDAD

J. L. Marín, S. Aubry[†] and L. M. Floría
*Dept. de Física de la Materia Condensada
Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza
Zaragoza 50009, Spain*

[†]*Laboratoire Léon Brillouin (CEA-CNRS)
CE Saclay
91191 Gif-Sur-Yvette Cedex, France*

Recientemente se ha descubierto que los sistemas de osciladores acoplados, dotados de suficiente no-linealidad y en el régimen de alta discretitud espacial, poseen un nuevo tipo de soluciones periódicas y altamente localizadas, a las que se ha dado en llamar ‘modos intrínsecos localizados’. Estos modos pueden parecer el análogo de las soluciones tipo ‘breather’ de sistemas continuos, pero las diferencias son fundamentales: la discretitud es el requisito fundamental, y ante todo se trata de un fenómeno *genérico*, robusto ante perturbaciones, y que se presenta en cualquier modelo que cumpla unas condiciones muy simples. En el presente trabajo se presentan numerosos ejemplos, con las técnicas de cálculo directamente derivadas de los teoremas de existencia de MacKay-Aubry. También se presentan las técnicas de análisis de estabilidad lineal de estas soluciones, con algunos resultados relevantes.

Panel P49 :

Propagación de frentes de reacción difusión en medios turbulentos

A.C. Martí, J.M. Sancho

*Department d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de
Barcelona,
Av. Diagonal 647, E-08028 Barcelona España.*

F. Sagués

*Department de Química Física, Universitat de Barcelona,
Av. Diagonal 647, E-08028 Barcelona España.*

Se estudia la propagación de frentes de reacción difusión en medios turbulentos con especial interés en los problemas de combustión. Se distinguen dos diferentes modos de propagación: el “thin flame” y el “distributed reaction zone.” Mediante un algoritmo de generación de campos turbulentos se simula numericamente el sistema. Se calcula la velocidad de propagación y se comparan los resultados con diferentes modelos propuestos en la literatura.

Panel P50 :

**TRANSICIONES DE FASE EN PELICULAS DELGADAS DE
ESMECTICO.**

Y.Martínez , A.M.Somoza, L.Mederos.

*Instituto de Ciencia de Materiales, Consejo Superior de Investigaciones
Científicas.*

D.E. Sullivan.

Dpto. de Física, Universidad de Guelph.

Experimentos recientes en sistemas constituidos por cristales líquidos muestran cuan importantes pueden ser las películas delgadas de esméctico suspendidas en vapor (“freely suspended films”) para el estudio de transiciones de fase en sistemas donde los fenómenos de superficie juegan un papel fundamental. En particular, se ha observado un fenómeno inusual: consecutivas transiciones de n a $n-1$ capas de esméctico en estas películas al ir calentando la muestra, que al fundirse por el centro, contribuyen a disminuir su grosor (“thinning transitions”).

Mediante un modelo de funcional de la densidad de cristal líquido, que estudia adecuadamente las posibles interfases, se predicen dichas transiciones, dándose una explicación a nivel microscópico del fenómeno.

Igualmente se estudian los fenómenos “wetting” y “layering” (crecimiento por capas de la fase esméctico) en la interfase entre fases isotropas y las posibles interrelaciones entre estos y el fenómeno “thinning”.

Conferencia **Jueves 23, 12h - 12h30** :

SINCRONIZACION DE CIRCUITOS CAOTICOS

Manuel A. Matías

*Física Teórica, Facultad de Ciencias, Universidad de Salamanca, 37008
Salamanca*

Julio Güémez

*Departamento de Física Aplicada, Universidad de Cantabria, 39005
Santander*

A pesar de la sensibilidad a las condiciones iniciales que caracteriza a los sistemas caóticos, en los últimos años se ha demostrado la posibilidad de sincronizar sistemas caóticos [1, 2]. En este trabajo se discutirá un nuevo método [3] de sincronizar sistemas caóticos que supone una modificación del método de Pecora-Carroll [2], y que consiste en la inyección unidireccional de una señal por parte de un sistema director a un segundo sistema que actuará como respuesta. Se discutirá la aplicación a cascadas de varios sistemas caóticos conectados [4] y la posibilidad de imponer el comportamiento deseado a un sistema dinámico no lineal [5]. También se discutirán otros aspectos, tales como las diferentes formas en las que los sistemas pueden aproximarse al estado sincronizado, y las condiciones generales de estabilidad del estado sincronizado para diferentes tipos de configuraciones. Por otra parte, este tipo de trabajos ofrecen una excelente oportunidad de estudiar la aparición de nuevos comportamientos en sistemas dinámicos que resultan del acoplamiento de unidades de baja dimensión. Se ilustrarán algunos de tales resultados con ejemplos resultantes de la aplicación del presente método de conexión a diferentes sistemas dinámicos. Un aspecto importante es la aplicación al caso de sistemas experimentales que presentan caos determinista. Se presentarán resultados obtenidos en el caso de circuitos electrónicos de Chua [6]. Por último se discutirá la posible relevancia de estas ideas en el campo de la Biofísica, y, en concreto, en el estudio de sistemas de neuronas acoplados [7]. Estudios fisiológicos muestran que el papel del caos puede ser constructivo en este tipo de sistemas [8], y también el importante papel que en los procesos perceptivos juega la sincronización entre diferentes áreas del cerebro [9].

References

- [1] H. Fujisaka and T. Yamada, Prog. Theor. Phys. **69**, 32 (1984).
- [2] L.M. Pecora and T.L. Carroll, Phys. Rev. Lett. **64**, 821 (1990); Phys. Rev. A **44**, 2374 (1991).
- [3] J. Güémez and M.A. Matías, Phys. Rev. E **52**, R2145 (1995).
- [4] J. Güémez and M.A. Matías, Phys. Rev. E **53**, 3059 (1996).

- [5] M.A. Matías and J. Güémez, *Phys. Lett. A* **209**, 48 (1995).
- [6] M.N. Lorenzo, I.P. Mariño, V. Pérez-Muñuzuri, M.A. Matías, and V. Pérez-Villar, (enviado).
- [7] J. Güémez and M.A. Matías, *Physica D* (en prensa).
- [8] C. Skarda and W.J. Freeman, *Behav. Brain Sci.* **10**, 170 (1987); W.J. Freeman, *Sci. Am.* **264**(2), 34 (1991).
- [9] W. Singer, *Ann. Rev. Physiol.* **55**, 349 (1993).

Comunicación Oral **Jueves 23, 10h45 - 11h :**

**PROPIEDADES DE EQUILIBRIO DE UNA ESCALERA DE
UNIONES JOSEPHSON CON EFECTOS DE
APANTALLAMIENTO**

Juan J. Mazo

*Departamento de Física de la Materia Condensada, Instituto de Ciencia de
Materiales de Aragón. Universidad de Zaragoza, C.S.I.C., E-50009
Zaragoza, Spain.*

José C. Ciria

*Dipartimento di Fisica, Università di Roma Tor Vergata.
Via della Ricerca Scientifica 1, 00133 Roma, Italy.*

Hemos calculado el diagrama de fases de los estados fundamentales de una escalera de uniones Josephson, incluyendo los efectos de apantallamiento del campo. Estudiamos las configuraciones de estado fundamental en función del campo externo, la longitud de penetración y la anisotropía de la escalera. Obtenemos una serie de regiones caracterizadas por la densidad media de vórtices. La densidad media de vórtices del estado fundamental, como una función del campo externo, es una Escalera del Diablo, con un peldaño a cada valor racional de esta densidad. La anchura de los peldaños depende fuertemente de la aproximación realizada al calcular el efecto de las inducciones: si se considera una matriz con sólo autoinducciones, la fase sin vórtices tiende a ocupar todo el diagrama, cuando la longitud de penetración disminuye. Sin embargo, cuando la matriz total de inducciones es considerada, la anchura de cualquier peldaño tiende a un valor no nulo en el límite de longitud de penetración muy pequeña. También hemos analizado la estabilidad de algunas fases metaestables sencillas: la presencia de campos inducidos aumenta los intervalos de estabilidad.

Panel P51 :

**EFEECTO DE LAS INTERACCIONES ATRACTIVAS EN EL
DIAGRAMA DE FASES DE UN MODELO DE CRISTAL
LIQUIDO**

E. de Miguel

*Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear
Universidad de Sevilla, Apto. 1065, Sevilla 41080*

E. Martín del Río

*Departamento de Física Aplicada e Ingeniería Eléctrica
Universidad de Huelva, Ctra. Palos de la Frontera s/n
21819 La Rábida, Huelva*

Presentamos un estudio por simulación en ordenador del diagrama de fases del modelo de Gay-Berne. El efecto de las interacciones anisótropas atractivas es analizado variando un parámetro que controla la anisotropía energética κ' para un valor fijo de la elongación molecular κ . Se llevaron a cabo simulaciones de Dinámica Molecular a densidad y temperatura constantes a lo largo de varias isothermas obteniéndose valores aproximados de las correspondientes densidades de transición. Los resultados indican que, para un valor de $\kappa = 3$, el orden esméctico se estabiliza a partir de valores de la densidad decrecientes a medida que κ' aumenta. Cuando disminuye κ' , la fase nemática se vuelve estable para valores cada vez menores de la temperatura. Además hemos estudiado la región de coexistencia líquido-vapor para diferentes valores de κ' usando simulación Monte Carlo en el colectivo de Gibbs y el método de Gibbs-Duhem. Hemos encontrado evidencias de la existencia de un punto triple vapor-isótropo-nemático para $\kappa' = 1$ y $\kappa' = 1.25$. Para temperaturas por debajo de este punto triple, el modelo presenta coexistencia nemático-vapor.

Conferencia **Viernes 24, 12h - 12h30** :

Métodos de Física Estadística en las Comunicaciones Ópticas

Claudio R. Mirasso

*Departament de Física, Universitat de les Illes Balears,
07071 Palma de Mallorca, Spain.*

El ruido de emisión espontánea, así como otras fuentes de ruido, pueden afectar fuertemente a los sistemas de comunicaciones ópticas funcionando a altas velocidades de transmisión (Gbits/s). Esto se refleja claramente en la degradación de la señal transmitida. Algunos componentes del sistema como los emisores de luz, amplificadores y receptores, entre otros, ven alteradas sus propiedades debido al ruido.

En esta charla describiremos algunos de los efectos más importantes, tales como dispersiones de tiempos de encendido del láser, de frecuencia óptica durante el encendido o el efecto de "Gordon-Haus" en la fibra y veremos cómo algunas de estas cantidades pueden ser estimadas, con buena precisión, analíticamente.

Panel P52 :

COMPORTAMIENTO HIDRODINAMICO DE UNA PARTICULA DE SOLUTO

Juan J. Morales, María J. Nuevo

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura
06071 Badajoz.*

David H. Heyes

*Department of Chemistry, University of Surrey,
Guildford GU2 5SH, Inglaterra.*

Se ha estudiado el comportamiento hidrodinámico de una partícula de soluto, de diferentes volúmenes, inmersa en un disolvente compuesto de $(N - 1)$ partículas. El potencial de interacción utilizado ha sido un Lennard-Jones repulsivo y el estudio se ha realizado para diversos tamaños del sistema, desde $N = 108$ hasta $N = 2048$ partículas, utilizando el formalismo isotérmico-isocórico de Nosé-Hoover de la Dinámica Molecular. La partícula de soluto era sometida a una velocidad fija respecto a las del disolvente, y se calculaba la fuerza media sobre la misma, realizándose este proceso para diversos valores de la velocidad. Los resultados obtenidos de las simulaciones demuestran que la relación lineal entre la fuerza de resistencia y la velocidad de la partícula, postulado por la ley de Stokes, se verifica para un rango de velocidades relativamente grande. Sin embargo, se ha observado una fuerte influencia de la finitud de los sistemas más pequeños ($N = 108$ y 256) sobre el comportamiento de la partícula de soluto, cuando el diámetro de ésta es muy grande con respecto al del disolvente. También en estos sistemas se verifica una ruptura de la linealidad de la ley de Stokes, llegándose a un máximo en la fuerza de reacción sobre el soluto, para las velocidades de arrastre más grandes. Por último, se ha realizado una comprobación del valor de la constante de proporcionalidad que establece la ley de Stokes y se ha encontrado que, incluso en el límite lineal en que se imponen velocidades tendiendo a cero, existe una convergencia muy lenta al límite termodinámico.

Panel P53 :

PROPAGATION OF TRIGGER WAVES IN A DISORDERED MEDIUM

J.M. Noriega

Depto. de Matemáticas, Universidad de Oviedo, Calvo Sotelo, s/n 33007 Oviedo.

M.A. Rodríguez and L. Pesquera

Inst. de Física de Cantabria, C.S.I.C.- Univ. Cantabria, 39005-Santander.

Disorder is an essential component of many physical systems. Their effects, well known in linear systems [1], are under investigation in nonlinear systems [2]. We illustrate these behaviours by means of reaction-diffusion models with analytical solutions.

We first analyze disorder effects in the case of a bistable medium given by:

$$\partial_t u(x, t) = \partial_x D(x) \partial_x u(x, t) + f(u) \quad (1)$$

where $f(u)$ a piecewise-linear function with two stable stationary states. The fundamental form of a pattern in bistable media is a trigger wave, which represents a propagation front of transition from one stationary state into the other [3]. The effects of disorder are modeled taking $D(x)$ as a Generalized Poissonian Random Field (GPRF), whereas in an ordered case $D(x) = D = \text{constant}$.

In the case of adiabatic propagation (wave formation faster than the wave propagation) with large correlation length for the field, the wave should propagate adiabatically following the variation of the field, as we have corroborated performing simulations with a GPRF. We obtain analytical expressions for the velocity and width of the wave, and the corresponding mean velocities coincide with numerical simulations. Finally, we saw that $v(x) \approx D(x)^{\frac{1}{2}}$. In a non adiabatic case, with a weak-intensity white noise, we ascertain that the velocity depends linearly on the intensity of the noise, that is the relevant parameter in this case.

In the case of waves performing transitions from unstable stationary states, we have the same Eq. (1), being $f(u)$ a piecewise-linear function with two roots, corresponding to an unstable and a stable stationary state. Here, in the homogeneous case, there is a family of solutions, the minimal velocity corresponding to *natural* propagation. Modeling the disorder as above, we have performed simulations in the adiabatic case, concluding that the natural velocity is always selected. In this case, with an unstable and a stable stationary states, the observed behaviour for the wave is similar to the case with two stable stationary states, in the adiabatic and non adiabatic situations.

References.

1. P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. 57, 287 (1985). S. Alexander, J. Bernasconi, W.R. Schneider, R. Orbach,
2. W. Zimmermann, M. Seesselberg, F. Petruccione P.R.E. 48, 2699 (1993).
3. Foundations of Synergetics I. Distributed Active Systems, A.S. Mikhailov, Ed. Springer-Verlag (1990).

Panel P54 :

DINAMICA DE SISTEMAS DE ESFERAS DURAS DISIPATIVAS

José A.G. Orza y Ricardo Brito
Departamento de Física Aplicada I
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense
28040 Madrid

Twan P.C. van Noije y Matthieu H. Ernst
Instituut voor Teoretische Fysica
Rijksuniversiteit te Utrecht
POB 80006, Princetonplein 5, 3508 TA Utrecht

La materia granular está presente de muy diversas formas en la naturaleza (como polvo, granos de arena, semillas, cereales, materia interestelar...) y es de interés en procesos industriales. Está compuesta por partículas macroscópicas sólidas que se frenan cuando interaccionan con sus congéneres, y por su comportamiento no se puede englobar en ninguno de los grupos habituales de sólido, líquido o gas. En este trabajo estudiamos un sistema de discos duros como modelo de los medios granulares rápidos. En su dinámica, estos discos duros conservan el momento lineal pero no la energía, que es disipada en cada colisión de forma proporcional a la velocidad relativa sobre la línea que une las partículas incidentes.

Presentamos resultados de simulaciones con distintos coeficientes de disipación, que son comparados con las teorías existentes, basadas bien en la Ecuación de Boltzmann, de Enskog, o en algún otro modelo cinético. Estudiamos el estado de enfriamiento homogéneo del sistema, analizando funciones de distribución de velocidades y midiendo sus posibles desviaciones respecto a la distribución maxwelliana. También medimos las funciones de correlación, que muestran más estructura que sus equivalentes para sistemas elásticos. Asimismo se observa y estudia el fenómeno de la formación de agregados o *clustering* y la aparición de vórtices, producidos como consecuencia de la pérdida continua de energía en la dinámica.

Panel P55 :

**ORDENAMIENTO DE LOS GRUPOS BF_4 EN $(\text{CH}_3)_4\text{NBF}_4$:
EXPERIMENTAL Y SIMULACION MONTECARLO**

E. Palacios, J. J. Melero y R. Burriel

*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC - Universidad de
Zaragoza, 50009 Zaragoza.*

P. Ferloni

*Dipto. di Chimica Fisica y CSTE-CNR, Università di Pavia, 27100 Pavia,
Italia.*

El compuesto $(\text{CH}_3)_4\text{NBF}_4$ tiene estructura tetragonal ($P4/nmm$, $Z = 2$) a temperatura ambiente, con parámetros de red $a = 8.204(2)$ Å, $c = 5.798(2)$ Å a 200 K. Puede describirse como un empaquetamiento de moléculas BF_4^- y $(\text{CH}_3)_4\text{N}^+$ formando una red tipo CsCl ligeramente distorsionada, donde cada BF_4^- ocupa al azar una de 4 posibles orientaciones energéticamente equivalentes. A 158.1 K sufre una transición a otra fase que, estudiada por difracción de rayos X, resulta ser tetragonal ($P4_21m$, $Z = 4$) con parámetros de red $a = 11.556(2)$ Å, $c = 5.718(1)$ Å a 120 K. La única diferencia significativa con la fase de temperatura ambiente es que los BF_4^- escogen una sola de las 4 orientaciones, de forma espacialmente ordenada, en una distribución antiferro-orientacional con 4 subredes.

La capacidad calorífica coincide excepcionalmente bien con la predicción de la teoría de Landau para transiciones de fase débilmente de primer orden, cuando el coeficiente del término de cuarto orden en el desarrollo de la energía libre es negativo.

Para buscar la naturaleza de la interacción que produce el ordenamiento, se ha realizado una simulación Montecarlo basada en la interacción electrostática. La distribución de carga del BF_4^- se ha considerado tetraédrica con cargas puntuales. Las 4 orientaciones de equilibrio vienen determinadas por la interacción de cada BF_4^- con sus 8 primeros vecinos $(\text{CH}_3)_4\text{N}^+$. Las diferentes energías de interacción dependen de las orientaciones relativas entre los BF_4^- más próximos. Esta interacción es esencialmente octopolar. La interacción entre moléculas situadas en una capa horizontal es mucho más intensa que entre moléculas de dos capas diferentes por lo que la simulación se ha realizado en una red bidimensional de 50x50 moléculas. Para termalización se ha usado un algoritmo de Metrópolis.

Los resultados coinciden con los experimentales en el tipo y temperatura de ordenamiento, pero no en la forma de la anomalía de la capacidad calorífica, ni en la variación del parámetro de orden con la temperatura, que se apartan sensiblemente de la predicción de Landau, por lo que podemos concluir que la interacción octopolo-octopolo es la responsable del ordenamiento, si bien la bidimensionalidad es una sobresimplificación del fenómeno.

Conferencia **Jueves 23, 17h - 17h30** :

EFICIENCIA DE MOTORES BROWNIANOS

Juan M.R. Parrondo

Dpto. de Física Aplicada I, Universidad Complutense, 28040 Madrid.

Pep Español

Dpto. de Física Fundamental, UNED, 28040 Madrid.

Los motores brownianos, motores moleculares o “ratchets” (ruedas dentadas), son sistemas en donde existe una corriente neta de partículas brownianas en una cierta dirección sin la presencia de gradientes o fuerzas macroscópicas. Son necesarios dos ingredientes para que un sistema presente este tipo de fenómeno: que el potencial en el que las partículas se mueven no sea invariante bajo inversión en la dirección en la que se produce la corriente, y algún mecanismo por el cual el sistema se mantenga fuera del equilibrio térmico. Estos mecanismos pueden ser fuerzas externas fluctuantes que no impliquen gradientes macroscópicos, reacciones químicas alejadas del equilibrio o la presencia de dos baños térmicos a distintas temperaturas.

Uno de los problemas abiertos en este campo es la definición y el cálculo de la eficiencia de un motor browniano. Aquí nos ocuparemos del cálculo de la eficiencia en motores que se mantienen fuera del equilibrio por estar acoplados a dos baños térmicos y para los cuales son válidas las ideas sobre máquinas térmicas habituales en Termodinámica. Estudiaremos como caso particular la rueda dentada propuesta por Feynman en sus *Lectures*, revelando algunos puntos débiles de su análisis.

Comunicación Oral **Jueves 23, 18h30 - 18h45 :**

RUGOSIDAD E INESTABILIDADES MORFOLOGICAS EN CRECIMIENTOS COMPACTOS ELECTROQUIMICOS

J.M. Pastor y M.A. Rubio

Dpto. Física Fundamental, U.N.E.D.

c/ Senda del Rey s/n, 28040-Madrid.

En el presente trabajo presentamos resultados experimentales sobre diversos regímenes de crecimiento compacto electroquímico. El sistema experimental consiste en una celda electroquímica quasi-bidimensional. Los electrodos son 2 finas láminas ($10 \mu m$) de cobre y la disolución es sulfato de cobre de gran pureza. Los crecimientos han sido realizados a corriente constante, con densidades de corriente nominales entre 20 y $300 mA cm^{-2}$. Durante todo el experimento se registra tanto la morfología como los parámetros eléctricos.

Para estas corrientes tan bajas encontramos dos tipos de regímenes: a tiempos cortos existe un régimen de crecimiento *rugoso*, con un exponente de rugosidad $\alpha = 0.78 \pm 0.05$, compatible con los resultados de Iwamoto *y cols.*¹ e independiente del valor de la corriente; a tiempos mas largos se desarrolla una inestabilidad morfológica con una longitud de onda característica de $50 \mu m$. Este cambio en la morfología se corresponde con un aumento en la velocidad de crecimiento y en un incremento en el voltaje necesario para mantener la corriente constante en la celda. La longitud y tiempos característicos de esta inestabilidad coinciden con los obtenidos en el trabajo de Kahanda *y cols.*² y están en buen acuerdo con los predichos por una inestabilidad de tipo Mullins-Sekerka.

Así pues, con estos resultados³ se consigue relacionar los resultados previos de Kahanda *y cols.*² e Iwamoto *y cols.*¹, aparentemente contradictorios, y dar una idea de la dinámica de los fenómenos de crecimiento compacto en electroquímica.

¹A. Iwamoto, T. Yoshinobu y H. Iwasaki, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 4025 (1994).

²G. L. K. M. S. Kahanda, X.-Q. Zhou, R. Farrell y P.-Z. Wong, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3741 (1992).

³J.M. Pastor y M.A. Rubio, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1848 (1996).

Panel P56 :

ONDAS HIDROTERMALES EN CALENTAMIENTO LATERAL CON BAJO NUMERO DE PRANDTL

Miguel Angel Pelacho y Javier Burguete

*Departamento de Física y Matemática Aplicada,
Universidad de Navarra, 31080 Pamplona.*

El análisis teórico de estabilidad de una capa de fluido con superficie libre sometida a un gradiente horizontal de temperatura predice la aparición de un tipo de ondas —viajeras y estacionarias— cuyas características principales son: 1) se propagan desde la pared fría hacia la caliente, 2) dependen del espesor del fluido y 3) viajan formando un ángulo con la dirección del gradiente. Estas ondas, debidas a la tensión superficial, son conocidas como **ondas hidrotermales** (1). La primera verificación experimental de esas ondas fue obtenida por F. Daviaud et al (2). Asimismo, en nuestro laboratorio se obtuvieron otro régimen de ondas para la misma geometría, pero con números de Prandtl elevados (3). Cambiando la geometría y el fluido hemos podido caracterizar los umbrales y esos dos regímenes de **ondas hidrotermales**. Además se ha determinado la dependencia de la longitud de onda, la frecuencia y el ángulo de inclinación con los parámetros de control, que está en buen acuerdo con las predicciones teóricas.

Bibliografía:

- (1) Smith M. and Davis S. H. 1983 J. Fluid Mech., **132**, 119.
- (2) Daviaud, F. and Vince, J. M. 1993 Phys. Rev. E **48**, 4432.
- (3) Ezersky, A. B., Garcimartín, A., Mancini, H. L. and Pérez-García, C. 1993 Phys. Rev. E **48**, 4414.

Panel P57 :

**EL MODELO DE HUBBARD ANALIZADO MEDIANTE EL
GRUPO DE
RENORMALIZACION EN EL ESPACIO REAL**

J. Pérez-Conde

*Departamento de Física, Universidad Pública de Navarra
31006 Pamplona*

Panel P58 :

Mecánica Estadística de No Equilibrio de Sistemas Complejos

A. Pérez-Madrid, J. M. Rubí y P. Mazur

*Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de
Barcelona, Diagonal 647,*

08028 Barcelona

E-mail: agusti@ulyses.ffn.ub.es

Hemos propuesto un formalismo capaz de describir sistemas fuera del equilibrio cuyas variables relevantes presentan una separación de escalas temporales. A partir de una ecuación de continuidad para la función de distribución se formulan las ecuaciones hidrodinámicas. Previa especificación de las corrientes, se llega a un conjunto acoplado de ecuaciones hidrodinámicas para los campos conservados y cinéticas (del tipo Fokker-Planck y Smoluchowski) para las variables que relajan en una escala más lenta. La teoría permite reproducir los límites inercial y difusivo así como incorporar fluctuaciones y calcular los coeficientes de transporte. Se vislumbran una serie de aplicaciones interesantes: movimiento browniano en sistemas inhomogéneos y multicomponentes, dinámica de fluidos complejos y sistemas en los que se da algún proceso de paso de barrera (adsorción, uniones semiconductoras, etc.).

- (1) A. Pérez-Madrid, J. M. Rubí and P. Mazur, *Physica A* **212**, (1994) 231.
- (2) A. Pérez-Madrid, J. M. Rubí and P. Mazur, en preparación.

Conferencia **Viernes 24, 10h - 10h30** :

Ondas en Medios Activos No Lineales

V. Pérez-Muñuzuri

Grupo de Física No Lineal. Facultad de Físicas. Universidad de Santiago de Compostela. 15706 Santiago de Compostela. E-Mail: vicente@fmmeteo.usc.es

Las autoondas en medios activos no lineales, a diferencia de las ondas en medios conservativos, se mueven a expensas de la energía almacenada en el medio y tienen como propiedad fundamental la de no interferencia o aniquilación de frentes de onda que se cruzan.

Este tipo de ondas es muy frecuente en medios activos de tipo biofísico como puede ser el músculo cardíaco o las fibras nerviosas. En particular, el estudio de las llamadas ondas espirales o reentradas relacionadas con las taquicardias es importante en la literatura científica actual.

Un medio activo donde las ondas espirales y sus propiedades son fácilmente reproducibles es la reacción química de Belousov-Zhabotinsky. Así, en medios donde el catalizador de la reacción está inmovilizado en geles de sílice o de Rutenio (sensibles a la luz) se han estudiado las espirales y los distintos medios de controlar sus propiedades, ya sea mediante la acción de campos eléctricos, como mediante la interacción de campos externos como la luz. Por otra parte, nuevas estructuras (V-shaped patterns) han aparecido confirmando las predicciones teóricas basadas en la teoría cinemática.

Por otra parte, el músculo cardíaco es un medio muy complejo formado por multitud de células, cada una con su propia dinámica, unidas entre sí mediante canales intracelulares y recubiertas por un medio extracelular en el que también pueden aparecer otros objetos que no interactúan con la propagación de las ondas, como las venas, por ejemplo. En este caso, se habla de medios discretos.

Estos medios activos discretos se han simulado experimentalmente mediante circuitos no lineales excitables acoplados de forma directa a través de resistencias, simulando un medio difusivo intracelular, y de forma indirecta mediante un baño continuo, conductivo que representa el medio extracelular. La influencia de ambos tipos de conexiones en las cercanías de los gaps entre células se ha estudiado.

Cuando la naturaleza de la dinámica de cada célula cambia de un modo excitable a un sistema caótico aparece el fenómeno conocido como sincronización caótica. Dependiendo del tipo de acoplamiento entre células, se ha observado la formación de una onda de sincronización cuya velocidad depende linealmente del máximo exponente de Lyapunov transversal. Este tipo de comportamiento parece modelizar la dinámica subyacente en la propagación de señales en sistemas neuronales.

Panel P59 :

**PROPIEDADES ESTADISTICAS DE LASERES DE POZO
CUANTICO
CON EFECTOS DE TRANSPORTE DE PORTADORES**

N. Mustafa y L. Pesquera

*Instituto de Física de Cantabria (CSIC-UC), Avda. Los Castros s/n
E-39005 Santander.*

I. Esquivias

*Dept. de Tecnología Fotónica, E. T. S. I. Telecomunicación (UPM)
E-28040 Madrid.*

Hemos realizado un estudio teórico de los efectos debidos al transporte de portadores en la estadística del tiempo de encendido de láseres de pozo cuántico (QW) modulados para diferentes corrientes de bias, I_b , y diferentes frecuencias de modulación en el rango de los GHz. Se han considerado láseres MQW $\text{In}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}/\text{GaAs}$ de alta velocidad con un ancho de banda de modulación intrínseco de 30GHz. La modelización se realiza mediante ecuaciones de balance que incluyen el ruido de emisión espontánea, y la dinámica de los portadores no confinados en el pozo. Se han introducido dos constantes temporales efectivas: el tiempo de transporte/captura, τ_{cap} , y el tiempo de escape del pozo, τ_{esc} . Los diferentes valores considerados de estos dos parametros permiten estudiar los efectos del transporte de portadores.

La corriente de entrada es una onda cuadrada periódica con dos valores: $I_{on} = 3.5I_{th}$ (donde I_{th} representa la corriente umbral) e I_b . Considerando valores de I_b cercanos al umbral se obtienen tiempos de encendido suficientemente pequeños y pulsos con una buena relación on-off. Los resultados obtenidos demuestran que para modulación lenta el encendido del laser se retrasa y las fluctuaciones del tiempo de encendido aumentan cuando τ_{cap} aumenta y τ_{esc} disminuye. Sin embargo, estos efectos se reducen a altas velocidades de modulación. La dependencia en la frecuencia de modulación se debe a las condiciones iniciales al comienzo de un pulso que son muy diferentes de las del estado estacionario correspondiente a I_b .

Panel P60 :

RELAJACION MAGNETICA DIFUSIONAL EN IMANES PERMANENTES

C. Piquer, L.M. García, J. Bartolomé.

*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, CSIC - Universidad de
Zaragoza, 50009 Zaragoza.*

En el intento de optimizar las propiedades de los imanes permanentes basados en la fórmula $R_2Fe_{14}B$, una de las rutas seguidas ha sido la inserción de átomos intersticiales como H, C o N.

Las medidas de susceptibilidad magnética alterna constituyen una herramienta fundamental en la detección de las transiciones de fase magnéticas que tienen lugar en estos compuestos. Sin embargo, los estudios realizados con esta técnica sobre los compuestos citados han dado lugar a una extensa fenomenología de anomalías magnéticas cuya interpretación ha sido motivo de una gran controversia.

En este trabajo, hemos realizado un estudio sistemático de este problema en compuestos puros e hidrurados, midiendo susceptibilidad magnética alterna y desacomodo magnético en multitud de condiciones experimentales. Con ello, hemos podido deducir que las anomalías tienen su origen en fenómenos de acomodo magnético entre defectos puntuales y paredes de dominio magnéticas. Este comportamiento ha sido modelizado con un potencial de interacción entre paredes y defectos móviles que permite ajustar los resultados experimentales. A su vez, este potencial da lugar a un proceso de relajación tipo Debye a alta temperatura que hemos estudiado en función de temperatura y frecuencia y que ha sido ajustado con el modelo citado.

Comunicación Oral **Jueves 23, 19h - 19h15** :

Simulación de fracturas oscilantes inducidas por un gradiente térmico.

Oscar Pla

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, C.S.I.C.
Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid.*

Experimentos recientes en fractura (Yuse y Sano, *Nature*, **362**, 329 (1993)), muestran que se puede conseguir que un material se parta de forma que la superficie entre los trozos sea ondulante. Cualitativamente, se pueden simular estos experimentos mediante una discretización de las ecuaciones elásticas en forma de muelles totalmente armónicos en una red triangular, obteniendo las mismas morfologías de fractura que en los experimentos. Además se puede obtener el mapa de tensiones en el material, herramienta que puede ser de gran utilidad para la comprensión física del fenómeno.

Panel P61 :

CRECIMIENTO DE DOMINIOS EN ALEACIONES BINARIAS NO-ESTEQUIOMETRICAS: ADSORCION Y MOVIMIENTO DE INTERFASES SATURADAS

M. Porta y T. Castán

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Facultat de Física,
Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona.*

Mediante la simulación numérica por el método de Monte Carlo de un modelo de Ising antiferromagnético (2d con interacción a primeros vecinos) se estudia el proceso de crecimiento de dominios en una aleación binaria A_xB_{1-x} que experimenta una transición de fase orden-desorden. El sistema evoluciona de acuerdo a una dinámica de Kawasaki que conserva la composición, x , pero no el parámetro de orden. Fijando diferentes valores de la composición de la aleación en el intervalo $0.50 \leq x \leq 0.60$ estudiamos el efecto de la no-estequiometría ($x \neq 0.50$) sobre la dinámica de crecimiento de dominios. En particular sobre la ley de crecimiento, que para un sistema con un parámetro de orden no conservado se espera sea la ley de Allen-Cahn¹.

Se observa un primer régimen en el cual las partículas en exceso tienden a localizarse en las interfaces hasta alcanzarse una densidad máxima que depende de la temperatura. Una vez en esta situación, los resultados de simulación obtenidos para $0.50 \leq x \leq 0.60$ ponen de manifiesto la existencia de una única longitud característica que evoluciona según una ley algebraica $l(t) = kt^n$. Además, se observa que el área de los dominios varía linealmente con el tiempo. Esto nos permite deducir que el exponente de crecimiento sigue siendo el de Allen-Cahn ($n=1/2$) mientras que el efecto de la composición está contenido en el prefactor k , que disminuye al aumentar x .

Respecto a los experimentos, nuestros resultados sugieren que las leyes logarítmicas observadas en algunos materiales² no deben asociarse a otros mecanismos diferentes de la curvatura sino más bien a la existencia de interacciones específicas entre las interfaces saturadas y las partículas en exceso. Dicha interacción no está contemplada en nuestro modelo con interacciones a primeros vecinos exclusivamente.

¹ S. M. Allen and J. W. Cahn, Acta. Metall. **27** (1979) 1085.

² R. F. Shannon, C. R. Harkless and S. E. Nagler, Phys. Rev. B **38** (1988) 9327.

Comunicación Oral **Jueves 23, 10h30 -10h45 :**

COMPORTAMIENTO VÍTREO EN UN MODELO DE RED CON BARRERAS ENTRÓPICAS

A. Prados, B. Sánchez-Rey y J. J. Brey

Física Teórica, Facultad de Física, Universidad de Sevilla

Apartado de Correos 1065, 41080 Sevilla

El modelo considerado es una red unidimensional con una frontera reflectante en el nudo $n = 0$. El estado con $n = 0$ es el estado fundamental, mientras que los estados con $n \neq 0$ tienen todos energía ϵ . El número medio de partículas es $\langle n \rangle = 1$, para cualquier valor de la temperatura. La dinámica está regida por una ecuación maestra cuyas probabilidades de transición verifican balance detallado, pero no es necesario saltar ninguna barrera energética para llegar al estado fundamental. Sin embargo, existe una barrera puramente “entrópica”, ya que sólo se puede acceder al estado fundamental desde el nudo $n = 1$. En el límite de temperaturas bajas, la función de autocorrelación de la energía $\phi(t)$ relaja según la ley $\phi(t) = \exp[-(t/\tau)^\beta]$, con $\beta = 1/2$ y $\tau = \tau_0 \exp(\epsilon/k_B T)$. El valor de β encontrado es típico de muchos vidrios reales, así como el comportamiento Arrhenius del tiempo de relajación. También se analiza el comportamiento de la energía en ciclos de enfriamiento y posterior calentamiento, encontrándose fenómenos de histéresis similares a los observados experimentalmente.

Panel P62 :

Convección de Bénard-Marangoni con pequeña relación de aspecto

María Luisa Ramón Sáenz , Diego Maza², Hector Mancini y Carlos Pérez-García

*Departamento de Física y Matemática Aplicada,
Facultad de Ciencias,
Universidad de Navarra, 31080 Pamplona*

Recientemente, el estudio de sistemas convectivos tipo Bénard-Marangoni con pequeña relación de aspecto, ha puesto de manifiesto la aparición de estados dependientes del tiempo que, al aumentar el parámetro de control (la diferencia de temperatura entre el fondo y la superficie libre), presentan una dinámica caótica [1]. Se ha demostrado que dichos estados son consecuencia de la desestabilización de la capa límite térmica adyacente al calefactor para valores del parámetro de control suficientemente alejados del umbral [2]. Se ha sugerido sin embargo, que la aparición de una dinámica dependiente del tiempo puede observarse también en las proximidades del umbral del régimen convectivo [3]. Dadas las condiciones de simetría adecuadas, existe una órbita heteroclínica estable que vincula modos puros, la cual podría manifestarse como la oscilación entre los diferentes modos involucrados.

Nuestro experimento, realizado con condiciones de contorno compatibles con las estudiadas en [3], muestra la presencia de los modos puros asociados a la conexión heteroclínica (aunque discrepa en los valores de la relación de aspecto que predice el diagrama de estabilidad) y la posible aparición de un régimen dependiente del tiempo en las proximidades del umbral de la convección.

[1] T. Ondarçú, G. Mindlin, H. Mancini y C. Pérez-García, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 3892.

[2] H.L. Mancini y D. Maza, preprint

[3] B. Echebarria, D. Krmpotić and C. Pérez-García, preprint.

²También: Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera, 5700 San Luis, Argentina.

Panel P63 :

**CORRELACIONES EN UN CRISTAL CLÁSICO. UNA
APROXIMACIÓN TEÓRICA**

Carlos Rascón, Luis Mederos y Guillermo Navascués

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad
Autónoma, Cantoblanco, Madrid 28049*

*Instituto de Ciencia de Materiales (Consejo Superior de Investigaciones
Científicas), Cantoblanco, Madrid 28049*

Presentamos la primera aproximación teórica al promedio angular de la función de correlación a dos cuerpos para sólidos simples, $\tilde{g}(r)$. La descripción se basa en 3 reglas de suma para dicha función: las ecuaciones del virial y de la compresibilidad y su normalización. Al aplicar la teoría al sólido FCC de esferas duras se obtiene un acuerdo excelente con los datos de simulación en todo el rango de densidades. El conocimiento de \tilde{g} abre nuevas rutas en la teoría de perturbaciones de sólidos simples.

Panel P64 :

**Determinación de la distribución de volumen de ferritina artificial
mediante medidas de susceptibilidad magnética**

F.Luis, E. Remiro y J. Bartolomé

*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón, Univ. de Zaragoza- C.S.I.C.
50009 Zaragoza*

J. Tejada y X.X. Zhang

*Facultat de Física, Universitat de Barcelona
08028 Barcelona*

Se ha medido la susceptibilidad ac de dos muestras de ferritina de diferente concentración. En ambas se observa comportamiento superparamagnético. La parte real χ' y la imaginaria χ'' de las curvas experimentales tienen un máximo a temperaturas $T_m(\chi')$ y $T_m(\chi'')$ respectivamente, que dependen de la frecuencia, según la ley de Arrhenius, y de la concentración, observándose un desplazamiento del máximo hacia temperaturas más altas según la concentración aumenta. Se han medido asimismo las isothermas de imanación frente a campo, que son reversibles por encima de $T_m(\chi')$, mientras que por debajo de dicha temperatura se observa histéresis. El cambio de comportamiento magnético observado a $T_m(\chi')$ se debe a la existencia de fenómenos de relajación magnética cuyos tiempos característicos se hacen más largos que el experimental ($1/\omega$ en medidas ac y t en medidas dc) por debajo de $T_m(\chi')$. Este comportamiento se ha interpretado mediante un modelo estadístico para partículas magnéticas sin interacción que presentan una distribución de volúmenes $f(V)$. En dicho modelo se asigna a cada partícula un tiempo de relajación que depende del volumen y de la anisotropía magnética. Del modelo se deriva que χ'' es proporcional a $f(V)$, lo que permite determinar directamente dicha distribución. Usando la función f obtenida ajustando los datos experimentales de $\chi''(T)$, hemos reproducido las curvas de $\chi'(T)$ y $M(H)$. El modelo predice asimismo que $T_m(\chi')$ depende de ω según la ley de Arrhenius, con una barrera de energía efectiva que depende de los parámetros de la distribución f . Se observa que la barrera efectiva aumenta cuando la concentración aumenta. Por tanto, la interacción entre las partículas tiene el efecto de aumentar la barrera de energía, de acuerdo con recientes predicciones teóricas.

Panel P65 :

**TEORIA PARA LA ESTADISTICA DE LOS TIEMPOS DE
ENCENDIDO DE LASERES DE SEMICONDUCTOR BAJO
MODULACION PSEUDOALEATORIA**

J. Revuelta^{1,2}, A. Valle², L. Pesquera² y M. A. Rodríguez²

¹ *Departamento de Física Moderna, Universidad de Cantabria
Avda los Castros s/n, 39005 Santander*

² *Instituto de Física de Cantabria, CSIC-UC, Facultad de Ciencias
Avda los Castros s/n, 39005 Santander*

La estadística de los tiempos de encendido de un láser de semiconductor monomodo modulado periódicamente en el rango de GHz es muy distinta de la obtenida bajo modulación pseudoaleatoria como se ha demostrado mediante simulaciones numéricas¹. En el régimen periódico la varianza del tiempo de encendido (jitter) es casi independiente de la corriente de bias. En el régimen pseudoaleatorio el jitter aumenta cuando la corriente de bias es mayor que la corriente umbral. Este aumento del jitter está relacionado con la aparición de una distribución de probabilidad bimodal de los tiempos de encendido debida a efectos de pattern. Una corriente de bias ligeramente inferior al valor umbral suprime los efectos de pattern haciendo que la respuesta del láser sea prácticamente independiente de los bits anteriores¹⁻³.

En este trabajo presentamos un nuevo método para el cálculo de la distribución de probabilidad del tiempo de encendido de un láser de semiconductor monomodo cuya corriente de inyección es modulada pseudoaleatoriamente. El mismo método ha sido aplicado con éxito en el caso del estudio de la estadística de los tiempos de encendido de un láser de gas bajo modulación pseudoaleatoria⁴. Obtenemos que la distribución de probabilidad de tiempos de encendido satisface una ecuación integral. El núcleo de esta ecuación cuando la corriente de bias es inferior a la umbral se obtiene siguiendo el método ya aplicado para modulación periódica⁵. Desarrollamos un nuevo método para el cálculo del núcleo cuando la corriente de bias es superior a la umbral basado en la linealización de las ecuaciones alrededor de la solución determinista. Mediante la simulación numérica de las ecuaciones de balance estocásticas hemos comprobado tanto la exactitud del método como el ahorro de tiempo de cálculo que ofrece, especialmente en el cálculo de la estadística de sucesos de baja probabilidad.

[1] C. R. Mirasso, P. Colet y M. San Miguel, IEEE JQE **29**, 23 (1993).

[2] P. Colet, C. R. Mirasso y M. San Miguel, IEEE JQE **29**, 1624 (1993).

[3] C. R. Mirasso, A. Valle, L. Pesquera y P. Colet, IEE Proc. J **141**, 109 (1994).

[4] J. Revuelta, L. Pesquera y M. A. Rodríguez, enviado a PRA.

[5] A. Valle, M. A. Rodríguez y C. R. Mirasso, Opt. Lett **17**, 1523 (1992).

Panel P66 :

**CINETICA DE WILSON-FRENKEL DEL CRECIMIENTO DE
CRISTALES COLOIDALES**

M. S. Ripoll, C. F. Tejero
Facultad de Ciencias Físicas
Universidad Complutense
28040-Madrid.

M. Baus
Physique Statistique, Plasmas et Optique Non-linéaire
Université Libre de Bruxelles
10050-Bruxelles.

Resultados experimentales recientes han demostrado que el crecimiento de cristales en dispersiones coloidales estabilizadas eléctricamente sigue la ley de Wilson-Frenkel. Cuando la velocidad de crecimiento del cristal se representa en función de una densidad reescalada, se encuentra una curva universal. En este trabajo presentamos un estudio teórico, basado en un método variacional para la determinación de la energía libre de las fases fluido y sólido, que confirma este comportamiento universal.

Panel P67 :

CONDENSACIÓN CAPILAR EN POROS INHOMOGÉNEOS

Petra Röcken

*Stranski-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, TU Berlin.
Straße des 17. Juni 112, D-10623 Berlin, Alemania.*

Pedro Tarazona

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, C – V.
Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid.*

Investigamos condensación capilar en poros tipo 'slit' con paredes estructuradas mediante distintos modelos teóricos. Primero, con un modelo de red basado en la aproximación de Campo Medio, encontramos un comportamiento cualitativamente diferente al del capilar homogéneo: la transición del 'gas' al 'líquido' se realiza a través de 'puentes de líquido' que aparecen en aquellas zonas donde el potencial de pared $V(x)$ favorece la adsorción, y que están separados entre si por 'gas'. Para $V(x)$ periódico, observamos una limpia bifurcación de la transición en dos ramas por encima de un "punto triple capilar", para $V(x)$ más complejo se halla un escalonamiento múltiple que caracteriza la isoterma crítica. Un análisis macroscópico da una ecuación de Kelvin modificada capaz de predecir la condensación capilar en función de las condiciones termodinámicas y de la estructura del poro.

Para describir correctamente las correlaciones a corto y medio alcance y en general conseguir resultados cuantitativos, empleamos un funcional de densidad no-local. Los perfiles de densidad obtenidos muestran las típicas oscilaciones cerca de las paredes.

Panel P68 :

GEOMETRIA FRACTAL EN UN ESCENARIO INFINITO-DIMENSIONAL

José Rojo

*Universidad Politécnica de Madrid. Departamento de Matemática aplicada
a la ingeniería a civil. Métodos matemáticos. E.T.S.I.de Caminos.
28040 Madrid.*

La teoría de la dimensión topológica ha atraído el interés de muchos topólogos a lo largo de este siglo. En los últimos años, este interés ha crecido también en otras áreas, en las que resulta natural buscar la dimensión de ciertos objetos. Así sucede frecuentemente en el caso de atractores, cuencas de atracción, separatrices, . . . (subespacios que aparecen en el estudio de un sistema dinámico particular que, a veces, tienen estructura fractal). La relación entre la “dimensión por recubrimientos” ($\dim F$) y la “dimensión de Hausdorff” ($H\text{-dim } F$) de F es la clave para describir un espacio finito-dimensional F como “fractal”. En esta contribución, en primer lugar se construye y estudia “ $S\text{-dim}$ ”, una función dimensión topológica que puede tomar valores ordinales transfinitos. Sus relaciones con la dimensión de Hausdorff hacen posible algunas construcciones fractales en un escenario infinito-dimensional. Se discute, entonces, el grupo de isometrías de una de estas construcciones. Finalmente, se enuncia una cuestión abierta en este área.

Panel P69 :

FLUCTUATIONS IN MESOSCOPIC QUANTUM SYSTEMS

R. Rossignoli*, N. Canosa* y J.L. Egido

*Depto. de Física Teórica, Universidad Autónoma de Madrid
E-28049 Madrid, España*

Small quantum systems such as nuclei, atomic clusters, finite size polycrystalline materials and other mesoscopic structures in condensed matter, exhibit in common important fluctuation phenomena. In particular, phase transitions become considerably washed out, and large deviations from the behavior predicted by the standard mean field approximations are observed. In this contribution, we discuss a fully microscopic treatment of fluctuation phenomena in small fermionic quantum systems, based on the path integral representation of the partition function obtained with the Hubbard-Stratonovich transformation. We then describe its application to nuclear systems [1–3], where the aim is the microscopic description of pairing, shape and orientation fluctuations taking place in hot nuclei, and its influence on level densities and strength functions. We shall also discuss particle number and angular momentum projected statistics in this context [1–2], and the possible derivation of an effective mean field description [3]. Results obtained in transitional heavy nuclei will be shown.

* Permanent address: Depto. de Física, Universidad Nacional de La Plata, Argentina

[1] R. Rossignoli and P. Ring, *Ann. of Phys. (N.Y.)* **235** (1994) 350.

[2] R. Rossignoli, N. Canosa, J.L. Egido, *subm. to Nucl. Phys.* **A**.

[3] R. Rossignoli, N. Canosa and P. Ring, *Phys. Rev. Lett.* **72** (1994) 4070; *Nucl. Phys.* **A591** (1995) 15.

Panel P70 :

Adsorción de partículas bajo la acción de agentes externos

J. M. Rubí

*Departament de Física Fonamental, Facultat de Física, Universitat de
Barcelona, Diagonal 647,
08028 Barcelona
E-mail: miguel@ulyses.ffn.ub.es*

I. Pagonabarraga

*FOM Institut for Atomic and Molecular Physics,
Kruislaan, 407,
1098 SJ Amsterdam*

Hemos propuesto una clase de modelos secuenciales para el estado de la adsorción de partículas en superficies, en las que éstas antes de adherirse siguen trayectorias inclinadas ('shadow' models). Como realizaciones físicas podemos mencionar la adsorción en presencia de un 'shear', en un sustrato no plano, como por ejemplo en partículas de mayor tamaño, o en la electroforésis capilar. Hemos descubierto la existencia de nuevos mecanismos de adsorción y la presencia de cierto orden en la capa adsorbida.

- (1) I. Pagonabarraga and J. M. Rubí, Phys. Rev. Lett. **73**, 114 (1994).
- (2) I. Pagonabarraga, J. Bafaluy and J. M. Rubí, Phys. Rev. Lett. **75**, 461 (1995).

Panel P71 :

**SIMULACION DE MONTE CARLO DE LA ECUACION DE
BOLTZMANN
PARA UN SISTEMA DE ESFERAS DURAS INELASTICAS**

M. J. Ruiz Montero, D. Cubero y J.J. Brey

Física Teórica. Facultad de Física. Universidad de Sevilla

Se ha utilizado el metodo directo de Monte Carlo para simular la ecuacion de Boltzmann en el caso de un sistema de esferas duras inelásticas caracterizado por un coeficiente de restitucion ϵ . Hemos estudiado el estado homogéneo de dicho sistema, analizando la función de distribución de velocidades y prestando una particular atención al comportamiento de las colas de la distribución. Se ha obtenido la ley de variación de la temperatura en este estado, comparando los resultados de la simulación con distintas aproximaciones teóricas.

Se ha estudiado también la respuesta del sistema a una perturbación de la densidad, analizando la dependencia de esta respuesta del valor de ϵ y de la longitud de onda de la perturbación. Se ha investigado la posible existencia de una inestabilidad, posiblemente asociada a la formación de estructuras o 'clusters' de muy alta densidad pero caracterizados por una temperatura muy baja.

Comunicación Oral **Viernes 24, 12h30 - 12h45** :

INESTABILIDAD TIPO FINGER EN ELECTRODEPOSICIÓN

M.-Q. López-Salvans, J. Claret y F. Sagués

*Departament de Química-Física, Universitat de Barcelona,
Martí i Franquès, 1
08028 Barcelona.*

La electrodeposición quasibidimensional, como fenómeno no lineal de crecimiento, es un fenómeno altamente complejo dado que intervienen en el mismo tanto los aspectos de transporte como los asociados al propio proceso electroquímico en la interfase de deposición. Fruto de esa misma complejidad es la riqueza morfológica a que da lugar, exhibida a través de una variedad de estructuras, desde las más desordenadas típicamente fractales, hasta las características formas dendríticas [1]. A pesar de este hecho, inestabilidades habitualmente observadas en fenómenos con una componente claramente hidrodinámica, como son las digitaciones viscosas[2], no habían sido nunca observadas en este contexto.

En esta comunicación, se presenta una investigación reciente que ha permitido identificar depósitos de electrodeposición con una textura y apariencia macroscópica distintas a las habituales en electrodeposición y claramente parecidas a las inestabilidades hidrodinámicas tipo "finger". Dicha morfología se ha obtenido trabajando con disoluciones de sulfato de cobre en presencia de pequeñas cantidades de sales alcalinas inertes. El efecto de dichos cationes consiste en modificar las condiciones de deposición alterando las características del depósito, y conferir al mismo tiempo, una cierta tensión superficial efectiva a la capa envolvente del depósito [3].

Con estas premisas se ha formulado un modelo basado en la teoría existente relativa a digitación de fluidos, que permite interpretar el fenómeno observado y confirmar relaciones matemáticas basadas en una relación de dispersión tipo Mullins-Sekerka [4].

Se analiza asimismo el papel relevante de cara a la observación de dicha morfología, y que cabe atribuir a efectos de convección natural inducida por gradientes de densidad.

Referencias

[1] P. P. Trigueros, J. Claret, F. Mas, F. Sagués, J. Electroanal. Chem. **312**, 219 (1991); P. P. Trigueros, J. Claret, F. Mas, F. Sagués, J. Electroanal. Chem. **328**, 165 (1992).

[2] D. Bensimon, L. P. Kadanoff, S. Liang, B. J. Shraiman, C. Tang, Rev. Mod. Phys. **58**, 977 (1986).

[3] "Fingering Instability in Thin-Layer Electrodeposition: General Trends and Morphological Transitions", submitted to J. Electroanal. Chem.

[4] "Fingerlike Aggregates in Thin-Layer Electrodeposition", to appear in Phys. Rev. Lett.

Panel P72 :

**NOISE SUSTAINED STRUCTURES IN COUPLED COMPLEX
GINZBURG-LANDAU EQUATIONS FOR A CONVECTIVELY
UNSTABLE SYSTEM**

M. Neufeld¹, D. Walgraef^{1,2}, and M. San Miguel^{1,3}

¹*Departament de Física, Universitat de les Illes Balears,
E-07071 Palma de Mallorca (Spain)*

²*Center for Nonlinear Phenomena and Complex Systems, Université Libre
de Bruxelles,*

CP 231, B-1050 Brussels (Belgium)

³*Instituto Mediterraneo de Estudios Avanzados, IMEDEA (CSIC-UIB),
E-07071 Palma de Mallorca (Spain)*

We investigate a pattern forming system close to a Hopf bifurcation with broken translational symmetry. In one-dimensional geometries, its evolution is governed by two coupled complex Ginzburg-Landau equations which describe the amplitude of the counter-propagating traveling waves that develop beyond the instability. The convective and absolute instabilities of the possible steady states are analyzed. In the regime of strong cross-coupling, where traveling waves are favoured by the dynamics, the results of previous analysis are recovered. In the weak cross-coupling regime, where standing waves are favoured by the dynamics, traveling waves nevertheless appear, in the absence of noise, between the uniform steady state and the standing wave patterns. In this regime, standing waves are sustained by spatially distributed external noise for all values of the bifurcation parameter beyond the Hopf bifurcation. Hence, the noise is not only able to sustain spatio-temporal patterns, but also to modify pattern selection processes in regimes of convective instability. In this weak coupling regime we also give a quantitative statistical characterization of the transition between deterministic and noise sustained standing waves when varying the bifurcation parameter. We show that this transition occurs at a noise-shifted point and it is identified by an apparent divergence of a correlation time and the saturation of a correlation length to a value given by the system size.

Panel P73 :

MODELO CINÉTICO PARA UN FLUIDO DENSO DE ESFERAS DURAS

A. Santos

*Departamento de Física, Universidad de Extremadura,
E-06071 Badajoz.*

J. J. Brey

*Área de Física Teórica, Universidad de Sevilla,
E-41080 Sevilla.*

J. W. Dufty

*Department of Physics, University of Florida,
Gainesville, FL 32611, U.S.A.*

La teoría de Enskog revisada (RET) para un sistema clásico de esferas duras proporciona una descripción unificada tanto de estados fluidos como cristalinos en un amplio rango de densidades y escalas de longitud. Sin embargo, las aplicaciones prácticas de esta teoría se han limitado normalmente a estados fluidos próximos al equilibrio. Se propone aquí un modelo cinético más sencillo que, aun reteniendo las propiedades físicas y matemáticas esenciales de la RET, permite un mayor abanico de aplicaciones. El modelo mantiene de modo exacto las soluciones de equilibrio y las ecuaciones locales de conservación. Los coeficientes de transporte obtenidos con el modelo presentan un comportamiento cualitativo similar al obtenido en el caso de la RET. Como aplicación a estados alejados del equilibrio, se discuten las propiedades reológicas de la fase fluida a altas densidades.

Panel P74 :

SIMULACIÓN DE LA ECUACIÓN DE ENSKOG MEDIANTE UN MÉTODO DE MONTE CARLO

J. M. Montanero y A. Santos

*Departamento de Física, Universidad de Extremadura,
E-06071 Badajoz.*

Se propone un método de simulación de Monte Carlo para resolver numéricamente la ecuación de Enskog para un sistema de esferas duras. El método es una extensión al régimen de sistemas densos del que se utiliza normalmente para gases rarificados (basado en la ecuación de Boltzmann). Las modificaciones principales son: (a) las dos partículas de una pareja de colisión se toman de celdas separadas una distancia igual al diámetro de las esferas; (b) el número de colisiones por unidad de tiempo se aumenta en un factor que tiene en cuenta las correlaciones espaciales. Se comprueba que las contribuciones cinética y colisional de los coeficientes de transporte están en excelente acuerdo con los valores teóricos de Enskog sobre un amplio rango de densidades. Al contrario de otro método alternativo recientemente propuesto, nuestro método verifica ciertas pruebas de consistencia.

Panel P75 :

**Dinámica de una transición orden-desorden con defectos
topológicos**

Andrés M. Somoza

Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC, Madrid 28049.

Celeste Sagui

*Department of Physics, McGill University, Montréal, Québec, Canada H3A
2T8.*

Christopher Roland

*Department of Physics, North Carolina State University, Raleigh, NC
27695, EE. UU.*

Hemos estudiado los procesos de ordenamiento y separación de fases de un sistema que es llevado, mediante un “quench” en temperatura desde una fase desordenada a una zona de coexistencia entre la fase desordenada y una fase ordenada (caracterizada por un parámetro de orden vectorial). Hemos descrito el sistema por un modelo C (parámetro de orden no conservado acoplado a una variable conservada) y realizado una integración numérica de las ecuaciones de Langevin para diferentes valores de la concentración media, c_0 . Cuando la fase desordenada es mayoritaria ($c_0 > 1/2$) el crecimiento es controlado por difusión. Por el contrario, cuando la fase desordenada es minoritaria, aparecen defectos topológicos (vórtices) que se acoplan fuertemente a la posición de los dominios de la fase desordenada dando lugar a un nuevo mecanismo: coalescencia de dominios debido a la atracción entre defectos. Este mecanismo, que domina el crecimiento durante un largo periodo de tiempo, da lugar a una ley de crecimiento $R(t) \propto t^{1/4}$.

Panel P76 :

Ultra-low Interfacial Tension in Microemulsions

H. Leitão, Andrés M. Somoza, M. M. Telo da Gama

*Centro de Física da Matéria Condensada, Universidade de Lisboa, Av.
Prof. Gama Pinto, 2, P-1699 Lisboa Codex, Portugal.*

T. Sottmann and R. Strey

*Max-Planck-Institut für Biophysikalische Chemie, Postfach 2841, D-37018
Göttingen, Germany.*

Recent experiments revealed a striking scaling behaviour of the low and ultra-low interfacial tension of microemulsions. A description of this behaviour based on the Helfrich elastic free energy, which is symmetric in the principal curvatures c_1 and c_2 , appears to be inconsistent. We show that, within the phenomenological theory of membrane bending elasticity, symmetry breaking between the two principal curvatures seems to be required in order to explain the low, but non-zero, values of the interfacial tension and its temperature dependence. We propose two simple generalizations of the Helfrich free energy which describe the experimental results. The first considers a quadratic elastic free energy and anisotropy in the membrane which breaks the symmetry between the two principal curvatures. In the second, which is applicable to systems with positive saddle-splay rigidities, the symmetry between the two principal curvatures is spontaneously broken by inclusion of higher order terms in the curvatures in order to stabilize the free energy of the system. This analysis provides a straightforward method to obtain estimates of the bending elastic constants from interfacial tension measurements. Experiments confirming the theoretical picture are presented and values for κ and $\bar{\kappa}$, for a variety of systems, are obtained.

Conferencia **Viernes 24, 17h30 - 18h :**

**PROPIEDADES TERMODINAMICAS Y ELECTRONICAS DE
UN MODELO TIGHT-BINDING DE GAS DE RED**

P. Tarazona

*Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada (C-V),
Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

E. Chacón

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, C.S.I.C, Campus de la
Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

J.P. Hernandez

*Department of Physics and Astronomy, University of North Carolina,
Chapel Hill NC 27599-3255 USA*

Para comprender las propiedades termodinámicas y el diagrama de fases líquido-vapor de un fluido alcalino es necesario tener en cuenta la interrelación existente entre la deslocalización electrónica y la estructura iónica. Tales fluidos exhiben una transición metal-aislante cerca del punto crítico y su energía tiene una contribución debida a la deslocalización de los electrones de valencia, la cual depende de una forma muy compleja de la densidad y de la correlación iónica. Las teorías desarrolladas hasta el momento, bien congelan el desorden iónico, bien promedian sobre el desorden electrónico, pero en todos los casos desacoplan la estructura iónica y electrónica.

En este trabajo presentamos un modelo mínimo en el cual el desorden estructural iónico es tratado autoconsistentemente con la aproximación más sencilla posible para la estructura electrónica. Consideramos un modelo de gas de red y tratamos la energía electrónica dentro del formalismo de tight-binding con hopping solamente entre los sitios primeros vecinos ocupados. Por medio de simulación MonteCarlo se ha obtenido la curva de coexistencia líquido-vapor, y hemos investigado la conductividad eléctrica (la cual muestra una transición metal-nometal) y la susceptibilidad paramagnética. La comparación con los experimentos confirma que el presente modelo contiene la física requerida para explicar la mayoría de los datos experimentales.

Panel P77 :

**UN FUNCIONAL DE LYAPUNOV PARA LA
INESTABILIDAD DE KUPPERS-LORTZ
DE FLUIDOS EN ROTACION**

Raúl Toral y Maxi San Miguel

Departamento de Física Interdisciplinar

Instituto Mediterráneo de Estudios Avanzados

*Universitat de les Illes Balears y Consejo Superior de Investigaciones
Científicas*

07071-Palma de Mallorca

La inestabilidad de Kuppers-Lortz se presenta en fluidos en rotacion y describe la inestabilidad de los rollos de conveccion que se presenta por encima de una velocidad critica de rotacion. Dichos rollos cambian periodicamente su direccion espacial estableciendose una dinamica que puede ser descrita por un sistema dinamico no variacional. Dicho sistema es analogo a modelos de alternancia de poblaciones establecidos en contextos biologicos. Nosotros presentamos un analisis perturbativo a partir de una situacion limite no trivial para la que es posible establecer la existencia de un funcional de Lyapunov. Se estudia tambien, mediante las tecnicas del potencial de Graham, el efecto del ruido sobre la dinamica del sistema, siendo capaces de determinar la frecuencia media de rotacion en funcion de los parametros del sistema y la intensidad del ruido.

Panel P78 :

ENCENDIDO DE LASERES DE CAVIDAD VERTICAL CON VARIOS MODOS TRANSVERSALES

M.C.Torrent

*Departament de Física i Enginyeria Nuclear, EUETIT,
Universitat Politècnica de Catalunya, Colom 1, 08222 Terrassa.*

Jaume Dellunde y J.M.Sancho

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Facultat de Física,
Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona.*

K.A.Shore

*School of Electronic Engineering and Computer Systems,
University of Wales, Bangor LL57 1UT, Gales, Reino Unido.*

Debido a su pequeña longitud de cavidad, los láseres de cavidad vertical (VCSELs) oscilan en un solo modo longitudinal. Diámetros típicos de la región activa permiten, sin embargo, la aparición de varios modos transversales. En operación continua, el modo dominante depende de la densidad de corriente y de la geometría del contacto. Para un contacto en forma de disco, la ganancia es en principio mayor para el modo de orden más bajo, con simetría circular y un solo lóbulo. Para corrientes de inyección grandes, por contra, aparecen modos laterales debido al *hole burning* espacial i a la difusión de portadores [1]. Hemos investigado desde un punto de vista teórico [2] la dinámica multimodo durante el encendido, con un buen acuerdo con simulaciones numéricas.

En sistemas de comunicación por fibra òptica, la aparición de un modo lateral durante el proceso de detección lleva a errores. De acuerdo con los resultados obtenidos, el VCSEL presenta operación monomodo durante la operación pulsada, a pesar de la operación multimodo que exhibe en estado estacionario. Por consiguiente, estos resultados predicen un buen comportamiento de los láseres de cavidad vertical en sistemas de comunicación por fibra òptica de alta velocidad, con una tasa de error baja.

[1] A.Valle, J.Sarma y K.A.Shore, IEEE JQE **31** (1995), 1423.

[2] K.Moriki, H.Nakahara, T.Hattori y K.Iga, Electronics and Communications in Japan (Part 2) **71** (1988), 81.

Conferencia Invitada **Jueves 23, 16h - 17h** :

MOTORES MOLECULARES

G. P. Tsironis

*Physics Department, University of Crete and Research Center of Crete
(FORTH)*

P. O. Box 2208, 71003 Heraklion, Crete Greece.

El movimiento difusivo de partículas puntuales en un potencial periódico no simétrico (potencial “ratchet”) sometido a la influencia de ruido correlacionado, produce una corriente de partículas no desvaneciente. Repasamos los principios básicos del movimiento en tal sistema y mostramos que, bajo ciertas condiciones, un cuerpo rígido sencillo puede seleccionar la dirección de la corriente. Asimismo mostramos que el efecto ratchet también puede aplicarse a los solitones topológicos y discutimos como puede utilizarse para la potencial detección de solitones y de breathers. Discutimos también aplicaciones relacionadas con la separación de sistemas moleculares.

Conferencia **Viernes 24, 10h30 - 11h :**

MÉTODOS ESTADÍSTICOS EN COMBUSTIÓN TURBULENTA

Luis Valiño

*Laboratorio de Investigación en Tecnologías de la Combustión (C.S.I.C.)
C/ María de Luna 8, 50015 Zaragoza.*

Se muestran las ecuaciones que describen la combustión de gases en flujos turbulentos. Se explican las dificultades de cierre de los términos químicos y la necesidad de utilizar una descripción probabilística del flujo. Se propone la ecuación de transporte de la función densidad de probabilidad (FDP) de las magnitudes de interés en el flujo. Se modela y resuelve la FDP de las especies reactivas y cantidades termodinámicas por un método de Montecarlo de pasos fraccionados. Se comparan las predicciones con simulaciones y resultados experimentales.

Conferencia **Viernes 24, 11h30 - 12h :**

LASERES DE CAVIDAD VERTICAL Y EMISION EN SUPERFICIE

A. Valle

*Instituto de Física de Cantabria, CSIC-UC, Facultad de Ciencias
Avda los Castros s/n, 39005 Santander*

Los láseres de semiconductor de cavidad vertical y emisión en superficie (VCSEL) son unos dispositivos que en la actualidad son objeto de un significativo desarrollo tecnológico. Este hecho está motivado por sus aplicaciones en comunicaciones ópticas, interconexiones, procesamiento de imágenes, computación óptica ... Entre las ventajas de los VCSEL se encuentran su emisión monomodo longitudinal, alta eficiencia de acoplamiento en fibra óptica, baja corriente umbral y alta capacidad de integración en redes mono y bidimensionales. Sin embargo los VCSEL presentan una serie de problemas que deben ser resueltos para lograr un funcionamiento óptimo: control del modo transversal de emisión, control de la polarización de la luz y eliminación substancial del calor del proceso de generación de luz.

La charla se enfocará principalmente en los dos primeros puntos antes citados: estudio de la estructura de modos transversales de VCSEL y estudio de sus características de polarización. Con el uso de modelos teóricos en los que se tiene en cuenta la dependencia espacio-temporal de campo eléctrico y densidad de portadores se procederá al estudio de las características estáticas y dinámicas de VCSEL en régimen de funcionamiento monomodo y multimodo transversal. Por último se discutirán los mecanismos responsables de seleccionar la polarización de estos láseres haciendo un especial hincapié en el caso de VCSEL en los que la cavidad esté formada por un medio birrefringente.

Conferencia **Sábado 25, 11h30 - 12h** :

EQUILIBRIO LIQUIDO-SOLIDO DE SISTEMAS MOLECULARES

Carlos Vega y Peter Monson

*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas,
Universidad Complutense
28040 Madrid*

*Department of Chemical Engineering, University of Massachusetts
01003 Amherst, USA*

Aunque es bien sabido que las esferas duras presentan una transición líquido-sólido a alta densidad, muy poco esfuerzo se ha dedicado al estudio de la transición transición líquido- sólido en sistemas duros moleculares. El sistema molecular duro más conocido es sin duda la denominada hard dumbbell que está constituida por dos esferas duras interpenetradas cuyos centros están situados a una distancia $L^* = L/\sigma$ donde σ es el diámetro de la esfera dura y L es la longitud del enlace. La hard dumbbell representa aproximadamente la forma de una molécula diatómica lineal. En este trabajo presentaremos resultados para el equilibrio líquido-sólido de hard dumbbells, obtenidos mediante simulación y mediante la aplicación de la teoría de celdas a la fase sólida. Dependiendo del valor de L^* , la fase en equilibrio con el líquido puede ser un cristal plástico o una fase ordenada orientacionalmente. Aplicando un término de campo medio, que describe aproximadamente el efecto de las fuerzas atractivas sobre las propiedades del fluido obtendremos el diagrama de fases global para varios valores de L^* . Esto permite analizar la variación con L^* del cociente entre la temperatura del punto triple y la del punto crítico. También analizaremos el efecto de un momento cuadrupolar sobre el diagrama de fases de una molécula lineal.

Comunicación Oral **Sábado 25, 10h30 - 10h45** :

EL COMPORTAMIENTO DE FLUIDOS COMPLEJOS EN MEDIOS POROSOS

Lourdes F. Vega

*Departament d'Enginyeria Química, ETSEQ, Universitat Rovira i Virgili,
43006 Tarragona.*

Fluidos adsorbidos en materiales microporosos, tales como carbonos activados, muestran una serie de fenómenos inusuales, entre los que destacan la adsorción preferencial de ciertos componentes del fluido, adsorción química en sitios particulares de la superficie, condensación capilar, transiciones de capas, etc. La situación es aún más compleja en el caso de fluidos asociantes o de cadenas moleculares. Estos materiales presentan gran interés en diversas aplicaciones industriales, tales como el uso de adsorbentes para procesos de separación y purificación, catálisis, etc. Sin embargo, el estudio experimental de los mismos es muy complicado debido a la presencia de múltiples efectos compitiendo simultáneamente, la pobre caracterización de las superficies, etc. La Mecánica Estadística y en concreto la simulación molecular, ha demostrado ser la herramienta idónea para estudiar este tipo de sistemas, ya que hace posible evaluar la influencia de cada uno de los parámetros en el comportamiento del sistema de forma independiente.

Discutimos aquí resultados obtenidos a partir de simulaciones moleculares de fluidos complejos, tales como cadenas y fluidos asociantes, confinados entre paredes planas. En concreto nos centraremos en dos tipos de sistemas: el primero de ellos, cadenas relativamente largas confinadas entre paredes planas neutras, se estudia por el método de Monte Carlo en el Colectivo Canónico, obteniéndose isoterms de adsorción y perfiles de densidad para distintas interacciones entre la cadena y la pared. El desarrollo de una teoría de campo medio generalizada permite estudiar de manera sistemática el comportamiento termodinámico del sistema ante una gran variedad de condiciones. Por otra parte, el comportamiento de cadenas asociantes y de moléculas con varios puntos asociantes se estudia mediante simulaciones en el colectivo de Gibbs y en el colectivo gran canónico, obteniéndose así mismo tanto isoterms de adsorción como perfiles de densidad. En este segundo caso se hace un estudio adicional de selectividad de componentes al considerar una mezcla con parte de las moléculas atraídas a puntos específicos de las superficies, imitando lo que ocurre en superficies activadas.

Panel P79 :

RESONANCIA ESTOCÁSTICA EN SISTEMAS MONOESTABLES

J. M. G. Vilar, A. Pérez-Madrid y J. M. Rubí

Departament de Física Fonamental, Facultat de Física,

Universitat de Barcelona, Diagonal 647,

08028 Barcelona, Spain

e-mail: vilar@hermes.ffn.ub.es

En la última década el fenómeno de la resonancia estocástica (SR) ha sido ampliamente tratado en la literatura. Tradicionalmente este fenómeno se presenta en sistemas biestables o multiestables. Sólo recientemente se ha encontrado SR en un tipo diferente de sistemas, sistemas *threshold* y *integrate-and-fire*. Algunos intentos de observar SR en sistemas monoestables han sido realizados, pero hasta la fecha no se ha encontrado un máximo en el *signal-to-noise ratio* (SNR) para un nivel de ruido diferente de cero, lo cual indica la presencia de SR. Aquí mostramos un sistema monoestable que presenta un máximo en el SNR en función del nivel de ruido.

Panel P80 :

Crecimiento anisotrópico de dominios en aleaciones binarias *fcc*

Carlos Frontera, Eduard Vives, Teresa Castán y Antoni Planes.

*Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria, Universitat de
Barcelona, Diagonal, 647
08028 Barcelona.*

Se presenta un estudio mediante simulación de Monte Carlo de las últimas etapas del crecimiento de dominios ordenados $L1_2$ en una aleación binaria A_3B de estructura *fcc*. La energía del sistema se modeliza mediante un hamiltoniano tipo Ising con interacciones a primeros vecinos. El sistema presenta un estado fundamental cuatro veces degenerado y dos tipos posibles de paredes de antifase que separan dominios ordenados: interficies planas y curvadas. Se comparan los resultados correspondientes a dos tipos de dinámica microscópicas: el mecanismo de Kawasaki habitual de intercambio de átomos vecinos y el mecanismo más realista de intercambio de átomos y vacantes. En particular se ha estudiado la evolución temporal del exceso de energía y del factor de estructura. En el caso del mecanismo de intercambio de átomos se ha obtenido un crecimiento anisotrópico que obliga a describir el sistema mediante dos longitudes características. Esto aparece como consecuencia del movimiento jerárquico de los dos tipos de interfases. En el caso del mecanismo de intercambio de átomos con vacantes, la secuencialidad del movimiento de la vacante destruye la evolución jerárquica de las interfases. Consecuentemente el crecimiento presenta “scaling” dinámico, es decir se puede describir mediante una única longitud característica. Finalmente, los resultados de la simulación se comparan con experimentos en Cu_3Au .

Conferencia Invitada **Sábado 25, 9h - 10h** :

**Pattern Formation and Nonequilibrium
Phase Transitions.**

Daniel Walgraef¹

*Departamento de Física
Universitat de les Illes Balears
07071-Palma de Mallorca*

¹ *Permanent address : Center for Nonlinear Phenomena and Complex
Systems,*

*Université Libre de Bruxelles, Campus Plaine
Blv du Triomphe B.P 231, 1050 Bruxelles, Belgium.*

Spatio-temporal patterns appear almost everywhere in nature, and, despite the progress made during the last decades, their description and understanding still raises important and basic questions. Generic behaviors of complex systems close to instabilities, and similarities between such instabilities and phase transitions have been assessed, leading to the concept of non-equilibrium phase transition. The relevance of this notion to the analysis of pattern formation, selection and stability is discussed in some specific examples in physics, chemistry and materials science