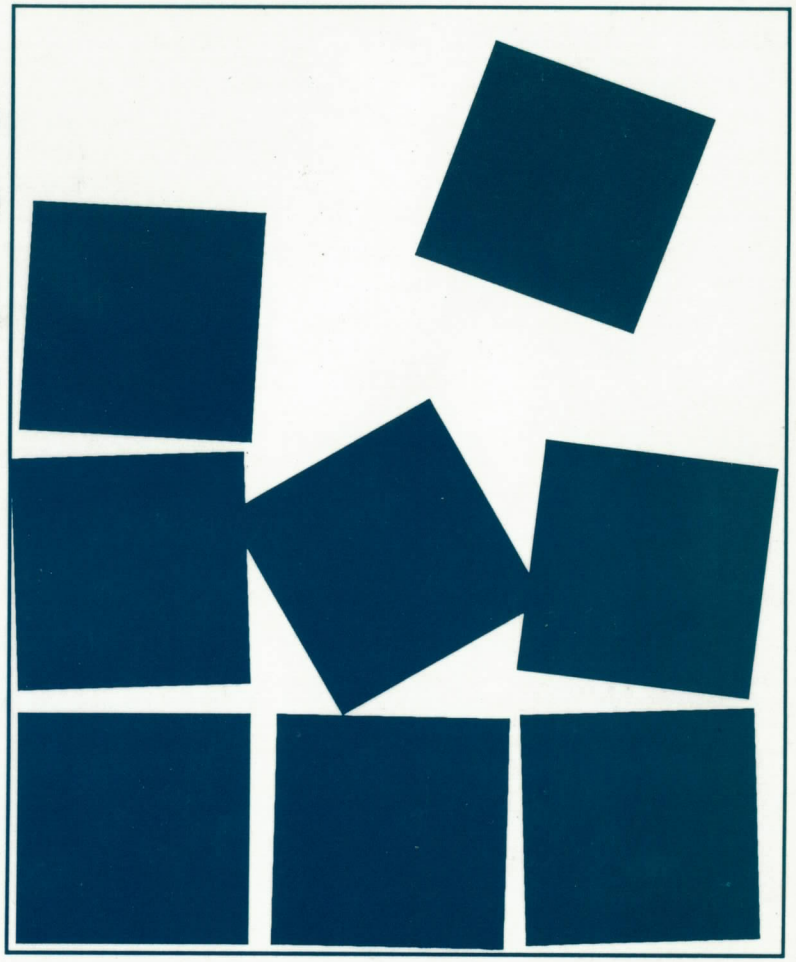
física estadística 94



sevilla, 6-8 octubre

editores: j.m. casado y l.f. rull • universidad de sevilla

Serie ACTAS: CONGRESOS, SIMPOSIOS, REUNIONES

Reservados todos los derechos. Ni la totalidad ni parte de este libro puede reproducirse o transmitirse por ningún procedimiento electrónico o mecánico, incluyendo fotocopia, grabación magnética o cualquier almacenamiento de información y sistema de recuperación, sin permiso escrito del Secretariado de Publicaciones de la Universidad de Sevilla.

© SECRETARIADO DE PUBLICACIONES
DE LA UNIVERSIDAD DE SEVILLA

© JOSÉ MANUEL CASADO
LUIS FELIPE RULL (Eds.)

PRINTED IN SPAIN. IMPRESO EN ESPAÑA

I.S.B.N.: 84-472-0190-2

Depósito Legal: SE-1.451-1994

Imprime: Imprenta A. Pinelo
Avda. de las Erillas, 17. Tfno.: (95) 439 25 46
41900 Camas - Sevilla - España

Física Estadística 94

Sevilla, 6, 7 y 8 de Octubre de 1994

José Manuel Casado
Luis Felipe Rull
(Eds.)

UNIVERSIDAD DE SEVILLA
1994

Con la celebración de **Física Estadística 94** se alcanza la sexta edición de unas reuniones que nacieron con la vocación de servir, en primer lugar, para que los investigadores que trabajan en el campo de la Física Estadística en España, tuvieran la oportunidad de conocerse e intercambiar ideas y opiniones y, por otro lado, fueran un instrumento para "tomar el pulso" al desarrollo de la investigación en esta disciplina en nuestro país.

Dada la evolución de estas conferencias, desde aquella inicial celebrada en Barcelona en el 88, puede decirse que han cumplido y siguen cumpliendo los objetivos que animaron su creación. En **Física Estadística 94**, se confirma el panorama estable que ya se había detectado en la reunión de El Escorial de 1993, aunque el número de contribuciones ha descendido ligeramente respecto de las presentadas en aquella reunión. Esperamos que en futuras ocasiones esta tendencia siga de cerca al importante desarrollo que han venido experimentando los trabajos de investigación en Física Estadística o áreas relacionadas con ella en los últimos años en España. Esto sería la mejor indicación de la utilidad de estas conferencias.

Los organizadores de **Física Estadística 94** quieren expresar su agradecimiento a la Dirección General de Investigación Científica y Técnica del Ministerio de Educación y Ciencia así como a la Junta de Andalucía y a la Universidad de Sevilla, organismos sin cuya ayuda no hubiera sido posible la realizacion de esta conferencia.

Queremos asimismo, saludar a todos los participantes a la Reunión y agradeceros vuestro interés. Confiamos en que **Física Estadística 94** os sea provechosa y os lleveis un agradable recuerdo de vuestra participación.

Sevilla, 6 de Octubre de 1994

José Manuel Casado
Luis Felipe Rull

Física Estadística 94

Comité Científico

- **R. Alvarez Estrada** (Universidad Complutense)
- **F.J. Bermejo** (Consejo Superior de Investigaciones Científicas)
- **J.M. Casado** (Universidad de Sevilla)
- **F.J. de la Rubia** (Universidad Nacional de Educación a Distancia)
- **M. Rubí** (Universidad de Barcelona)
- **L.F. Rull** (Universidad de Sevilla)
- **P. Tarazona** (Universidad Autónoma de Madrid)
- **C.F. Tejero** (Universidad Complutense)
- **M. Telo da Gama** (Universidad de Lisboa)

Física Estadística 94

PROGRAMA

	Jueves 6	Viernes 7	Sábado 8
08.45-09.00	Presentación		
09.00-09.45	J. Marro	D.L. Price	G. Sierra
10.00-10.45	N. Agraït	M. San Miguel	E. Fdez-Cara
11.00-11.30	DESCANSO	DESCANSO	DESCANSO
11.30-11.50	A.M. Lacasta	R. Brito	S. Bravo Yuste
11.55-12.15	J.L. Cabrera	M. López de Haro	P. García Glez
12.20-12.40	L. Acedo	J. Antoranz	O. Piro
12.45-13.05	C. Marín	PANELES	J.L. Fdez Abascal
13.10-13.30	J.M. López	PANELES	F. Dguez-Adame
13.35-13.55	P. Colet	PANELES	L. Mederos

ALMUERZO

16.00-16.45	J.C.G. Calado	J.J. Brey
17.00-17.45	M. Baus	J.G. de la Torre
18.00-18.30	DESCANSO	DESCANSO
18.30-18.50	A. Somoza	A. Careta
18.55-19.15	E. Vives	I. Pagonabarraga
19.20-19.40	J. Español	P. García Fdez

CONFERENCIAS INVITADAS

- **Price, D.L.**
Fast ion conduction and polyanion rotation in compound semiconductors

- **Sierra, G.**
Superconductividad de alta temperatura crítica

- **Marro, J.**
Orden fuera del equilibrio

- **San Miguel, M.**
Inestabilidades de fase en la ecuación vectorial de Ginzburg-Landau compleja

- **Fernández Cara, E.**
Resultados recientes para las EDP de Navier-Stokes y sus variantes

- **Baus, M.**
Dispersiones coloidales

- **Calado, J.C.G.**
Aplicações Planetàrias da Termodinâmica: os casos de Titã e Tritão

- **Brey, J.J.**
Modos colectivos en fluidos mediante un modelo sencillo

- **García de la Torre, J.**
Dinámica de Macromoléculas en disolución.

- **Agrait, N.**
Microscopía de efecto túnel y de fuerzas atómicas

COMUNICACIONES ORALES

C-1.-Lacasta,A.M., Sancho,J.M. y Sagués, F.
Separación de fases por convección estocástica.
C-2.-Abascal, J.L.F., Bresme, F. y Gil Montoro, J.C.
Asociación iónica y estructura de electrolitos: análisis de clusters, percolación y poliedros de Voronoi.
C-3.-Diez,E., Domínguez-Adame,F. y Sánchez, A.
Superredes con desorden correlacionado como sistema experimental para demostrar la ausencia de localización.
C-4.-Cabrera,J.L. y de la Rubia, F.J.
Análisis numérico del comportamiento de la ecuación logística discreta aleatoria con retardo temporal.
C-5.-García Fernández, P. y Sánchez Díaz, A.
Squeezing en el dominio oscilatorio de láseres con absorbentes saturables de dos fotones.
C-6.-García González, P., Chacón, E. y Alvarellos, J.E.
Sobre el escalamiento de funcionales cinéticos tipo ADA para un gas de electrones.
C-7.-Antoranz, J.C., García Ybarra, P.L., Degroote, E., Sankovitch, V. y Castillo, J.L.
Evidencia experimental de un comportamiento homoclínico en la propagación de llamas.
C-8.-Bravo Yuste, S.
Difusión en fractales. Estadística del orden de los tiempos de primer paso.
C-9.-Marín, C. y Garzó, V.
Viscosidad no lineal en una mezcla binaria diluida.
C-10.-López de Haro, M., del Río, J.A. y Whitaker, S.
Permeabilidad dinámica para un fluido de Maxwell en un medio poroso.
C-11.-López, J.M., Rodríguez, M.A. y Pesquera, L.
Análisis de las propiedades de auto-promedio en el transporte de partículas en medios aleatorios.
C-12.-Brito, R., Domínguez-Adame, F. y Sánchez, A.
C-Propiedades de transporte en sólidos unidimensionales desordenados..
C-13.-Pagonabarraga, I. y Rubí, J.M.
Efectos hidrodinámicos en la adsorción de partículas pesadas.
C-14.-Hernández García, E. y Piro, O.
Terremotos lubricados en medios excitables elásticos.
C-15.-Somoza, A.M., Tarazona, P., Marconi, U.M.B.
Crecimiento en sistemas de membranas y vesículas.
C-16.-Vives, E., Goicoechea, J, Ortín , J. y Planes A.
Modelización de las avalanchas en transiciones de fase de primer orden.
C-17.-Colet, P. and Wiesenfeld, K.
A proposed Test for the Unified Charge Density Wave Model.
C-18.-Acedo, L. y Santos, A.
Gases de Lorentz reticulares con dispersores no identicos.
C-19.-Español, Pep
Avalanchas y modos propagantes en un modelo de Burridge-Knoprof.
C-20.-Careta, A. y Kapral, R.
Turbulence in Reaction-Diffusion Chemical Fronts.
C-21.- Mederos, L., Somoza, A. y Sullivan, D.E.
Transiciones de Layering en cristales líquidos

PANELES

P-1.-Casado, J.M. y Mejías, J.J.
Simulación del transporte de carga en polímeros moleculares dopados: el efecto del desorden energético en la velocidad de los portadores.

P-2.-Elizalde, E.
Funciones zeta y algunas aplicaciones físicas

P-3.-Elizalde,E.,Odintsov,S.D. y Romeo,A.
Determinación de la dimensión y signatura del espacio-tiempo por minimizaciones sobre la función de partición

P-4.-Morillo,M. y Gómez Ordoñez, J.
Amplificación resonante de una señal rectangular por un sistema biestable con ruido.

P-5.-Morillo,M. y Cukier,R.I.
Tunelado en sistemas disipativos sometidos a campos externos dependientes del tiempo.

P-6.-Lemos,M.C., Luque, J.J. y Jiménez Morales, F.
Multiplicidad y oscilaciones en un modelo de reacción superficial.

P-7.-Luque,J.J., Jiménez Morales,F. y Lemos,M.C.
Autoorganización en Autómatas Celulares probabilisticos.

P-8.-Casademunt, J., Ross Thompson, J. y Viñals, J.
Convección estocástica inducida por aceleraciones residuales en entornos de microgravedad.

P-9.-Gónzalez, D.J., González, L.E. y Hoshino, K.
Propiedades estáticas y dinámicas del litio líquido.

P-10.-González, L.E., González, D.J. y Silbert, M.
Estructura y ordenamiento de las aleaciones líquidas LiNa y LiMg.

P-11.-Echeverría, I. y Rubio, M.A.
Sistema de levitación magnética para medida de tensiones normales.

P-12.-Galeano, J. y Rubio, M.A.
Dinámica stick-slip de las relajaciones en un gel: Influencia de la velocidad de cizalla.

P-13.-Rascón, C., Mederos, L. y Navascués, G.
Nuevas relaciones exactas para la función de distribución de dos cavidades.

P-14.-García-Ybarra,P.L., Antoranz, J.C. y Medina,J.
Extinción inestacionaria de llamas de premezcla.

P-15.-Sánchez,A., Cai, D., Gronbech-Jensen, N. y Bishop, A.R.
Transiciones de roughening en modelos de crecimiento de superficies fuera del equilibrio

P-16.-Millán Rodríguez, J. y Pérez García, C.
Movimiento de defectos en convección con rotación.

P-17.-Maza Ozcoidi, D., Burguete,J., Mancini, H. y Pérez García, C.
Caracterización de defectos en convección de Bènard-Marangoni, bajo calentamiento unidimensional.

P-18.-Maza Ozcoidi,D. Mancini, H. y Pérez García, C.
Análisis experimental de un oscilador de Bènard-Marangoni.

P-19.-Maciá, E., Domínguez-Adame, F. y Sánchez, A.
Espectro electrónico y entropía de la información en sistemas cuasiperiódicos.

P-20.-Mancho Sánchez, A. M. y Pérez García, C.
Modelo Unidimensional para una celda convectiva

P-21.-Delgado-Buscalioni, R. Alvarellos, J.E. y Zúñiga, I.
Un modelo de pared, descrito mediante una ecuación de Langevin generalizada, útil en simulaciones de Dinámica Molecular.

P-22.-Dellunde, J., Sancho, J.M., Torrent, M.C., Mirasso, C.R. y Hernández García, E.
Estadística de tiempos de paso en un laser semiconductor con feedback y señal inyectada.

P-23.-Burguete,J. Maza Ozcoidi, D. Mancini, H. y Pérez García, C.
Dinámica producida por una inestabilidad secundaria creada por un calentamiento localizado en convección Rayleigh-Bènard.

P-24.-Mach, J., Mas, F. y Sagués, F.
Algoritmos para el cálculo de exponentes multifractales.

P-25.-Garcés, J.L., Mas, F., Galceran, J., Salvador, J. y Puy, J.
Determinación de especies en complejos polielectrolito-metal pesado. Caso lábil con interacciones.

P-26.-Velasco, E. y Mederos, L.
Teoría de perturbaciones para el diagrama de fases del modelo Gay-Berne de un cristal líquido.

P-27.-Montagne, R., Hernández García, E. y San Miguel, M.
Study of the Disordered Regimes in the Complex Ginzburg-Landau Equation and its Non-Equilibrium Potential.

P-28.-Tarazona, P., Chacón, E. y Hernández, J.P.
Un modelo sencillo para el diagrama de fases líquido-vapor de los fluidos alcalinos.

P-29.-Alvarellos, J.E., Chacón, E. y García González, P.
Funcional de la energía total de un gas de electrones basado en el hueco de intercambio-correlación.

P30.-Leote de Carvalho, R.J.F. y Evans, R.
Análisis asintótico de correlaciones en fluidos iónicos.

P-31.-Sintes, T., Toral, R. y Chakrabarti, A.
Dynamical Scaling of Fractal Aggregates in Dense Colloidal Solutions.

P-32.-Somoza, A.M., Mederos, L., Chacón, E. y Tarazona, P.
Membranas, vesículas y micelas.

P-33.-Pastor, J. y Rubio, M.A.
Estructuras compactas en electrodeposición galvanostática.

P-34.-San Martín, J. y Antoranz, J.C.
Intermitencia tipo II en un laser con absorbente saturable.

P-35.-López Martín, A., Antoranz, J.C., Castillo Jimeno, J.L. y García Ybarra, P.L.
Modelización con autómata celular de una llama de premezcla con Le≠1.

P-36.-Montanero, J.M. y Santos, A.
Simulación de la ecuación de Boltzmann para el flujo tangencial uniforme.

P-37.-Bravo Yuste, S y Santos, A.
Función de distribución radial para el potencial de pozo cuadrado.

P-38.-Garzó, V.
Flujo de calor inducido por una fuerza externa en un gas diluido alejado del equilibrio.

P-39.-Cabral, B.J.C.
Monte carlo simulation of a site-site model for liquid methyl iodide.

P-40.-Luque, P. y Sancho, J.M.
Ecuación de Ginzburg-Landau con ruido multiplicativo.

P-41.-Miguel, M.C. y Rubí, J.M.
Dinámica de relajación de partículas ferromagnéticas en suspensión: teoría y experimentos.

P-42.-Jiménez, F., de Miguel, E. y Rull, L.F.
Algoritmo de Nosé Hoover para el modelo de Gay-Berne

P-43.-Martín del Río, E., de Miguel, E. y Rull, L.F.
Orden orientacional en cristales líquidos bidimensionales.

P-44.-Vives, E., Frontera, C. Castán, T. y Planes, A.
Crecimiento vía vacantes de una interfase inestable.

P-45.-Maeso, M.J. y Solana, J.R.
Ecuaciones de estado de fluidos compuestos de móléculas triatómicas rígidas.

P-46.-Gómez Estévez, J.L. y Pugazhendhi, P.
Mecánica Estadística de disoluciones al nivel de MacMillan-Mayer.

P-47.-Díaz Hernández, J., Magalinnski, V.B., Vera, H.M. y Palacios M.B.
Modelo de Markov en la absorción.

P-48.-Alvarez-Estrada, R.F.
Macromoléculas con distancias y ángulos de enlace fijos: un estudio basado en la Mecánica Estadística Cuántica.

P-49.-González Cinca, R., Ramirez Piscina, L., Casademunt, J. y Hernández Machado, A.
Inestabilidades morfológicas de una interfase nemático-esméctico B.

P-50.-Noriega, J.M., Rodríguez, M.A. y Pesquera, L.
Propagación de ondas en un medio excitable desordenado.

P-51.-Parga, N.
Aprendizaje no supervisado: procesamiento lineal y no lineal.

P-52.-Gómez Alós J.M. y Gómez Ordoñez, J.
Estudio mediante Dinámica Molecular del comportamiento de un sistema Lennard-Jones sometido a altas tasas de enfriamiento.

P-53.-Casado Pascual, J. y Brey, J.Javier
Comportamiento resonante del Tiempo de Primer Paso en una red fluctuante.

P-54.-Toral, R.
Estudio Monte-Carlo de polímeros injertados en superficies.

P-55.-Leitão, H and Telo da Gama, M.
Derivation of a Landau Expansion for Ternary Surfactant Mixture.

P-56.-Ferreira, P.G., Telo da Gama, M. and Schlijper, A.G.
Variational Theory of Nonuniform Fluids.

P-57.-Cuadros,F. y Mulero, A.
Termodinámica de la adsorción en fluidos Lennard-Jones

CONFERENCIAS

Superconductividad de alta T_c

German Sierra
Instituto de Matemáticas y Física Fundamental
CSIC, Serrano 123
28006 Madrid

El estudio de los Oxidos de cobre que dan lugar a la superconductividad de alta temperaturasigue siendo uno de los temas más fascinates de la Materia Condensada de los últimos años. No solo por sus propiedades superconductoras sino por las excepcionales propiedades del estado normal se está llevando a cabo una revisión de conceptos básicos que está abriendo nuevas perspectivas en la Física del Estado Sólido. En la presente charla se tratará de dar una breve perspectiva de los avances realizados en este campo.

ORDEN FUERA DEL EQUILIBRIO

Joaquin Marro
Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional
Deartamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias
Universidad de Granada, 18071, Granada

Se describiran resultados recientes del grupo de física estadistica de la Universidad de Granada, con énfasis en los relacionados con cambios de fase y comportamientos críticos fuera del equilibrio. En particular, espera describirse orden en sistemas reticulares con dinámicas que compiten, estableciendo relaciones con otros problemas familiares tales como vidrios de espines, redes de neuronas, modelos ANNNI, etc., y se comentará sobre el comportamiento crítico del gas reticular sometido a un campo constante.

Some recent results for the Navier-Stokes and other similar equations

Enrique FERNÁNDEZ-CARA
University of Sevilla, Spain

The goal of this lecture is to recall the main physical and mathematical aspects of the equations governing the motion of incompressible fluids and, also, to present some recent results concerning these equations.

In a first part, we try to explain why the Navier-Stokes and other similar equations are relevant in fluid mechanics and also from the theoretical viewpoint. We recall briefly the main difficulties found to "solve" these equations, in particular those connected to turbulence and transition.

In the second part of the lecture, we present some recent results on two subjects of particular interest: The numerical solution of the equations via "parallel algorithms" and the controllability of Navier-Stokes flows.

By "parallel algorithms" we mean those discretization schemes that can be used to split the main differential operator in such a way that the most important difficulties (nonlinearity and incompressibility) can be considered independently, by different processors. On the other hand, in connection with controllability, we ask ourselves how the velocity field of a flow can be driven to a state arbitrarily close to a prescribed desired field.

Dpto. de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico (University of Sevilla),
C/ Tarfia s/n, 41012 Sevilla, SPAIN

Dispersiones coloidales

Marc Baus
Faculté des Sciences, C. P. 231
Université Libre de Bruxelles
B-1050 Bruselas,Bélgica

En la última década, la ingenería química ha logrado producir dispersiones de partículas coloidales cuyas formas y tamaños son prácticamente constantes (1). Un conjunto de tales partículas (casi) idénticas se puede estudiar con los métodos de la Física Estadística. Una primera ventaja es que, debido al tamaño específico de las partículas coloidales, pueden usarse métodos de observación óptica. La ventaja de mayor interés teórico es que, por ingenería química, se puede reducir el alcance del potencial de interacción por debajo del rango accesible a los sistemas atómicos. Como consecuencia de ello, las dispersiones coloidales son la sede de varias transiciones de fase, unas ya conocidas y otras todavía especulativas (2).

1. W. B. Russel, D. A. Saville y W. R. Schowalter, Colloidal Dispersions, Cambridge University Press, Cambridge 1991.
2. C. F. Tejero, A. Daanoun, H. N. W. Lekkerkerker y M. Baus, Phys. Rev. Lett., en prensa.

Aplicações planetárias da Termodinámica: Os casos de Titá e Tritáo

Jorge C. G. Calado
Complexo I
Instituto Superior Técnico
1096, Lisboa, Portugal

O nascimento da ciencia moderna esta ligado às primeras observacoes planetarias com os trabahlos de Galileo e Kepler. Embora a maior parte das medições directas seja hoje feita atraves de técnicas espectroscópicas, a modelação da estructura dos planetas (incluindo as respectivas atmosferas, quandofor o caso) assenta em bases cinéticas e termodinâmicas. Vénus forneceu, nos anos 60, a primeira aplicação da termodinâmica à modelação dum planeta. Entre os corpos mais interesantes do sistema solar encomtram-se o Tritão (satelite de Neptuno) e Titã (satelite de Neptuno). Ambos possuem uma atmosfera de azoto, mas enquanto o Tritão exibe uma superficie gelada, com calotes polares e geysers, a superficie (invisível) do Titã deve estar extensivamente coberta por um oceano de etano e metano. Este é o domínio da termodinâmica das moléculas simples a temperaturas criogénicas. Estudos recentes de equilibrio de fases (experimentais, teroicos e de simulação) e medidas calorimétricas efectudas sobre os sistemas apropiados (N_2, CH_4 , C_3H_8, Ar, etc e suas misturas) ajudam-nos a formar uma idea mais exacta sobre a estructura daqueles palnetas, em antecipacao da proxima (1996) Missão Cassini a Saturno e Titã.

Modos colectivos en fluidos mediante un modelo sencillo

J. Javier Brey
Física Teórica. Universidad de Sevilla

Los modos colectivos son las extensiones para longitudes de onda del orden del recorrido libre medio en un gas de los modos hidrodinámicos. Consecuentemente, caracterizan tanto el movimiento del gas como las correlaciones que existen en el mismo. En particular, en ellos se encuentra la explicación del origen de las correlaciones de largo alcance que presentan los fluidos en situaciones muy alejadas del equilibrio. Su cálculo, a partir de primeros principios, es prohibitivamente complicado. Aquí presentamos un modelo de ecuaciones cinéticas para la función de distribución de una partícula y las funciones de correlación de pares. El modelo está basado en la ecuación de Boltzmann y las correspondientes ecuaciones asociadas para las correlaciones. Los resultados proporcionan una base práctica para la descripción de fluctuaciones y fenómenos de transporte en estados de no equilibrio. También se presentan en forma somera algunas aplicaciones elementales.

Dinámica de macromoléculas en disolución

José García de la Torre

Departamento de Química Física, Facultad de Química, Universidad de Murcia, 30071 Murcia

El interés de la dinámica Browniana de macromoléculas biológicas y polímeros sintéticos en disolución radica en que en ella se basan muchos métodos de caracterización macromolecular, y porque determina la función de la macromolécula en diversos procesos técnologícos o fisiológicos. Para macromoléculas biológicas rígidas, la dinámica Browniana está inmediatamente relacionada con la hidrodinámica de partículas rígidas a bajo número de Reynolds. Los coeficientes de difusión, viscosidad intrínseca, etc, se pueden obtener a partir de los tensores de fricción. Para partículas de forma arbitraria, utilizamos modelos hidrodinámicos formados por elementos esféricos, incluyendo adecuadamente en el tratamiento teórico la interacción hidrodinámica entre ellos. Se mostrará un resúmen de los aspectos teóricos y numéricos de este tratamiento, así como algunas aplicaciones a proteinas y ácidos nucléicos. Para macromoléculas biológicas semiflexibles, y polímeros sintéticos de cadena flexible, la descripción teórica es muy complicada debido a la conjunción de los problemas hidrodinámicos con los aspectos estadísticos debidos a la flexibilidad. Para estos casos, empleamos una técnica numérica en la que se simula, con base en los principios fundamentales, la dinámica Browniana de modelos adecuados. Se pueden incluir en la simulación todo tipo de aspectos adicionales, tales como flujos, campos eléctricos, etc. De las trayectorias Brownianas así simuladas, no solamente se pueden obtener los coeficientes fenomenológicos sencillos, sino que también es posible estudiar aspectos muy específicos del comportamiento macromolécular. Se ilustrará esta técnica con ejemplos relativos a la flexibilidad parcial de macromoléculas biológicas, y sobre el comportamiento de cadenas de polímeros en flujos elongacionales.

Microscopía de efecto túnel y de fuerzas atómicas

Nicolás Agraït
Laboratorio de Bajas Temperaturas
Depto. Física de la Materia Condensada, C-III
Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid

Las nuevas técnicas microscópicas de sonda local de barrido, como el microscopio de efecto túnel y el microscopio de fuerzas atómicas, permiten no solo obtener imágenes de superficies con resolución atómica sino también realizar experimentos locales en los que estén involucrados unos pocos átomos.

Tras una introducción a las técnicas de microscopía de efecto túnel y de fuerzas atómicas, presentaré varios experimentos realizados a bajas temperaturas (4.2 K):

- Conductancia de contactos metálicos de uno o varios átomos. Al tener que atravesar los electrones una constricción de dimensiones del orden de la longitud de onda de Fermi, se pueden observar efectos de cuantización en la conductancia.
- Uniones superconductoras. La variación controlada de la posición de una punta superconductora sobre un substrato superconductor permite seguir de forma continua la transición entre los regímenes de túnel y el de contacto metálico.
- Deformación plástica de estructuras nanoscópicas. La combinación de microscopía de fuerzas y de efecto túnel permite el estudio detallado de los procesos que tienen lugar durante la deformación plástica.

COMUNICACIONES

Separación de fases con convección estocástica

A.M. Lacasta[1], J.M. Sancho[2] y F. Sagués[3].
[1] Departament de Física Aplicada,
Universitat Politècnica de Catalunya,
Jordi Girona Salgado 31, Barcelona
[2] Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria,
[3] Departament de Química Física,
Universitat de Barcelona, Av. Diagonal 647, Barcelona

Se ha estudiado la evolución de un sistema binario que se separa en dos fases, y que está sometido a un flujo turbulento externo. El modelo tratado se basa en una ecuación de Cahn-Hilliard, con un nuevo término que da cuenta de la advección sufrida por la sustancia. El campo de velocidades es independiente de la concentración y se introduce como una cantidad estocástica, homogénea, isótropa y estacionaria, con un espectro de energía determinado.[1,2]

Observamos que el crecimiento de los dominios es, o bién favorecido o bién suprimido, dependiendo de los parámetros del campo de velocidades generado.[3]

[1] A. Careta, F. Sagués y J.M. Sancho, Phys. Rev. E**48**, 2279 (1993).
[2] A. Careta, F. Sagués y J.M. Sancho, Phys. Fluids. **6**, 349 (1993).
[3] A.M. Lacasta, J.M. Sancho y F. Sagués (preprint 1994)

C-2

Asociación iónica y estructura de electrolitos: análisis de clusters, percolación y poliedros de Voronoi

J.L.F. Abascal, F. Bresme and J.C. Gil Montoro
Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, E-28040, Spain

Se ha investigado la estructura de disoluciones de electrolitos (obtenidas mediante simulación) que cubren un margen amplio de concentraciones y cargas iónicas. La caracterización estructural se ha llevado a cabo por medio de diferentes técnicas que permiten poner énfasis en el estudio de los fenómenos de asociación iónica: análisis de cluster[1, 2], funciones de conectividad par (y umbrales de percolación)[3, 4] y poliedros de Voronoi[5, 6]. A pesar de que cada técnica tiene un sesgo diferente en la forma de analizar la existencia de agregados, los resultados obtenidos son, en esencia, coincidentes. Para electrolitos 1:1, las estructura es siempre del tipo 'nube' iónica más o menos densa según sea la concentración. Los electrolitos con mayor carga iónica muestran una mayor riqueza estructural. A concentraciones altas se observan agregados compactos que involucran a la mayor parte de los iones de la disolución (estructura tipo sal fundida). Al disminuir la concentración, los agregados se hacen más locales con topologías lineales que anuncian la presencia de la transición líquido–gas propia de sistemas altamente cargados a bajas densidades [7].

References

[1] Abascal, J.L.F.; Turq, P. *Chem. Phys.* **153**, 79 (1991).

[2] Abascal, J.L.F.; Bresme, F.; Turq, P. *Mol. Phys.* **81**, 143 (1994).

[3] Bresme, F.; Abascal, J.L.F. *J. Chem. Phys.* **99**, 9037 (1993).

[4] Bresme, F.; Abascal, J.L.F. *J. Chem. Phys.* **100**, 1769 (1994).

[5] Gil Montoro, J.C.; Abascal, J.L.F. *J. Phys. Chem.* **27**, 4211 (1993).

[6] Gil Montoro, J.C.; Bresme, F.; Abascal, J.L.F. (enviado)

[7] Bresme, F.; Lomba, E.; Weis. J.-J.; Abascal, J.L.F. (enviado)

C-3

Superredes con desorden correlacionado como sistema experimental para demostrar ausencia de localización.

E. Diez[1], F. Domínguez-Adame[2], y A. Sánchez[1]
[1]Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid, C./ Butarque, 15, 28911 Leganés, Madrid
[2]Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense, 28040 Madrid

En este trabajo analizamos cómo estudiar experimentalmente la capacidad del desorden correlacionado para inhibir la localización en sistemas unidimensionales. Es conocido teóricamente [1,2] que en un modelo de Kronig-Penney, descrito por un potencial de la forma $V(x) = \sum_n \lambda_n \delta(x - n)$, cuando λ_n toma sólo dos valores posibles aleatoriamente con la restricción de que uno de ellos aparece siempre a pares (dímeros), aparecen infinitas bandas de estados electrónico extendidos. Sin embargo, no se tiene todavía evidencia experimental de este hecho. En este sentido, las bandas de estados extendidos deben originar incrementos significativos de la conductividad eléctrica cuando el potencial químico se sitúa en dicho intervalos de energías o bien cuando se aumenta la temperatura. Sobre la base de este estudio discutimos cómo las medidas de conductividad pueden proporcionar información de la anchura de las bandas de estado extendidos así como de la concentración de dímeros presentes en el sistema. Las medidas se proponen sobre superredes desordenadas, que pueden ser construidas para imitar perfectamente el modelo teórico. Estas predicciones pueden ser utilizadas para comprobar experimentalmente que el desorden correlacionado provoca la aparición de estados extendidos en sistemas de baja dimensionalidad.

[1] A. Sánchez, E. Maciá, y F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **49**, 147 (1994).
[2] A. Sánchez y F. Domínguez-Adame, J. Phys. A (en prensa).

C-4

ANALISIS NUMERICO DEL COMPORTAMIENTO DE LA ECUACION LOGISTICA DISCRETA ALEATORIA CON RETARDO TEMPORAL

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

Departamento de Física Fundamental, U.N.E.D., Apto. 60141, 28080 Madrid, España

Abstract

Ecuaciones con retardo temporal perturbadas aleatoriamente frecuentemente aparecen en la modelización de sistemas biológicos reales. Sin embargo, no existe un entendimiento completo de sus propiedades de estabilidad. A nuestro entender, la investigación realizada se ha enfocado en el desarrollo de pruebas de la existencia de soluciones periódicas para determinados tipos de ecuaciones y, más recientemente, en condiciones suficientes para la estabilidad estocástica y en media cuadrática. Este trabajo considera un modelo discreto simple que comparte propiedades esenciales con otros más complejos: nolineal, retardo temporal y términos aleatórios. Numericamente analizamos la ecuación logística con retardo temporal bajo la influencia de ruido paramétrico, blanco y de color. Estudiamos la dependencia de una transición inducida por el ruido, desde un estado acotado a uno no acotado, con las características del ruido y la longitud de la memoria.

C-5

Squeezing en el dominio oscilatorio de laseres con absorbentes saturables de dos fotones

P. Garcia Fernandez y A. Sanchez Diaz
Instituto de Estructura de la Materia, CSIC, Madrid

Los sistemas opticos en los que un modo de la cavidad sufre una interaccion de dos fotones presentan un dominio inestable en amplitud o fase. Segun se alcanza el umbral de inestabilidad, la cuadratura del campo de salida ortogonal a la que desarrolla la inestabilidad presenta squeezing perfecto. Por encima del umbral de inestabilidad, la intensidad de salida presenta oscilaciones espontaneas. Consideraremos un laser con un absorbente saturable de dos fotones (L2PSA) cuando el laser y el absorbente estan en la misma cavidad y en condiciones de resonancia. Previamente hemos estudiado[1] el regimen oscilatorio que emerge del umbral de inestabilidad en fase del L2PSA. Hemos calculado analiticamente las soluciones periodicas cerca pero por encima de la bifurcacion de Hopf por medio de una solucion en serie de potencias. Hemos usado el metodo de Collett y Gardiner[2] para calcular el espectro de squeezing del L2PSA en el dominio oscilatorio. Este metodo ha sido generalizado para tratar fluctuaciones alrededor de soluciones periodicas siempre que las fluctuaciones sean pequenas respecto a los valores medios. Hemos linearizado la ecuacion de Fokker-Planck en la representacion P alrededor de la solucion periodica en serie. Hemos obtenido un proceso Ornstein-Uhlenbeck dependiente del tiempo cuyas matrices de arrastre y difusion dependientes del tiempo se pueden expresar como una serie de potencias en el mismo parametro que la solucion en serie periodica. Usando metodos estandard hemos obtenido las correlaciones temporales y dado que las definiciones de espectro de fluctuaciones dependiente del tiempo[3] presentan serios problemas, discutimos una definicion de espectro promediado temporalmente que corresponde a la densidad espectral de la varianza promediada temporalmente. Finalmente, discutimos el espectro de squeezing para las fluctuaciones de amplitud e intensidad alrededor del ciclo limite.

C-6

Sobre el escalamiento en funcionales cinéticos tipo ADA para un gas de electrones.

P. García-González[1], E. Chacón[1],[2], J. E. Alvarellos[1].

(1) Departamento de Física Fundamental (UNED).
Apartado 60.141. E-28080 Madrid.
(2) Instituto de Ciencias de Materiales (CSIC).
Universidad Autónoma de Madrid. E-28049 Madrid.

Hace varios años, propusimos un funcional cinético tipo ADA *(averaged density approximation)* para un sistema de electrones inhomogéneo empleando una densidad promedio $\bar{n}(\vec{r})$ obtenida a través de un peso ω escalado en la densidad local del sistema $n(\vec{r})$. Con una expresión parametrizada de ω se tenían buenos resultados en sistemas modelo; sin embargo, el empleo de la función peso exacta los empeora significativamente. El problema proviene de un mal comportamiento asintótico de ω no contemplado por las parametrizaciones.

Por tanto, hemos desarrollado otros modelos de funcionales cinéticos. Una primera idea, el escalamiento del peso en la propia densidad promediada $\bar{n}(\vec{r})$ (como se emplea en funcionales clásicos) no evita el mal comportamiento de ω. Empero, cambios en el término de Weizsäcker y en el escalamiento, incluyendo las longitudes naturales del sistema en los límites homogéneo (inversa del momento de Fermi) y monopartícula (inversa de la derivada logarítmica de la densidad) sí eliminan el largo alcance de ω, aunque los resultados obtenidos no se corresponden con los exactos en sistemas físicos prueba.

Finalmente concluimos que un funcional cinético tipo ADA (con un término de Weizsäcker puro) promediando el momento de Fermi del gas $\bar{k}_F$ a través de un peso escalado en el momento de Fermi local es la solución más adecuada. En este caso, el mal comportamiento de ω desaparece y, sin parametrización alguna, se recuperan los buenos resultados en sistemas modelo.

[1] E. Chacón, J.E. Alvarellos and P. Tarazona. *Phys. Rev. B* **37** (1985) 7868.

C-7

Evidencia Experimental de un Comportamiento Homoclínico en la Propagación de Llamas

J.C. Antoranz, P.L. García Ybarra,
E. Degroote, V. Sankovitch y J.L. Castillo
L.C.D.I.
Depto. Física Fundamental, U.N.E.D.
Apdo. 60.141, 28080-Madrid

Junio, 1994

Se ha caracterizado experimentalmente la propagación de llamas sobre combustibles líquidos. Hemos observado tres tipos de regímenes diferentes de propagación: Un régimen rápido de propagación con velocidad uniforme, para valo res altos de la temperatura del fluido, un régimen lento, también con velocidad uniforme para valores muy bajos de la temperatura del líquido y, por último, un régimen oscilatorio (pulsante) para temperaturas intermedias. Las oscilaci ones de la velocidad de propagación comienzan a partir de una bifurcación de Hopf del estado de propagación rápida. Más tarde, al descender la temperatura del combustible, el ciclo límite colisiona con la solución estacionari a de velocidad lenta, originando una conexión homoclínica. Se ha caracterizado esta transición, observando que el periodo de las oscilaciones diverge de forma logarítmica al acercarse a la rama de propagación lenta. Esta es una carac ter ística de la conexiones homoclínicas genéricas.

(1) P.L. García Ybarra, J.C. Antoranz, V. Sankovitch y J.L. Castillo , *Physical Review E*, Junio 1994, en prensa.

C-8

DIFUSIÓN EN FRACTALES. ESTADÍSTICA DEL ORDEN DE LOS TIEMPOS DE PRIMER PASO

S. Bravo Yuste
Institute for Nonlinear Science and Department of Chemistry,
UCSD, California 92093-0340
Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

La difusión en fractales es uno de los temas más importantes y estudiados de la Física de Sistemas Desordenados. Por otra parte, un gran número de problemas en Física (y en Química y Biología) pueden formularse en términos del tiempo de primer paso de partículas que se difunden. Habitualmente se estudia la difusión de una única partícula. Cuando es un conjunto de partículas el que se difunde, lo poco que se conoce se limita, casi exclusivamente, al caso unidimensional. En esta comunicación se presentan resultados teóricos referentes al problema de los tiempos medios de primer paso (y momentos de orden superior) de las primeras j de un total de N partículas idénticas que, partiendo de un mismo punto, se difunden independientemente en el seno de estructuras fractales finitamente ramificadas. Los resultados de la red unidimensional se recuperan si consideramos a ésta como un fractal con orden de ramificación mínimo. Se discute con cierto detalle la difusión en fractales de Sierpinsky (en dos y tres dimensiones) y en la curva de Given-Mandelbrot.

C-9

VISCOSIDAD NO LINEAL EN UNA MEZCLA BINARIA DILUIDA

C. Marín y V. Garzó
Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

Se lleva a cabo un anlisis de las propiedades de transporte en una mezcla binaria diluida con valores arbitrarios de las razones de masas y de concentraciones. El sistema se encuentra en un estado estacionario de no equilibrio caracterizado por un perfil lineal de la componente x de la velocidad a lo largo del eje y ($u_i = a\delta_{ix}y$) y densidad y temperatura constantes (el efecto de calentamiento viscoso es controlado por una fuerza de termostato). Se obtienen expresiones explcitas exactas del tensor de presiones en el caso de molculas de Maxwell. El transporte ms relevante en el problema viene medido por el coeficiente de viscosidad η, cuyo comportamiento en funcin de a se representa para distintos valores de la razn de masas y de concentraciones. Nuestra descripcin extiende resultados previos derivados en el caso de partculas idnticas [1] y en el lmite en que una especie se encuentra en una proporcin mucho menor que la otra [2].

[1] E. Ikenberry and C. Truesdell, *J. Rat. Mech. Anal.* **5**, 1 (1956); C. Truesdell, *J. Rat. Mech. Anal.* **5**, 55 (1956).
[2] V. Garzó and M. López de Haro, *Phys. Rev. A* **44**, 1397 (1991);*Phys. Fluids. A* **5**, 1059 (1993).

C-10

PERMEABILIDAD DINÁMICA PARA UN FLUIDO DE MAXWELL EN UN MEDIO POROSO

M. López de Haro[1], J.A. del Río[1] y S. Whitaker[2]
[1]Laboratorio de Energía Solar, I.I.M.-U.N.A.M.,
Temixco, Mor. 62580 , México
[2]Department of Chemical Engineering, University of California at Davis,
Davis, Ca. U.S.A.

En este trabajo se analiza el flujo de un fluido de Maxwell en un medio poroso rígido utilizando el método del promedio volumétrico. En primer término, se deduce una ecuación promediada local para la conservación de la cantidad de movimiento del fluido en el medio que contiene integrales de las variaciones espaciales de la presión y la velocidad que no son conocidas. A continuación se plantea el problema de cerradura que permite la determinación de dichas variaciones a fin de deducir una ley de Darcy generalizada en el espacio de frecuencias. Considerando que la microestructura del medio poroso se puede modelar como un manojo de tubos capilares, se obtienen resultados analíticos para la permeabilidad dinámica. La comparación con el caso newtoniano indica algunos de los efectos de la viscoelasticidad sobre el comportamiento de esta función de respuesta.

C-11

Analisis de las propiedades de auto-promedio en el transporte de particulas en medios aleatorios

J.M. López*, M.A. Rodriguez**,L. Pesquera*
* Departamento de Física Moderna.Universidad de Cantabria.
**Instituto de Estudios Avanzados en Física y Astronomía. CSIC.
Universidad de Cantabria.

El estudio del transporte de particulas en un medio aleatorio es un campo de gran interés ya que los mecanismos de transporte estan en la base de muchos fenómenos físicos desde la conducción eléctrica hasta las propiedades térmicas en sólidos. En aquellos casos en los que el desorden lleva a un comportamiento anómalo en las propiedades de transporte es de gran interés disponer de un método para estudiar la dependencia de la cantidad medida con respecto a la realización del desorden. Los coeficientes de tranporte no tienen necesariamente la propiedad de auto-promediarse sobre cada realización y los experimentos se realizan usualmente sobre una muestra pequeña.

Nosotros desarrollamos un método para el análisis sistemático de las propiedades de auto-promedio en problemas de transporte a través de medios desordenados, basado en una aproximación de medio efectivo (EMA). Aplicamos el método a dos problemas de transporte muy diferentes: el modelo random-barrier (ejemplo de problema simétrico) y el directed random walk (problema asimétrico). En ellos se estudia que cantidades se auto-promedian y su dependencia con el desorden.

C-12

Propiedades de Transporte en Sólidos Unidimensionales Desordenados

Ricardo Brito

Departamento de Física Aplicada I, Facultad de CC. Físicas
Universidad Complutense, 28040 Madrid

Francisco Domínguez-Adame

Departamento de Física de Materiales, Facultad de CC. Físicas
Universidad Complutense, 28040 Madrid

Angel Sánchez

Escuela Técnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid
C./ Butarque 15, 28911 Leganés, Madrid

Aunque era generalmente aceptado que las cadenas armónicas unidimensionales desordenadas tenían todos sus autoestados localizados, recientemente se han introducido modelos[1] que no cumplen dicha propiedad y que presentan estados extendidos para un conjunto de frecuencias de medida no nula, lo cual modifica notablemente las propiedades de transporte del sistema. En este trabajo, estudiamos en profundidad cadenas unidimensionales en las que se introducen impurezas de manera aleatoria, pero siempre asociadas por pares. Un modelo tan simple ya presenta estados extendidos alrededor de una frecuencia propia determinada por las características de las impurezas pero independiente de su densidad. Cada modo normal de vibración contribuye a la conductividad térmica, pero los modos cercanos a la frecuencia resonante lo hacen de forma máxima, cercana al de una cadena ideal sin impurezas. La conclusión más importante es que la conductividad térmica en cadenas con impurezas asociadas por pares es mayor que en cadenas con impurezas aisladas, y que estas buenas propiedades son ciertas no solo en promedio sobre desorden, sino realización a realización.

[1] F. Domínguez-Adame, E. Maciá, y A. Sánchez, Phys. Rev. B **48**, 6054 (1993).

C-13

EFECTOS HIDRODINAMICOS EN LA ADSORCION DE PARTICULAS PESADAS.

I. Pagonabarraga y J.M. Rubí
Departament de Física Fonamental, Facultat de Física
Universitat de Barcelona
Diagonal 647, 08028 Barcelona, España.

Recientemente ha habido un gran interés en el estudio de la adsorción de partículas en superficies sólidas. Partiendo del trabajo clásico de Langmuir sobre la adsorción de átomos de hidrógeno, el estudio se ha centrado en estos últimos años en el estudio de la adsorción de partículas de mayor tamaño, donde los efectos de superficie excluida son importantes. Hasta ahora, los procesos cinéticos de adsorción han sido descritos mediante la introducción de modelos simplificados que llenan la superficie siguiendo unas reglas geométricas, despreciando el efecto de las interacciones entre las partículas. El modelo de deposición secuencial aleatoria (RSA), pese a su simplicidad, constituye una buena aproximación del proceso de adsorción de partículas Brownianas, mientras que el modelo de deposición balística (BM) ha sido propuesto para estudiar la deposición de partículas coloidales pesadas.

Presentamos un estudio número sobre la deposición de esferas coloidales pesadas en una línea, considerando las interacciones hidrodinámicas entre las partículas que caen hacia la superficie y las preadsorbidas, así como la debida a la superficie. Analizamos su efecto tanto en la cinética de la adsorción, como en la estructura de los agregados que se forman sobre la línea. Comparamos con las predicciones del modelo BM y con experimentos realizados recientemente con partículas de látex,lo que nos permite explicar algunas diferencias entre los experimetos y las predicciones del modelo cinético.

1. I. Pagonabarraga and J.M. Rubí, preprint.
2. P. Wojtaszcyk, P. Schaaf, B. Senger, M. Zembala and J. C. Voegel, J. Chem. Phys **99**, 7198 (1993).
3. J. Talbot and S. Ricci, Phys. Rev. Lett **68**,958 (1992).

C-14

Terremotos lubricados en medios excitables elásticos

E. Hernández-García y O. Piro
Departament de Física, Universitat de les Illes Balears
E-07071 Palma de Mallorca, Spain

Se muestra la equivalencia cualitativa entre el modelo de terremotos de Burridge-Knopoff con una fuerza de fricción asintóticamente viscosa y un modelo del tipo van der Pol-Fitzugh-Nagumo de medios excitables en el que el acoplamiento espacial es de naturaleza elástica antes que difusiva. El caso de una dimensión espacial y condiciones de contorno periódicas es de interés por su posible conexión con experimentos de fricción con geles en geometrías cilíndricas, así como para el estudio de ciertas inestabilidades en procesos de extrusión. Se han identificado tres regímenes espacio-temporales: Cuando el parámetro correspondiente a la velocidad de deslizamiento en el modelo de terremotos es pequeño, domina el comportamiento de propagación de frentes, mientras que cuando es grande, se obtienen oscilaciones uniformes estables. En cierta región de transición, es posible observar regímenes espaciotemporales periódicos pero no uniformes cuyo período temporal es al menos el doble del uniforme. Típicamente estas estructuras estan constituidas por la alternancia de un numero finito de puntos de emisión y aniquilación de frentes contrapropagantes.

C-15

Crecimiento en sistemas de membranas y vesículas

A. M. Somoza y P. Tarazona
Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC y
Departamento de Física de la Materia Condensada
Universidad Autónoma (C-XII),Madrid E-28049,SPAIN

Umberto Marini Bettolo Marconi
Dipartimento di Matemática e Fisica, Università di Camerino,
Via Madonna delle Carceri, I-62032, Camerino, Italia

Cuando se disuelve una pequeña concentración de partículas anfifílicas en agua, estas tienden a aglomerarse formado micelas, vesículas o membranas planas. Las micelas rapidamente alcanzan una configuración cercana al equilibrio, mientras que las vesículas y las membranas continuan absorviendo particulas del medio hasta que este alcanza la concentración de saturación. Nosotros estudiamos la evolución temporal de las distribuciones de tamaños por unidad de volúmen para vesículas esféricas y membranas planas en los límites de tiempos grandes y concentraciones pequeñas. La posible transformación de una membrana plana en una vesícula esférica se incluye en el modelo.

C-16

MODELIZACION DE LAS AVALANCHAS EN TRANSICIONES DE FASE DE PRIMER ORDEN

Eduard Vives, Jürgen Goicoechea, Jordi Ortín y Antoni Planes

Dept. ECM, Facultat de Física, Universitat de Barcelona
Diagonal 647, 08028 Barcelona

La evolución a través de avalanchas entre estados metaestables es común en muchos sistemas que presentan transiciones de fase de primer orden (magnéticas, estructurales, etc ...) en las que las fluctuaciones térmicas no son relevantes. La existencia de desorden intrínseco en el sistema es responsable de este comportamiento. Estos sistemas pueden ser modelizados mediante hamiltonianos del tipo modelo de Ising con campos o interacciones aleatorias como se ha puesto de manifiesto muy recientemente (1,2). Para distintos modelos se ha estudiado la distribución de avalanchas en función del grado de desorden introducido. Se ha puesto de manifiesto la existencia de una transición de fase entre un comportamiento con avalanchas de pequeñas dimensiones y un comportamiento con avalancha percolante. La transición se ha caracterizado por exponentes que tienen propiedades universales. Los resultados se comparan cualitativamente con experimentos.

(1) J.P.Sethna, K.Dahmen, S.Kartha, J.A.Krumhansl, B.W.Roberts and J.D.Shore, Phys. Rev. Lett. **70**, 3347 (1993).

(2) E.Vives and A.Planes, Phys. Rev. B. Aceptado (1994).

C-17

A Proposed Test of the Unified Charge Density Wave Model

Pere Colet* and Kurt Wiesenfeld
School of Physics, Georgia Institute of Technology,
Atlanta, Ga, 30332-0430

Over the years, the study of charge-density waves (CDWs) has uncovered a number of interesting nonlinear dynamical effects. The most recent models of CDWs involve many degrees of freedom and several free parameters. While theories have tended to focus on the current associated with the CDW condensate itself, experiments inevitably measure the total current. As a result, detailed comparison between theoretical models and real experiments has been scant.

Recently, Levy et al (1) proposed a model which explicitly includes the contribution of the normal carriers, allowing in principle direct experimental tests. The purpose of the present work is to lay the theoretical groundwork to make such tests practical. Specifically, we show how to determine the model parameters based on two common measurements, namely the dc I-V characteristic and the ac-conductivity curve. We also show that these measurements are enough to test the self-consistency of the model, the first time such a test has been possible.

* Permanent Address: Departament de Física,
Universitat de les Illes Balears, 07071 Palma de Mallorca, Spain

(2) Jeremy Levy, Mark S. Sherwin, Farid F. Abraham and Kurt Wiesenfeld, Phys. Rev. Lett. **68**, 2968 (1992).

C-18

GASES DE LORENTZ RETICULARES CON DISPERSORES NO IDÉNTICOS

L. Acedo y A. Santos
Departamento de Física, Universidad de Extremadura,
06071 Badajoz

Se evalúa el coeficiente de difusión mediante simulaciones de Monte Carlo en el límite de baja concentración de dispersores. Se consideran dos tipos de modelos: (a) rotores estocásticos derechos e izquierdos junto con reflectores puros y (b) espejos estocásticos derechos e izquierdos junto con reflectores puros. Los datos de simulación [1] son comparados con la aproximación de anillo repetido (RRA) [2]. El acuerdo es excelente cuando la fracción x_B de reflectores puros tiende a 0. A medida que x_B aumenta, el coeficiente de difusión disminuye y se anula para el valor crítico $x_B^c \simeq 0.8$ (umbral de percolación) con un exponente crítico $\mu \simeq 2$ (modelos estocásticos) o $\mu \simeq 3$ (modelo de rotores deterministas).

[1] L. Acedo and A. Santos, *Diffusion in lattice Lorentz gases with mixtures of point scatterers*, Phys. Rev. E, enviado.
[2] A. J. H. Ossendrijver, A. Santos, and M. H. Ernst, J. Stat. Phys. **71**, 1015 (1993).

C-19

Avalanchas y Modos Propagantes en un Modelo de Burridge-Knoproff

Pep Español
Cavendish Laboratory
University of Cambridge
Cambridge CB3 OHE,UK

C-20

Turbulence in Reaction-Diffusion Chemical Fronts

Agustí Careta(*) and Raymond Kapral
Chemical Physics Theory Group, Department of Chemistry,
University of Toronto, Toronto, ON M5S 1A1, Canada
(*) Permanent address: Departament de Química Física,
Universitat de Barcelona, Diagonal 647,
08028-Barcelona, Spain

June 21, 1994

Abstract

Statistical properties of the pattern formation process in propagating reaction-diffusion chemical systems are studied for the case of cubic autocatalysis. In 2-D geometries, the otherwise stable planar fronts become unstable when the ratio of the diffusion coefficients of the chemical species is sufficiently different from unity. The relevant parameters are the system width, the initial seeding probability of the locally perturbed regions and the ratio of diffusion coefficients. Special attention is paid to the characterization of the statistically stationary regime in terms of various one-point correlation functions. The presence of a well-defined intrinsic wave-number dominates the dynamics giving rise to a "comb-like" evolving structure that partially hides the underlying diffusive motion of the interfacial profile. In turn, it allows for a much simpler description based on discrete particles that are created and annihilated randomly. Comparisons with Langevin and master equations are given. Finally, the onset of spatio-temporal intermittency is observed to appear far above the instability threshold.

C-21

Transiciones de Layering en Cristales Liquidos

L. Mederos[1], A. Somoza[1] y D. E. Sullivan[2]
[1]Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC,
Universidad Autonoma (C-XII), Madrid E-28049,Spain
[2]Department of Physics, University of Guelph,
Guelph, Ontario, N1G 2W1, Canada

June 22, 1994

Abstract

Se presenta una teoria basada en el funcional de la densidad para la interfase entre un cristal liquido y una pared. La teoria predice una transicion de wetting por smectico A de primer orden acompanada de una transicion de pre-wetting. Los regimenes de wetting incompleto y completo estan acompanados por una serie finita e infinita (respectivamente) de transiciones de layering. El mecanismo de estas transiciones muestra que el layering puede desaparcer tanto cerca como lejos del punto triple isotropo-nematico-smectico A.

PANELES

P-1

Simulación del transporte de carga en polímeros moleculares dopados: el efecto del desorden energético en la velocidad de los portadores

José Manuel Casado y José Jorge Mejías
Departamento de Física Atómica,Molecular y Nuclear
Universidad de Sevilla

Se acepta de forma general que el transporte de carga en polímeros moleculares amorfos se realiza mediante un mecanismo de hopping entre estados localizados de moléculas donadoras y aceptoras adyacentes. Hemos realizado una simulación por ordenador de las propiedades de transporte de carga en este tipo de materiales. Dicha simulación describe a un sistema sometido a un campo eléctrico externo y en el que además hay presente una cierta cantidad de desorden energético. Los resultados obtenidos para la velocidad de los portadores, definida como el cociente entre la longitud de la muestra y el tiempo medio de vuelo, indican que a campos suficientemente altos no es el caso ordenado donde los portadores alcanzan su máxima velocidad, sino que esto ocurre cuando hay una cierta cantidad de desorden presente. Estudios sobre la distribución de saltos en las tres direcciones espaciales indican que la introducción de desorden induce en el sistema una cierta asimetría en la que se ven favorecidos los saltos paralelos a la dirección del campo aplicado. Se presentarán resultados obtenidos para la velocidad en función de la cantidad de desorden a diversos campos as como las propias distribuciones de saltos.

P-2

Funciones zeta y algunas aplicaciones físicas

E. ELIZALDE

C.E.A.B., C.S.I.C., Camino de Santa Bárbara, 17300 Blanes
y Departamento E.C.M. e I.F.A.E., Universidad de Barcelona
Diagonal 647, 08028 Barcelona

Resumen

Se deducen unas cuantas fórmulas —de indudable interés teórico y práctico— para el cálculo de energias, potenciales efectivos y funciones de partición, que aparecen en diversos problemas de la física cuántica y cuyo cálculo (incluso el perturbativo) resulta extremadamente complicado —por no decir inabordable por completo, hasta la fecha, en algunos casos.

Se empieza situando el problema matemático como un procedimiento sencillo y elegante de sumación de series no convergentes (por prolongación analítica en el plano complejo) y, después de dar algunos resultados básicos —como una extensión nada trivial de la fórmula de Chowla-Selberg y diversas expresiones para la sumación de series de tipo Epstein-Hurwitz generalizadas— se termina con algunas aplicaciones físicas de los resultados obtenidos a problemas estadístico-cuánticos y de la física experimental.

Bibliografía

1. E. Elizalde, *Analysis of an inhomogeneous generalized Epstein-Hurwitz zeta function with physical applications*, preprint U. Barcelona (febrero, 1994).
2. E. Elizalde et al., *Zeta Regularization Techniques with Applications* (World Sci., Singapore, 1994).
3. M. Krech, *The Casimir Effect in Critical Systems*, Habilitationschrift, Wuppertal (1993).
4. K. Kirsten, *Effektive Wirkungen*, Dissertation, Kaiserslautern (1992).

P-3

Determinación de la dimensión y signatura del espacio-tiempo por minimizaciones sobre la función de partición

E. ELIZALDE[1,2], S.D. ODINTSOV[2] y A. ROMEO

[1]C.E.A.B., C.S.I.C., Camino de Santa Bárbara, 17300 Blanes
[2]Departamento E.C.M. e I.F.A.E., Universidad de Barcelona
Diagonal 647, 08028 Barcelona

Resumen

Preguntas sobre el espacio-tiempo tan fundamentales como ¿por qué su dimensión es 4? o ¿por qué es minkowskiano? (es decir, su signatura métrica es (-1,1,1,1)) pueden ser investigadas de manera clara a través de modelos relativamente sencillos de la teoría cuántica de campos y usando ideas básicas de minimización de algunas magnitudes que se obtienen directamente a partir de la función de partición y del *heat-kernel* (como el potencial efectivo y la densidad de energía del vacío).

En particular, resulta posible demostrar —cunado menos para el caso del campo escalar— que se obtiene una estabilización de la densidad de energía del vacío en torno a la dimensión espacio-temporal igual a 4 y ello para diversas configuraciones de universo (entre ellas las de *universo sin fronteras*, de tipo esfera de Riemann o cilíndrico, tan de moda actualmente), lo que indica a su vez una estabilidad de dicha condición sobre diversas geometrías posibles del espacio-tiempo.

Por otro lado, usando el formalismo de Greensite et al. para el tratamiento de la signatura del espacio-tiempo como un grado de libertad dinámico, se llega a una prueba (dentro de dicho formalismo) de por qué nuestro universo es minkowskiano. Hemos demostrado además que no puede descartarse en este esquema la posible existencia de una fase previa en la que el universo hubiese sido de tipo Kaluza-Klein, en particular de dimensión 5, aunque igualmente con signatura lorentziana.

Bibliografía

1. E. Elizalde, *The vacuum energy density for spherical and cylindrical universes*, J. Math. Phys., en prensa (1994).
2. E. Elizalde, S.D. Odintsov and A. Romeo, *Dynamical determination of the metric signature in spacetimes of nontrivial topology*, Class. Quantum Grav. **11**, L61 (1994).
3. J. Greensite, Phys. Lett. **900B**, 34 (1993).
4. A. Carlini and J. Greensite, NBI preprint NBI-HE-93-37 (1993).

P-4

AMPLIFICACION RESONANTE DE UNA SEÑAL RECTANGULAR POR UN SISTEMA BIESTABLE CON RUIDO

José Gómez Ordóñez y Manuel Morillo Buzón
Universidad de Sevilla.Facultad de Física.Física Teórica
Apdo. Correos 1065.Sevilla 41080

Se estudia analtica y numéricamente la respuesta dinámica de un sistema biestable simétrico sometido a la acción de un ruido blanco de intensidad D y una fuerza extena que depende periódicamente del tiempo. La linealidad de la ecuación de Fokker-Planck que describe el proceso permite combinar el teorema de Floquet con el teorema H, a fin de asegurar el carácter periódico de la respuesta del sistema para tiempos largos. Para campos externos de amplitud S pequeña, ruidos tales que S≫D y frecuencias no muy bajas, la teoría de la respuesta lineal (TRL) suministra el aparato teórico adecuado para describir el fenómeno de renonancia estocástica. Para una señal rectangular, la amplificación conlleva una distorción de la forma debido al carácter dispersivo de la respuesta. Para valores de la frecuencia externa muy bajos, tales que la TRL no es válida, el fenómeno de resonancia estocstica se manifiesta a través de una gran amplificación de la débil señal de entrada manteniendo su forma. Estos fenómenos dan muestra del carácter "ordenador" que puede tener el ruido al combinarse con la no linealidad del sistema y con una acción externa dependiente del tiempo.

P-5

TUNELADO EN SISTEMAS DISIPATIVOS SOMETIDOS A CAMPOS EXTERNOS DEPENDIENTES DEL TIEMPO

Manuel Morillo Buzón[1] y Robert I. Cukier[2]
[1]Universidad de Sevilla.Facultad de Física
Física Teórica.Apdo. Correos 1065.Sevilla 41080
[2]Department of Chemistry
Michigan State University.East Lansing. MI 48824.USA

A partir de la descripción hamiltoniana de un sistema cuántico de dos estados en contacto con un foco térmico (también cuántico) y sometido a la acción de un campo externo que en general varía con el tiempo, y usando las técnicas de proyectores de Zwanzig, se obtienen las ecuaciones cinéticas para el operador densidad reducida del sistema. Estas ecuaciones permiten describir la dinámica a bajas temperaturas en casos en que el desdoblamiento por tunelado del sistema de dos estados es muy pequeo, y para acoplos sistema-foco que no tienen por que ser débiles. Se analizan las modificaciones en el fenómeno de tunelado entre estados localizados del sistema cuántico debidas al efecto combinado de la interacción con el bao térmico y de un campo externo que varía con el tiempo, tanto para temperaturas bajas como para temperaturas altas en que una descripcin estocástica del bao resulta adecuada. El control del tunelado mediante campos externos(y por tanto de la cinética del proceso) abre nuevas perspectivas en el estudio de las reacciones de transferencia de cargas en medios condensados o en el movimiento de defectos en sólidos.

P-6

MULTIPLICIDAD Y OSCILACIONES EN UN MODELO DE REACCION SUPERFICIAL

M.C.Lemos,J.J. Luque y F.Jiménez-Morales
Departamento de Física de la Materia Condensada
P.B. 1065, 41080-Sevilla, España

Multiplicidad de estados estacionarios estables y oscilaciones de concentraciones y temperatura son fenómenos observados en reacciones catalizadas sobre una superficie. Presentamos un modelo cinético basado en la reacción del monóxido de carbono (CO) y del oxígeno (O) sobre una superficie catalítica al objeto de explicar algunas transiciones de fase cinéticas que ocurren en esta reacción. Las ecuaciones cinéticas para las densidades de monómeros n_{CO} y n_O y las de parejas n_{CO-CO}, n_{CO-O} y n_{O-O} se formulan a partir de una aproximación de dobletes y se completan con una ecuación para la temperatura de la superficie con el fin de analizar especialmente el comportamiento oscilatorio del sistema. Se encuentran transiciones de fase cinéticas del tipo: a) 1 sólo estado estacionario estable (1*eee*) $\Longleftrightarrow$ 2 estados estacionarios estables (2*eee*), b) 1*eee* $\Longleftrightarrow$ 1 estado estacionario y 1 estado oscilatorio, ambos estables (1*eee* y 1*eoe*) y c) 2*eee* $\Longleftrightarrow$ 1*eee* y 1*eoe*, dependiendo del calor de reacción y de la velocidad de relajación de la temperatura de la superficie.

P-7

Autoorganización en Autómatas Celulares Probabilisticos

J. J. Luque, F. Jiménez-Morales, M. C. Lemos
Departamento de Física de la Materia Condensada
Apartado 1065, 41080-Sevilla, Spain

Hemos estudiado un autómata celular con dos estados (activo e inactivo) por sitios y un comportamiento probabilístico para la transición. Con la regla de evolución seleccionada el autómata tiene dos fases absorbentes y se ha introducido un factor probabilístico de reanimación que lo extraiga de esos estados. Siendo la interacción local un factor importante en el cambio de estado de una celda, la regla de evolución está definida en función del número de celdas activas que cada una tiene a su alrededor. Se ha observado que la forma en que estas celdas están distribuidas juegan un papel determinante en el valor estacionario de la concentración de celdas activas. El comportamiento estacionario del sistema ha sido estudiado modificando el valor de los parámetros probabilísticos elegidos, observando que sufre una series de transiciones cinéticas de fase de primer y segundo orden. El efecto de la elección de la vecindad (una seleccionada sobre sitios fijos de la red y otra totalmente aleatoria) y la dimensionalidad de la red (dimensión 2, 3 y 4) han sido analizadas.

P-8

Convección estocástica inducida por aceleraciones residuales en entornos de microgravedad

Jaume Casademunt
Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria
Universitat de Barcelona, Av. Diagonal, 647, E-08028-Barcelona
J. Ross Thomson y Jorge Viñals
Supercomputer Computations Research Institute
Florida State University, Tallahassee, FL 32306, USA

Hemos estudiado la convección inducida por una aceleración fluctuante en una cavidad bidimensional en presencia de un gradiente térmico transversal, como modelo de una celda de solidificación direccional sometida a aceleraciones residuales (*g-jitter*) tales como las presentes en entornos típicos de microgravedad. El modelo asume una gravedad efectiva estocástica de media nula y con un espectro de banda estrecha, caracterizado por una frecuencia dominante Ω, un tiempo de correlación τ y una intensidad G^2, y predice un comportamiento de las propiedades estadísticas del campo de velocidades en excelente acuerdo con la simulación numérica de las ecuaciones hidrodinámicas exactas. La vorticidad cuadrática media $\langle \xi^2 \rangle$ exhibe básicamente dos regímenes. Para $t \ll \tau$, $\langle \xi^2 \rangle$ oscila con frecuencia Ω. Para $t \gg \tau$, $\langle \xi^2 \rangle$ crece linealmente con t con una amplitud igual a $\mathrm{R}^2\mathrm{Pr}/\left(1+(\Omega\tau)\right)^2$, donde R y Pr son los números de Rayleigh y Prandtl respectivamente. A tiempos aun mayores, una estimación de efectos viscosos en las paredes predice la saturación a un valor de $\langle \xi^2 \rangle_{sat} = \frac{(\mathrm{Pr}\tau+1)\mathrm{R}^2}{(\mathrm{Pr}\tau+1)^2+\Omega^2\tau^2}$.

P-9

Propiedades estáticas y dinámicas del litio líquido.

D.J. González and L.E. González
Departamento de Física Teórica. Universidad de Valladolid.
47011 Valladolid. Spain.
K. Hoshino
Faculty of Integrated Arts and Sciences. Hiroshima University. Japón.

Se presentan cálculos teóricos de la dependencia con la temperatura de las propiedades estáticas y dinámicas del litio líquido. El método está basado en el modelo del pseudoátomo neutro (1) para calcular la densidad electrónica de apantallamiento alrededor de un Li^+ así como el potencial interatómico efectivo. Las propiedades estáticas se calculan mediante la teoría VMHNC (2) para sistemas líquidos, y a continuación la estructura dinámica se obtiene en el contexto de la aproximación viscoelástica (3). Los resultados obtenidos se comparan con los correspondientes resultados experimentales y de simulación.

(1) L.E. Gonzalez, D.J. Gonzalez, M. Silbert and J.A. Alonso, J. Phys: Condens. Matter **5** 4283 (1993).

(2) L.E. Gonzalez, D.J. Gonzalez and M. Silbert, Phys. Rev. A **45**, 3803 (1992).

(3) S.W. Lovesey, J. Phys. C: Solid State Phys. **4** 3057 (1971).

P-10

Estructura y ordenamiento de las aleaciones líquidas LiNa y LiMg

L.E. González and D.J. González
Departamento de Física Teórica. Universidad de Valladolid.
47011 Valladolid
M. Silbert
School of Physics. University of East Anglia.UK

Se presentan cálculos teóricos de la dependencia con la concentración de la estructura y propiedades de ordenamiento de las aleaciones líquidas Li_xNa_{1-x} y Li_xMg_{1-x}. Los potenciales interatómicos efectivos fueron calculados extendiendo el modelo del pseudoátomo neutro (1) al caso de sistemas binarios. Para el cálculo de las propiedades de los sistemas hemos utilizado las teorías VMHNC (2) y MHNC-REP (3). Los resultados se comparan con los correspondientes datos experimentales.

1. L.E. Gonzalez, D.J. Gonzalez, M. Silbert and J.A. Alonso, J. Phys: Condens. Matter **5** 4283 (1993)

2. L.E. Gonzalez, D.J. Gonzalez and M. Silbert, Phys. Rev. A **45**, 3803 (1992)

3. H. Mori, K. Hoshino and M. Watabe, J. Phys: Condens. Matter **3** 9791 (1991)

P-11

Sistema de levitación magnética para medidas de tensiones normales

Isabel Echeverría y Miguel A. Rubio

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

Presentamos un dispositivo de levitación magnética con retroalimentación electroóptica, que permite estabilizar con gran precisión la posición vertical de la pieza levitante (PL). El dispositivo ha sido diseñado para sostener e l rotor de un reómetro de torsión sin contactos mecánicos, capaz de medir tensiones normales con gran precisión.

La fuerza que sostiene a la PL está producida por un electroimán pilotado por una fuente de alimentación controlable. La detección de la posición vertical de la PL se realiza mediante un haz de luz laser que incide sobre un espejo colo cado en la parte superior de la PL. El haz reflejado incide luego sobre un fotodetector sensible a la posición, que, junto con circuitería electrónica desarrollada específicamente para este sistema, transforma la información sobre posición en señal eléctrica. Esta señal proporciona la entrada para un controlador PID, cuya salida pilota la fuente de alimentación del electroimán. En esta configuración, la estabilización de la posición vertical de la PL presenta un valor del ruido r.m.s. menor que 1 μm. La repetitividad de esta posición está limitada sólo por este valor del ruido.

Además, la corriente que circula por el electroimán, proporciona una medida precisa de la fuerza vertical ejercida sobre la PL. Esta característica será utilizada para medir la primera diferencia de tensiones normales. La resolución de l dispositivo en la medida de la fuerza vertical es del orden de 10^{-3} N.

Este trabajo ha sido financiado por los proyectos DGICYT-PB89/0196 y CAM-C085/90.

P-12

Dinámica stick-slip de las relajaciones en un gel: Influencia de la velocidad de cizalla

Javier Galeano[a,b] y Miguel A. Rubio[a]

[a] *Dpto. de Física Fundamental, U.N.E.D.*
[b] *Dpto. de Ciencia Aplicada a la Ing. Téc. Agrícola, U.P.M.*

Presentamos resultados experimentales en un sistema elástico continuo con comportamiento stick-slip en la frontera. El sistema experimental esta formado por un gel situado en una cavidad entre dos cilindros coaxiales, donde el cilindro interior gira muy lentamente y el cilindro exterior se mantiene fijo. El campo de tensiones que aparece en el gel se estudia localmente por técnicas fotoelásticas.

Los tipos de regímenes experimentales observados, deslizamiento constante, relajaciones globales y de tipo kink propagante, son similares a las soluciones analíticas de un modelo de bloques y muelles introducido por Burridge y Knopoff como modelo de sismicidad[1]. Se observa, también, un cuarto régimen complejo con distribuciones de probabilidad anchas para las amplitudes y los intervalos entre relajaciones. En este último régimen las estadísticas de las duraciones de los eventos y el tiempo transcurrido entre dos eventos consecutivos resultan ser exponenciales. Por último, realizamos un estudio sobre la variación de las distribuciones cambiando la velocidad de rotación del cilindro interior para un mismo gel, obteniendo que las distribuciones para las duraciones de relajación del gel no varían significativamente con la velocidad del tambor, mientras que las estadísticas de los tiempos entre eventos indican una tendencia del sistema hacia intervalos más regulares según se aumenta la velocidad del cilindro interior.

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

Este trabajo ha sido financiado parcialmente por DGICYT-PB89/0196 y CAM-C085/90.

P-13

Nuevas relaciones exactas para la funcion de distribucion de dos cavidades

C. Rascón, L. Mederos y G. Navascués
Instituto de Ciencia de Materiales
(Consejo Superior de Investigaciones Científicas)
y Departamento de Física de la Materia Condensada,
Universidad Autónoma, Madrid E-28049

Hemos encontrado nuevas relaciones exactas para la funcion de distribucion de dos cavidades en un sistema uniforme. Los valores de varias derivadas cuando las cavidades colapsan vienen dados por valores de la funcion y derivadas de orden menor. Asi mismo estudiamos la justificacion de la parametrizacion de Henderson de la funcion de distribucion de dos cavidades.

P-14

Extinción Inestacionaria de Llamas de Premezcla

P.L. García Ybarra, J.C. Antoranz y J. Medina
L.C.D.I.
Depto. Física Fundamental, U.N.E.D.
Apdo. 60.141, 28080-Madrid

Junio, 1994

La propagación estacionaria de llamas de premezcla sujetas a pérdidas térmicas es un problema clásico estudiado por diferentes autores. Mediante el uso de expansiones asintóticas en el inverso de la energía de activación, se o btiene como resultado general que la velocidad de propagación es una función bivaluada de las pérdidas térmicas. Para un valor crítico de dichas pérdidas no existe solución estacionaria en forma de frente de llama. Sin embargo , el estudio de la extinción inestacionaria de las llamas de premezcla no ha focalizado tanta atención, a pesar de su mayor interés práctico. En este trabajo, se ha formulado el problema en términos de un desarrollo asintótico de l a energía de activación y se ha construido un método numérico explícito para resolver el orden dominante de esta expansión, donde se ha remplazado la zona de reacción química por condiciones de salto para los perfiles de te mperatura y concentración, evitando la integración numérica de la zona de reacción[1]. Paralelamente, se está construyendo un dispositivo experimental que permita comparar las predicciones teóricas con datos experimentales, respe cto a la velocidad de propagación y la distancia de máximo acercamiento llama-pared.

(1) J.C. Antoranz y P.L. García Ybarra, *Asymptotic Analysis of the Unsteady Head-on Quenching of a Premixed Flame*, The Combustion Institute. Joint Meeting of the Italian and Spanish Sections. CittàStudi Edizioni, Milano, 1993, páginas VIII-3.1-VIII-3.4.

P-15

Transiciones de *roughening* en modelos de crecimiento de superficies fuera del equilibrio.

Angel Sánchez,† David Cai, Niels Grønbech-Jensen, y Alan R. Bishop

Theoretical Division and Center for Nonlinear Studies,
Los Alamos National Laboratory,
Los Alamos, New Mexico 87545, Estados Unidos de América,

†*Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid,*
C./ Butarque 15, E-28911 Leganés, Madrid

Estudiamos un modelo modelo *solid-on-solid* dinámico análogo a una ecuación discreta de sine-Gordon bidimensional forzada y amortiguada usando un procedimiento de dinámica molecular de Langevin implementado en un código eficiente que permite simulaciones de retículos grandes hasta tiempos muy largos sin recurrir a superordenadores. La pregunta principal que nos hemos planteado es cómo cambia la transición de *roughening* (de tipo Kosterlitz-Thouless) cuando la superficie está en estado estacionario de no equilibrio. El contexto físico correspondiente es, por ejemplo, crecimiento de materiales bajo subenfriado. Hemos identificado los parámetros relevantes que nos permiten localizar la región de transición en el régimen de no equilibrio. Nuestras simulaciones y consideraciones teóricas basadas en grupo de renormalización muestran que la fuerza externa da lugar a un desdoblamiento de la transición de *roughening* en dos *crossovers* dinámicos con cambio de simetría (o transiciones). Caracterizamos estos efectos dinámicos mediante el paso de crecimiento no lineal a lineal, la dependencia de la rugosidad con la temperatura, y el cambio en el comportamiento de *scaling* de la correlación altura-altura. Las simulaciones y el análisis teórico indican que ambos *crossovers* dinámicos pueden seguir siendo de tipo Kosterlitz-Thouless.

P-16

MOVIMIENTO DE DEFECTOS EN CONVECCION CON ROTACION

J. Millán-Rodríguez y C. Pérez-García

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

Presentamos la simulación numérica de las ecuaciones hidrodinámicas, en la aproximación de Boussinesq, que describen la convección en una capa de fluido sometida a rotación para el caso de que el número de Prandtl sea muy grande y para sistemas espacialmente extendidos.

Describimos el importante papel del movimiento de defectos en la dinámica de la estructura (movimientos de deslizamiento y desplazamiento, aniquilación de defectos, efectos de interacción con la estructura a pequeescala, reorientación de la estructura,...) cuando imponemos una velocidad de rotación pequeal sistema.

P-17

Caracterización de defectos en convección de Bénard-Marangoni, bajo calentamiento uni-dimensional.

Diego Maza Ozcoidi * , Javier Burguete, Héctor Mancini y Carlos Pérez-García

Departamento de Física y Matemática Aplicada

Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra

31080 Pamplona, Navarra, Espana

** además en Universidad Nacional de San Luis ,Chacabuco y Pedernera*

5700 San Luis Argentina .

La dinámica asociada a estructuras dependientes del tiempo en convección, ha sido ampliamente estudiada en anos recientes. Estos estudios han puesto de manifiesto la importancia que tienen los defectos en la estabilidad de de los patrones espacio-temporales que aparecen. Especial atención se ha dedicado a estructuras como las fuentes y sumideros en convección de Bénard-Marangoni, cuando esta aparece como consecuencia de un calentamiento uni-dimensional. En el presente trabajo se muestran las observaciones experimentales de este tipo de defectos, y se los caracteriza relacionando la variable espacial con el tiempo. Se presenta además la aparición de defectos no asociados a fuentes o sumideros, cuya naturaleza esta asociada a una inestabilidad tipo Eckhaus.

P-18

Análisis experimental de un oscilador de Bénard-Marangoni

Diego Maza Ozcoidi, Héctor Mancini y
Carlos Pérez-García
Departamento de Física y Matemática Aplicada
Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra
31080 Pamplona, Navarra, Espana
además en Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pederner a
5700 San Luis Argentina .

Este trabajo muestra el comportamiento dependiente del tiempo en una experiencia de convección de Bénard-Marangoni, con calentamiento inhomogeneo. Por encima de cierto valor crítico del parametro de control, se ponen de manifiesto oscilaciones en la celda central de la estructura convectiva, que son acompanadas por oscilaciones de la temperatura en la superficie y el interior del fluido, y en la curvatura de la superficie. Se muestra aqui como depende la frecuencia de esta oscilación, medida de los registros de temperatura, al aumentar el número de Rayleigh. Esta oscilacion es generada en la capa límite, y confirman resultados obtenidos en experiencias anterirores sin tensión superficial, tipo Bénard-Rayleigh.

P-19

Espectro electrónico y entropía de la información en sistemas cuasiperiódicos.

E. Maciá[1], F. Domínguez-Adame[1], y A. Sánchez[2]
[1]Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense, 28040 Madrid
[2]Escuela Politécnica Superior, Universidad Carlos III de Madrid,
C./ Butarque, 15, 28911 Leganés, Madrid

En este trabajo investigamos la relación entre la estructura del espectro electrónico de sistemas cuasiperiódicos y su orden configuracional asociado. Nuestro estudio se centra en la secuencia de Fibonacci debido a sus muchas aplicaciones, pero las ideas generales introducidas pueden generalizarse fácilmente para describir el espectro electrónico de otros sistemas cuasiperiódicos de interés tecnológico. Nuestro principal resultado consiste en demostrar que el espectro energético de sistemas cuasiperiódicos se fragmenta de acuerdo con un patrón autosemejante que *minimiza* la entropía de la información del sistema. Esta propiedad se halla asociada al hecho de que los sistemas cuasiperiódicos son capaces de almacenar *más información*, en el sentido de Shannon, que los sistemas periódicos. Tal resultado tiene importantes repercusiones al relacionar la noción de *orden cuasiperiódico* con sus posibles implicaciones en las propiedades de transporte de dispositivos basados en dicho tipo de ordenamiento [1].

[1] E. Maciá, F. Domínguez-Adame y A. Sánchez, Phys. Rev. B **49**, 9503 (1994).

P-20

Modelo unidimensional para una celda convectiva

Ana M. Mancho Sánchez y Carlos Pérez-García

Departamento de Física y Matemática Aplicada

Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra

31080 Pamplona, Navarra, Spain

Para el experimento descrito en [1], en el que aparecen estructuras convectivas espacio-temporales, se han propuesto unas ecuaciones en forma normal. Este modelo es válido en torno a un punto de codimensión dos en torno al cual crecen los modos $e^{i(kx+\omega t)}$, $e^{i(kx-\omega t)}$ y $e^{i2kx)}$. Las ecuaciones de los modos se inducen imponiendo su invariancia ante translaciones espaciales y temporales y por paridad. Modelos similares a este, en otro tipo de bifurcaciones, se encuentran en las referencias [2-3]. Se estudian las regiones de estabilidad de las formas normales y se obtienen los diagramas de bifurcación, para diferentes valores de los parámetros ε, μ,que se relacionan con los experimentales ΔT y h. Una simulación de las ecuaciones en torno a los puntos fijos estables proporcionan figuras parecidas a las que se obtienen en la celda convectiva [4].

(1) J. Burguete, H.L. Mancini and C. Pérez-García, *.Europhys. Lett.*, **23**, p.401,(1993).

(2) M.R.E. Proctor y Jones, *J. Fluid Mech.* , **188**, p.301,(1988).

(3) E. Knobloch y M.R.E. Proctor, *Proc. R. Soc. London* , **A 415**, p.61,(1988).

(4) A.M. Mancho Sánchez, *Trabajo de Investigación* , Universidad de Navarra (1994)

P-21

UN MODELO DE PARED, DESCRITO MEDIANTE UNA ECUACIÓN DE LANGEVIN GENERALIZADA, ÚTIL EN SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR.

R.Delgado-Buscalioni, J.E.Alvarellos, I.Zúñiga

Departamento de Física Fundamental, U.N.E.D., Apto. 60141,

28080 Madrid, España

Abstract

Se presenta un nuevo modelo de pared basado en el formalismo de la Ecuación de Langevin Generalizada (G.L.E.) [1], y con interacción superficial tipo Lennard-Jones. El modelo se utiliza en el estudio de las condiciones de contorno de un gas encerrado en una cavidad bidimensional en equilibrio térmico y mecánico.

El modelo G.L.E. de pared simula el comportamiento de la red del sólido reproduciendo su espectro de fonones. Asimismo, el modelo, permite el intercambio de momento y energía entre el gas y la pared.

Las ventajas frente a otro tipo de pared son múltiples. En primer lugar, el costo en tiempo de CPU y memoria se reducen considerablemente frente a modelos similares que utilizan varias capas de moléculas de pared para simular la estructrua cristalina del sólido [2]. Por otra parte, no se introducen hipótesis *ad hoc* (salvo en el tipo de potencial) sobre la forma de interacción entre partículas de pared y gas (*v.g.* thermal wall [3], reflecting wall [4]); de este modo se pretende que la información macroscópica que se extraiga del sistema sea lo más realista posible. Por último la introducción de gradientes térmicos en la pared es inmediata.

1. Tully *et al.*, J.C.P. **66** (1977) 2534, Tully, J.C.P. **73** (1980) 1975.
2. M. Sun and C. Ebner Phys. Rev. Lett. **69**, 24 (1992).
3. A. W. Lees, S.F. Edwards, J.Phys . **5**,1921 (1972)
4. A. Tennembaum, G. Ciccotti and G. Gallico, Phys Rev. A **25**,2778 (1982); C. Trozzi and G. Ciccotti,*ibid* **29**, 916 (1984)

P-22

Estadística de tiempos de paso en un laser semiconductor con feedback y señal inyectada

Jaume Dellunde y José María Sancho
Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria,
Universitat de Barcelona, Diagonal 647, E-08028, Barcelona
Maria del Carme Torrent
Departament de Física i Enginyeria Nuclear, EUETIT, Universitat
Politècnica de Catalunya, Colom 1, E-08222, Terrassa
Claudio R. Mirasso y Emilio Hernández-García
Departament de Física, Universitat de les Illes Balears, E-07071
Palma de Mallorca.

Hemos estudiado la estadística de tiempos de encendido en un laser semiconductor sometido a feedback óptico y a una fuente coherente de luz externa. En el caso del encendido del laser semiconductor sometido solamente a una señal externa, se produce una reducción del tiempo de paso y de su varianza cuando las dos fuentes de luz tienen frecuencias muy parecidas [1]. Esta reducción es de importancia en la detección de señales ópticas débiles y en la generación de pulsos de luz para comunicaciones ópticas.

Para señales externas no sintonizadas hemos observado que también se puede conseguir una reduccion del tiempo de paso y de su varianza permitiendo una reinyección de luz del propio laser (feedback). Este efecto se debe a la variación dinámica de la frecuencia que produce la reinyección de luz durante el encendido [2].

[1] M.C. Torrent et al., Phys. Rev. A **47**, 3390-3395, (1993)
[2] H. Olesen et al., IEEE J.Quantum Electron. **QE22**, 762-773, (1986)

P-23

Dinámica producida por una inestabilidad secundaria creada por un calentamiento localizado en convección Rayleigh-Bénard

Javier Burguete, Diego Maza Ozcoidi,
Héctor Mancini y Carlos Pérez-García
Departamento de Física y Matemática Aplicada
Facultad de Ciencias, Universidad de Navarra
31080 Pamplona, Navarra, Spain

Se ha estudiado experimentalmente la dinámica de una inestabilidad secundaria que aparece a lo largo de un calentamiento localizado en una convección de Bénard-Marangoni con fluido puro. Las características principales de este experimento así como experimentos similares se pueden encontrar en [1-3] Esta inestabilidad crea una estructura de lineas brillantes perpendiculares al calefactor, presentando una dinámica que varía según los valores de los parámetros convectivos. Se pueden distinguir cuatro zonas en el espacio de los parámetros: estructura estacionaria, oscilaciones en contrafase, ondas viajeras, o alternancia entre las líneas brillantes de la estructura. La frecuencia medida experimentalmente bifurca del cero a un valor finito para un valor umbral de los parámetros bien definido, teniendo después un crecimiento exponencial con la distancia de ese umbral. Asimismo se ha medido la longitud de onda adimensional de la estructura, encont r andose que incluso para valores elevados de los parámetros permanece constante alred e dor de $\lambda = 2.2$.
(1) M. Vince and M. Dubois, *Europhys. Lett.*, **20**, p.505,(1 9 92).
(2) W. Kayser and J. Berg, J. Fluid Mech., 57, (1973).
(3) J. Burguete, H.L. Mancini and C. Pérez-García, .*Europhys. Lett.*, **23**, p.401,(1993).

P-24

ALGORITMOS PARA EL CALCULO DE EXPONENTES MULTIFRACTALES

J. Mach, F. Mas and F. Sagués
Departament de Química Física, Universitat de Barcelona
C/ Martí i Franquès 1, E-08028 Barcelona

Se analizan diversos algoritmos para el cálculo de exponentes multifractales. En particular se estudian las dos técnicas más comunmente utilizadas: la cuenta de cajas a talla fija (1) (box-counting fixed-size) y la cuenta de cajas a masa fija (2) (box-counting fixed-mass). El algoritmo de la cuenta de cajas a talla fija esta particularmente optmizado para calcular las leyes de escala para $q > 0$ y, contrariamente, el algoritmo de la cuenta de cajas a masa fija se usa para $q < 0$. Para optimizar estos algoritmos, se construyen matemáticamente medidas multifractales de las cuales se conocen analíticamente su espectro multifractal (4). Estos algoritmos finalmente se aplican para la caracterización de la Distribución de Probabilidad de Crecimiento para imágenes digitalizadas de electrodepósitos (5).

(1) J. Mach, F. Mas and F. Sagués,Phys. Rev. E, enviado para su publicación.
(2) R. Badii and A. Politi, J. Stat. Phys. **40**, 1400 (1985).
(3) T.C. Halsey, M.H. Jensen, L.P. Kadanoff, I. Procaccia and B.I. Shraiman, Phys. Rev. A **33**, 114 (1989);
(4) J. Mach and F. Mas, en preparación.
(5) J. Mach, F. Mas and F. Sagués, Europhys. Lett. **25**, 271 (1994).

P-25

DETERMINACION DE ESPECIES EN COMPLEJOS POLIELECTROLITO-METAL PESADO. CASO LABIL CON INTERACCIONES.

J.L. Garcés y F. Mas
Departament de Química Física, Universitat de Barcelona
C/ Martí i Franquès 1, E-08028 Barcelona
J. Galceran, J. Salvador y J. Puy
Departament de Química , Universitat de Lleida
Av. Rovira Roure, 177, E-25006 Lleida

Las interacciones entre iones metálicos y ligandos polielectrolíticos han sido estudiadas por diferentes técnicas, para así poder estudiar la dependencia de su bioactividad y su posible toxicidad con la concentración de las diferentes especies involucradas (1). Uno de los problemas planteados en el estudio de los equilibrios iónicos, en macromoléculas polielectrolíticas, es el de conocer hasta qué punto es posible el planteamiento de una constante de equilibrio formal para tales sistemas. El planteamiento de una constante de equilibrio está ligada, principalmente, a la no existencia de interacciones entre metales complejados en grupos funcionales vecinos. Se trata, pues, de estudiar la influencia de tales interacciones, utilizando métodos mecánico-estadísticos en las posibles interacciones respecto al caso en que tal interacción se suponga nula (2) la relación de equilibrio estará en funció de los parámetros energéticos del problema, es decir, la energía de interacción metal-metal (en el complejo) y la energía de complejación del metal.

(1) J. Buffle, Complexation Reactions in Aquatic Systems. An Analytical Approach. Ch. 9, Ellis Horwood: Chischester, 1988.
(2) J. Galceran, J. Salvador, J. Puy and F., Mas, en preparación.

P-26

Teoria de Perturbaciones para el Diagrama de Fases del modelo Gay-Berne de un Cristal Liquido

E. Velasco[1] y L. Mederos[2]
[1]Faculty of Mathematical Studies,
University of Southampton S09 5NH, Southampton, Reino Unido
[2]Instituto de Ciencia de Materiales,
CSIC, Universidad Autonoma (C-XII), Madrid E-28049,Spain

June 22, 1994

Abstract

Se presenta una teoria de perturbaciones para describir el diagrama de fases de un sistema de moleculas que interaccionan mediante el potencial Gay-Berne. El modelo utiliza una generalizacion de la separacion del potencial en parte atractiva y repulsiva propuesta por Weeks, Chandler y Andersen para sistemas simples. El sistema de referencia repulsivo se aproxima mediante un Gaussian overlap model duro, y se utilizan diversos metodos para aproximar su ecuacion de estado en las fases isotropas. La parte atractiva se trata con una funcion de distribucion radial de esferas duras escalada de forma apropiada y se discuten las repercusiones del modelo. El diagrama de fases incluye las fases conocidas del potencial Gay-Berne y esta en acuerdo cualitativo con las simulaciones.

P-27

Study of the Disordered Regimes in the Complex Ginzburg-Landau Equation and its Non-Equilibrium Potential

R. Montagne, E. Hernández-García, and M. San Miguel
Departament de Física
Universitat de les Illes Balears
E-07071 Palma de Mallorca (Spain)

June 22, 1994

Abstract

The Complex Ginzburg-Landau Equation (CGLE) is a model equation describing the dynamics of extended systems near a Hopf-bifurcation. Recent work in the one-dimensional case [1] has identified numerically regions of parameter space displaying different kinds of regular and chaotic behavior. This numerical "phase diagram" and the "transition lines" contained on it deserve a better understanding as well as a theoretical justification. In the present paper we take advantage of the availability of an approximate nonequilibrium potential calculated by R. Graham and collaborators [2] to explore the behaviour of this system near those transition lines. Global stability properties suggested by the nonequilibrium potential and its validity as a Lyapunov functional are numerically checked for the one dimensional CGLE.

[1]H. Chate, Nonlinearity **7**, 185 (1994) and also in *Spatiotemporal Pattern in Nonequilibrium Complex Systems* (Addison-Wesley, New York, 1994), "Santa Fe Institute in the Sciences of Complexity".

[2]O. Descalzi and R. Graham, Phys. Lett. A **170**, 84 (1992).

P-28

Un modelo sencillo para el diagrama de fases líquido-vapor de los fluidos alcalinos

P. Tarazona(a), E. Chacón(b), and J. P. Hernandez(c)

(a) Departamento de Física de la Materia Condensada (C-XII),
Universidad Autónoma de Madrid, E - 28049 Madrid, Spain
(b) Instituto de Ciencia de Materiales (CSIC),
Departamento de Física Fundamental (UNED), E - 28080 Madrid, Spain
(c) Department of Physics and Astronomy, U. of North Carolina,
Chapel Hill NC 27599-3255, USA

Presentamos un modelo que reproduce las características observadas experimentalmente del diagrama de fases líquido-vapor de los fluidos alcalinos. Dentro del mismo formalismo la conductividad eléctrica estimada está en muy buen acuerdo con los experimentos. La característica crucial del presente modelo es tener en cuenta que los sistemas metálicos presentan grandes efectos de *clustering*. Estos son debidos a que la deslocalización de los electrones de valencia en cada *cluster* origina una alta cohesión de los mismos. Hemos estudiado el modelo realizando una simulación Montecarlo de un *lattice gas*, lo que nos ha permitido un estudio integrado de las propiedades estructurales, termodinámicas y electrónicas de los fluidos alcalinos.

P-29

Funcional de la energía total de un gas de electrones basado en el hueco de intercambio-correlación.

J. E. Alvarellos[(1)], E. Chacón[(1),(2)], P. García-González[(1)].

(1) Departamento de Física Fundamental (UNED).
Apartado 60.141. E-28080 Madrid.
(2) Instituto de Ciencias de Materiales (CSIC).
Universidad Autónoma de Madrid. E-28049 Madrid.

A partir de la relación funcional entre las energías cinética y de intercambio de un gas de electrones en el límite Hartree-Fock[1], y analizando la fuerte relación entre la no localidad del funcional de energía cinética y la de los efectos de intercambio-correlación (XC), presentamos un modelo autoconsistente para las energías cinética y de XC de un sistema de N electrones. En este modelo, el único dato necesario es una expresión del hueco de XC del sistema. El funcional de energía XC está construido en base a una aproximación no local tipo WDA *(weighted density approximation)*, mientras que el funcional cinético no local, además de poseer un término WDA, contiene términos LDA *(local density approximation)* y de Weizsäcker.

Así, usando un hueco de XC[2], se recuperan excelentemente características físicas bien conocidas para el gas de electrones homogéneo (función respuesta del gas no interactuante, energía de intercambio-correlación, correcciones de campo local a la función respuesta RPA, etc..). El funcional se aplica a sistemas físicos sencillos con el objeto de clarificar la posible universalidad del mismo.

[1] J.A. Alonso and L.A. Girifalco. *Phys. Rev. B* **17** (1978) 3735.
[2] E. Chacón and P. Tarazona. *Phys. Rev. B* **37** (1988) 4013.

P-30

Análisis asintótico de correlaciones en fluidos iónicos

R. J. F. Leote de Carvalho y R. Evans
H. H. Wills Physics Laboratory, University of Bristol,
Bristol BS8 1TL, United Kingdom

El comportamiento asintótico de las correlaciones de estructura en fluidos binários iónicos ha sido investigado usando una extensión del análisis de polos de la ecuación integral de Ornstein-Zernike (OZ) aplicado anteriormente a mezclas neutras [1]. Aunque las fuerzas Coulombianas sean de largo-alcance, por causa del apartallamiento electrostático, las funciones de correlación total de pares $rh_{ij}(r)$, con $i,j \in (+,-)$, siguen exibiendo el mismo decaimiento α_0^{-1} y, si hay oscilaciones, la misma longitud de onda $2\pi/\alpha_1$. Exiben también las mismas relaciones de amplitudes y de fases que las de una mezcla neutra a pesar de que la estructura de polos de las $\hat{h}_{ij}(q)$ es distinta. Se consideró el Modelo Primitivo Restrictivo (RPM) tratado en la GMSA. Dos clases de polos se distinguén: los asociados a la distribuición de carga y la de densidad. Se determinaron en el plan (ρ^*,T^*) las dos lineas de transición de monotónico para oscilatório: una (Kirkwood) determinada por polos de carga y otra (Fisher-Widom) por polos de densidad. El último decaimiento es determinado por el polo con menor α_0. Se determinaron también las regiones correspondientes a los dos régimenes de decaimiento de las $h_{ij}(r)$: dominado por la carga o por la densidad dependiendo de cúal es el polo que determina el decaimiento. Se discuten los casos de los electrólitos 1:1 y 2:2, el caso de la sal fundida, las consequencias para el caso asimétrico y se comenta sobre el comportamiento crítico [2].

1 - Evans, R., Leote de Carvalho, R. J. F., Henderson, J. R. and Hoyle, D. C., 1994, *J. Chem. Phys.*, **100**, 591;
2 - Leote de Carvalho, R. J. F. and Evans, R., *Mol. Phys.*, pre-print

P-31

Dynamical Scaling of Fractal Aggregates in Dense Colloidal Solutions

Tomàs Sintes and Raúl Toral
Departament de Física, Universitat de les Illes Balears, E-07071 Palma de Mallorca, Spain
Amitabha Chakrabarti
Department of Physics, Kansas State University Manhattan, KS 66506

We present results from a detailed Monte Carlo study of a two-dimensional off-lattice system of a dense colloidal solution undergoing diffusion-limited-cluster-aggregation (DLCA) process. We find that the dynamical structure factor, $S(k,t)$, scales with the characteristic linear size of the aggregates, $R_g(t)$, according to $S(k,t) = R_g^{D_f}\mathcal{F}[kR_g(t)]$, where D_f is the fractal dimension of the clusters. We have verified that the shape of this scaling function compares well with the experimentally obtained scaling function [0]. Although this behavior is similar to the dynamical scaling law found in systems undergoing spinodal decomposition, we find that some details of the evolution process of the DLCA model are quite different from the dynamics of phase-separating systems.

D. J. Robinson and J. C. Earnshow, Phys. Rev. Lett. **71**, 715, (1993)

P-32

Membranas, vesiculas y micelas.

A.M. Somoza, L. Mederos, E. Chacón y P. Tarazona
Instituto de Ciencia de Materiales, CSIC,
Universidad Autonoma de Madrid
28049, Madrid

Se presenta un modelo microscopico para la formacion de membranas libres en suspension. Se trata de mantener el modelo con la mayor simplicidad posible, pero capaz de reproducir los aspectos fundamentales de estos sistemas, particularmente su capacidad de auto-organizacion en distintos tipos de estructuras. El modelo incluye los grados de libertad de orientacion molecular, dentro de un modelo de funcional de la densidad, con interaciones anisotropas y efectos no locales de empaquetamiento. La minimizacion con simetria plana permite obtener las condiciones de estabilizacion y de equilibrio de membranas formadas por bicapas moleculares. La minimizacion del mismo funcional con simetria esferica permite obtener la energia de curvatura de estas membranas, la estructura y la estabilidad de vesiculas y de micelas.

P-33

ESTRUCTURAS COMPACTAS EN ELECTRODEPOSICION GALVANOSTATICA

Juanma Pastor y Miguel A. Rubio

Dept. Física Fundamental. Facultad de Ciencias
Universidad Nacional de Educación a Distancia
C/ Senda del Rey s/n. 28040-Madrid. Spain

En el presente trabajo presentamos resultados preliminares sobre experimentos de electrodeposición a corriente constante en disoluciones acuosas de sulfato de cobre 0,5 M en geometría rectangular. El espesor de la celda es de 10 micras y la separac ión entre los dos electrodos de cobre colocados paralelos es de 2 cm. Los experimentos han sido realizados a temperatura constante de 38°C y con una estabilidad de dicho valor de 0.01°C. El rango de valores de corriente utilizado es en tre 50 y 500 μA y el sobrepotencial en el cátodo ha sido medido con un electrodo estándard de calomelanos. La interfase donde se verifica el crecimiento se observa por medio de un microscopio óptico, y las imágenes obtenidas se digitalizan con una resolución espacial de 0.6 μm.

Las estructuras observadas cambian a medida que transcurre el tiempo en el experimento. En la etapa inicial la interfase crece con velocidad constante cn una estructura facetada de peque/ na amplitud. A tiempos mayores se desarrollan estructuras ramificad as compactas que a veces presentan fuertes efectos de anisotropía. Estas estructuras parecen corresponder a las descritas como "algas fractales" y "dendritas fractales", respectivamente, en la referencia [1]. Los cambios en la estructura del depósi to se ven acompañados por un aumento monótono del sobrepotencial del cátodo. Este hecho sugiere que el sobrepotencial juega un papel análogo al del sobreenfriamiento en el problema de la solidificación de un fundido puro sobreenfriado. En este s entido la evolución con el tiempo de la morfología de los depósitos podría ser interpretada como causada por un barrido en el sobreenfriamiento.

1.- E. Brener, H. Muller-Krumbhaar, D. Temkin, Europhys. Lett., 17, 535 (1992).

Este trabajo ha sido financiado en parte por los proyectos DGICYT/PB89-0196 y CAM/C085-90.

P-34

INTERMITENCIA TIPO II EN UN LASER CON ABSORVENTE SATURABLE

J. San Martin y J.C. Antoranz
L.C.D.I.
Depto. Física Fundamental, U.N.E.D.
Apdo. 60.141, 28080-Madrid

Junio, 1994

La intermitencia tipo II se produce cuando se da la coexistencia de un toro inestable y de una bifurcacion global (homoclina o heteroclina) que genere la reinyeccion en la vecindad de la bifurcacion local inestable.

Hemos estudiado un modelo de láser con absorvente saturable forzado por un campo eléctrico exterior sinusoidal. Para determinar la posición de las conexiones homoclínicas y heteroclínicas se hizo uso de un desarrollo alrededor de un punto de codimensión cuatro en el sistema sin forzar. El ciclo límite inicialmente estable se desestabilizaba generando un toro inestable y tras un estudio de los exponentes de Floquet, se determina que la transición al caos se realiza *via* una intermitencia tipo II.

P-35

Modelización con autómata celular de una llama de premezcla con $Le \neq 1$

A. López Martín, J.C. Antoranz,
J.L. Castillo Gimeno y P. L. García Ybarra
L.C.D.I.
Depto. Física Fundamental, U.N.E.D.
Apdo. 60.141, 28080-Madrid

Junio, 1994

Basándonos en un autómata celular[1] que simula la propagación de frentes de llama en gases con número de Lewis igual a la unidad ($Le = 1$), se ha desarrollado un nuevo autómata que opera simultáneamente en dos campos difusivos: uno másico y otro térmico; esto permite simular frentes de llama con $Le \neq 1$. El autómata, análogamente al anterior, describe la parte potencial del flujo autogenerado por un frente de llama pero, por el contrario, no sólo muestra el desarrollo de inestabilidades hidrodinámicas, sino que además presenta inestabilidades de tipo puramente termodifusivas. Se han calculado las relaciones de dispersión generadas por el autómata y que corresponden con los dos tipos de inestabilidades citadas. Se ha encontrado que concuerdan razonablemente con las predichas para un modelo de frente equivalente en el límite del continuo.

Así mismo, se ha estudiado el comportamiento no-lineal de la evolución temporal de los frentes y se han calculado los exponentes característicos de la cascada inversa de energía, observada a tiempos largos en el flujo autogenerado por el frente deformado.

(1) P.L. García Ybarra, A. López-Martín, J.C. Antoranz y J.L. Castillo, *Transport Theory and Statistical Physics*, 23 (1-3), 173-193 (1994).

P-36

SIMULACIÓN DE LA ECUACIÓN DE BOLTZMANN PARA EL FLUJO TANGENCIAL UNIFORME

J.M. Montanero y A. Santos
Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

El problema del flujo tangencial uniforme ("uniform shear flow") es analizado a través de la simulación de la ecuación de Boltzmann mediante el método de Monte Carlo [1]. Para moléculas de Maxwell [$\varphi(r) \propto r^{-4}$] existe un valor del gradiente de velocidad por encima del cual los momentos de orden cuarto de la función de distribución de velocidades no alcanzan un estado estacionario [2], lo que implica la ausencia de solución "normal" de la ecuación de Boltzmann por encima de dicho valor. En este trabajo se estudia la evolución de los momentos de órdenes cuarto y sexto para distintos potenciales repulsivos de la forma $\varphi(r) \propto r^{-\mu}$, con el objeto de comprobar el grado de generalidad de lo que sucede para moléculas de Maxwell.

[1] G. A. Bird, *Molecular Gas Dynamics* (Clarendon, Oxford, 1976).
[2] A. Santos, V. Garzó, J. J. Brey, and J. W. Dufty, Phys. Rev. Lett. **71**, 3971 (1993); **72**, 1392 (1994) (Erratum).

P-37

FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN RADIAL PARA EL POTENCIAL POZO CUADRADO

S. Bravo Yuste[1,2] y A. Santos[2]
[1]Institute for Nonlinear Science and Department of Chemistry, UCSD, California 92093-0340
[2]Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

Se propone una expresión explícita para la transformada de Laplace de $rg(r)$ para fluidos de pozo cuadrado tridimensionales [1]. El modelo se construye imponiendo tres condiciones físicas básicas: (a) $\lim_{r\to\sigma^+} g(r) =$ finito, (b) $\lim_{q\to 0} S(q) =$ finito y (c) $\lim_{r\to\lambda\sigma^-} g(r)/\lim_{r\to\lambda\sigma^+} g(r) = \exp(\epsilon/k_BT)$. Cuando se aplica al caso unidimensional, el modelo da la función de distribución radial exacta. Además, en el límite de esferas duras adhesivas [$\lambda \to 1$, $\epsilon \to \infty$, $(\lambda-1)\exp(\epsilon/k_BT) =$ finito] el modelo se reduce a la solución exacta de Baxter de la ecuación Percus-Yevick. La comparación con datos de simulación de Monte Carlo muestra que el modelo es una buena extensión a pozos cuadrados "estrechos" de la solución de Baxter. Para pozos "anchos" el modelo es una aproximación aceptable, incluso para estados próximos al crítico.

[1] S. Bravo Yuste and A. Santos, *A model for the structure of square-well fluids*, J. Chem. Phys. **101** (3) (1994).

P-38

FLUJO DE CALOR INDUCIDO POR UNA FUERZA EXTERNA EN UN GAS DILUIDO ALEJADO DEL EQUILIBRIO

V. Garzó
Departamento de Física, Universidad de Extremadura, 06071 Badajoz

En este trabajo se estudia un problema de transporte de calor en un gas diluído en presencia de un flujo cortante uniforme de velocidades. El flujo de calor es generado por la acción de una fuerza externa en ausencia de un gradiente térmico. Esta forma de producir flujo de energía en un sistema homogéneo ha sido recientemente propuesto en simulaciones de dinámica molecular. Utilizando el modelo cinético BGK como punto de partida obtenemos una solución del mismo a partir de un desarrollo perturbativo en potencias del campo externo. Hasta el segundo orden derivamos expresiones explícitas para el tensor de conductividad térmica y el coeficiente de viscosidad [1]. Dichas expresiones son comparadas con las obtenidas previamente en un sistema en presencia de un gradiente de temperatura [2]. A partir de dicha comparación se propone una nueva forma del campo externo que lleva a resultados consistentes.

[1] V. Garzó, J. Chem. Phys. (1994), aceptado para su publicación.
[2]V. Garzó, Phys. Rev. E **48**, 3589 (1993).

P-39

Monte Carlo simulation of a site-site model for liquid methyl iodide

B. J. C. Cabral
Departamento de Química and CFMC
Universidade de Lisboa
2, Av. Prof. Gama Pinto 1699 Lisboa, Portugal

NPT Monte Carlo Simulations of a site-site model of methyl iodide have been carried out for several thermodynamic states in the liquid phase. The methyl group CH_3 was represented by a fused pseudoatom. The interactions between two CH_3I molecules are represented by a site-site Stockmayer potential. The parameters for the the CH_3 pseudoatom are the same of other previous studies on molecular liquids [1,2]. The parameters for iodide have been estimated in the liquid phase. A comparison between the effective liquid model and the gas phase pair potential predicted by ab initio calculations is also reported. The computer simulation results for the structure of liquid methyl iodide reflect the presence of antiparallel and linear dimers which is enhanced by dipolar interactions. Thermal properties are in good agreement with experimental results. This agreement has been confirmed by recent molecular dynamics simulations based on the same model [4].

1. F. F. M. Freitas, B. J. C. Cabral and F. M. S. Silva Fernandes, J. Phys. Chem., 97, 9470 (1993)
2. F. F. M. Freitas, B. J. C. Cabral and F. M. S. Silva Fernandes, to be published.

P-40

Ecuación de Ginzburg - Landau con Ruido Multiplicativo

Pablo Luque y José María Sancho

Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria,

Universitat de Barcelona, Diagonal 647, E-08028, Barcelona,

España.

Hemos estudiado numéricamente la ecuación de Ginzburg - Landau dependiente del tiempo con ruido multiplicativo (Modelo A) . Se ha observado que la intensidad del ruido controla la transición orden - desorden . Hemos estimado las propiedades críticas de esta transición. Tratamientos teóricos preliminares explican dicho comportamiento.

P-41

Dinámica de la relajación de partículas ferromagnéticas en suspensión: teoría y experimentos.

M. C. Miguel and J.M. Rubí

Departament de Física Fonamental, Facultat de Física

Universitat de Barcelona, Diagonal 647, 08028 Barcelona (Spain)

Abstract

El objetivo de este trabajo es el estudio de la relajación de una suspensión diluida de partículas ferromagnéticas monodominio en el caso general en el que la energía de anisotropía y la energía de interacción con un campo magnético externo pueden tomar valores arbitrarios. Hemos desarrollado un formalismo basado en la ecuación de Smoluchowski, que, en este caso, describe la dinámica de la densidad de probabilidad asociada a la orientación del momento magnético y del eje de fácil imanación de cada parícula. Este formalismo nos permite obtener expresiones analíticas para los tiempos de relajación de las partículas, así como para la viscosidad de la suspensión, que se obtiene a partir de una fórmula de Green-Kubo. Los resultados que obtenemos concuerdan con los datos experimentales que se derivan de un estudio de la birrefringencia en diferentes muestras de partículas ferromagnéticas, para las que, bien la energía de anisotropía o bien la energía de interacción con el campo magnético es mucho mayor que la otra. Además, hemos estudiado la dinámica de una partícula no magnética en suspensión en un ferrofluido, ahora considerado un medio continuo. Observamos que en presencia de un campo magnético giratorio, el hueco magnético rota en sentido opuesto al del campo. Para el intervalo de frecuencias que consideramos, obtenemos de nuevo buen acuerdo con resultados experimentales.

P-42

Algoritmo de Nosé Hoover para el modelo de Gay Berne

Felipe Jimenez, Enrique de Miguel y Luis F. Rull

Departamento de Física Atómica Molecular y Nuclear

Universidad de Sevilla

Presentamos el desarrollo del algoritmo de Nosé Hoover [1] para un modelo de potencial que exhibe comportamiento de cristal líquido: el modelo de Gay Berne [2]. Las ecuaciones se resolvieron haciendo de un algoritmo predictor correcto, obteniendo un método práctico, efectivo y facilmente implementable. Haciendo uso de un solo termostato reproducimos los resultados obtenidos deMiguel *et al* [3] para varios puntos del diagrama de fases en colectivo canónico y el colectivo NPT. Se comprobó mediante diversos procedimientos que los colectivos reproducidos eran el canónico y el isotérmico-isobarico. En concreto, se encontró que las funciones de distribución de los coeficientes de fricción termodinamicas eran gausianas en todos los casos.

(1) W. G. Hoover, *Phys. Rev.* , **31**, 1695,(1984).
(2) J. G. Gay y B. J. Berne, *J. Chem. Phys*, **74**, 3316,(1981).
(3) E. de Miguel, L.F. Rull M. K. Chalam y K. E. Gubbins *Mol. Phys.* , **74**, 405,(1991).

P-43

Orden orientacional en cristales líquidos bidimensionales

Elvira Martin del Rio, Enrique de Miguel y Luis F. Rull

Departamento de Física Atómica Molecular y Nuclear

Universidad de Sevilla

Presentamos un estudio del alcance de las correlaciones orientacionales en un modelo cristal líquido bidimensiona. Mientras que para d=3 estas correlaciones son de largo alcance, aun no está establecida de forma determinate la naturaleza de dichas correlaciones para d=2. Un estudio mediante simulación por ordenador pone de manifiesto la existencia de, al menos tres fases: isótropo, nemático y sólido. La posible existencia de una fase esméctica está por determinar.

Crecimiento via vacantes de una interfase inestable

Eduard Vives, Carlos Frontera, Teresa Castán y Antoni Planes

Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria

Facultat de Física

Universitat de Barcelona

Diagonal 647 08028 Barcelona

Resumen

Hemos estudiado la evolución de una interfase inestable que separa dos fases puras (A y B) en un sistema cuyo estado de equilibrio presenta orden antiferromagnético. El sistema ha sido descrito mediante un modelo de Ising, en una red bidimensional cuadrada, con interacción antiferromagnética a primeros vecinos y ferromagnética a segundos vecinos. Mediante simulación de Monte Carlo se han estudiado el crecimiento de la fase ordenada y las evoluciones del factor de estructura y de los perfiles de concentración y del parámetro de orden antiferromagnético. Se han identificado tres escalas de longitud relevantes para describir la evolución del sistema: La anchura de la zona ordenada, la longitud de difusión de una fase dentro de la otra y la rugosidad de la interfase. Todas ellas parecen presentar una evolución en ley de potencias.

Ecuaciones de estado de fluidos compuestos de moléculas triatómicas rígidas

M.J. Maeso y J.R. Solana

Departamento de Física Aplicada. Universidad de Cantabria.
39005 Santander. España

Desde hace bastante tiempo, el estudio de la ecuación de estado del fluido de esferas rígidas ha despertado gran interés, debido en parte a su utilidad en las teorías de perturbaciones de fluidos reales. El tratamiento perturbativo converge más rápidamente cuanto más se aproxima la forma de la molécula del fluido de referencia a la del fluido real, de ahí la conveniencia del estudio de las propiedades de fluidos constituidos por moléculas rígidas no esféricas.

En la presente comunicación se desarrolla una ecuación de estado para fluidos constituidos por moléculas triatómicas rígidas, lineales y no lineales, extendiendo a este tipo de sistemas un método inicialmente desarrollado para el fluido de esferas rígidas [1], y posteriormente aplicado también a otros tipos de fluidos compuestos por moléculas rígidas [2,3]. Los resultados concuerdan, práticamente en todos los casos, con los datos de simulación dentro del error estadístico de estos últimos.

Referencias

[1] M. J. Maeso, J. R. Solana, J. Amorós and E. Villar, J. Chem. Phys. **94**, 551 (1991).

[2] M. J. Maeso, J. R. Solana, J. Amorós and E. Villar, Mater. Chem. Phys. **30**, 39 (1991).

[3] M. J. Maeso, J. R. Solana and J. Amorós, Molec. Phys. **76**, 1269 1992).

P-46

MECANICA ESTADISTICA DE DISOLUCIONES AL NIVEL DE MACMILLAN-MAYER

J.L.Gómez Estévez y P.Pugazhendhi
Departament de Física Fonamental,Facultat de Física
Universidat de Barcelona, Diagonal,647, 08028 Barcelona

En este trabajo se presenta el tratamiento mecánicoestadístico en forma muy general de las disoluciones al nivel de MacMillan-Mayer (MM). Si consideramos, por sencillez, uma disolución con N_o moléculas de disolvente y N_σ de soluto, es posible descomponer al sistema en dos partes de forma exacta. La energía libre de Helmholtz, F, puede escribirse de de la siguiente forma:

$F = F_o\ (T,V,N_o) + F_e\ (T,V,N_o,N_\sigma)$

donde $F_o\ (T,V,N_o)$ es la energía libre del disolvente puro a la misma T y V de la disolución y $F_e\ (T,V,N_o,N_\sigma)$ es una energía libre efectiva de un sistema unicomponente (el soluto "solo").
La expresión para F_e es la normal en términos de una función de partición canónica efectiva Z_e.

$F_e\ (T,V,N_o,N_\sigma) = -kT \ln Z_e\ (T,V,N_o,N_\sigma)$

que introduce una energía potencial efectiva entre las partículas del soluto y que depende de la temperatura, presión y concentración de la disolución. Las técnicas normales utilizadas para los sistemas unicomponentes pueden ser empleadas aquí. Los problemas asociados con la obtención de las propiedades termodínamicas del sistema se discutirán y las aplicaremos al caso especial de las disoluciones acuosas de electrolitos a 298.15 K.

P-47

Modelo de Markov en la adsorción

J. Diaz Hernandez, V. Magalinnski, H. Vera
Universidad Autónoma de Puebla, Mexico

M. B. Palacios Navarro
Deparatamento de Métodos Estadísticos
Universidad Pública de Navarra

Se estudia el fenómeno de la adsorción física considerándolo como un proceso estocástico de Markov. Las propiedades fundamentales de estos procesos son aplicadas a un sistema de adsorción compuesto por capas. Bajo estas condiciones se obtiene un sistema de ecuaciones que resuelven por completo cualquier modelo mecánico-estadístico de una monocapa aislada, el cual queda especificado por su función de estado.

Mediante esta función, y usando el modelo de Ising de la monocapa, hacemos el cálculo de la isoterma de adsorción y comparamos los resultados con la isoterma estandar de nitrógeno sobre grafito. Los resultados obtenidos muestran la consistencia de nuestro modelo con los datos experimentales.

P-48

MACROMOLECULAS CON DISTANCIAS Y ANGULOS DE ENLACE FIJOS: UN ESTUDIO BASADO EN LA MECANICA ESTADISTICA CUANTICA

Ramon F. Alvarez-Estrada
Departamento de Física Teórica
Universidad Complutense, 28040-Madrid, Spain

Se considera un modelo para cadenas moleculares abiertas (formadas por N atomos en tres dimensiones) en equilibrio termodinamico, basado en la Estadistica Cuántica. Por hipotesis, los atomos interaccionan mediante potenciales vibracionales (tipo oscilador armonico) en el limite de altas frecuencias , con lo que las $N-1$ distancias de enlace y los $N-2$ angulos de enlace adquieren valores fijos (variables duras), en tanto que los restantes N angulos pueden variar sin restricciones (variables blandas). Para la funcion de particion mecano-cuantica , Z', de la cadena, se obtiene una cota rigurosa, relacionada con la aproximacion de Born-Oppenheimer. Se demuestra que ciertas energias de punto cero para las vibraciones de alta frecuencia, aparentemente dependientes de las variables blandas, son, en realidad constantes independientes de estas ultimas. Esta independencia resuelve, para el presente modelo, una dificultad generica asociada al proceso de eliminacion de variables duras. En consecuencia, Z' puede acotarse inferiormente mediante una nueva funcion de particion mecanocuantica, Z, que depende unicamente de variables blandas y es independiente de las altas frecuencias vibracionales. A alta temperatura, Z puede aproximarse por una funcion de particion clasica que difiere de otras previamente propuestas.

P-49

Inestabilidades morfológicas de una interfase nemático-esméctico B

R. González-Cinca y L. Ramírez-Piscina
Departament de Física Aplicada, Campus Nord-Módulo B4
Universitat Politècnica de Catalunya
Jordi Girona Salgado s/n, E-08034 Barcelona

J. Casademunt y A. Hernández-Machado
Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria
Universitat de Barcelona,Av. Diagonal 647, E-08028 Barcelona

Se ha estudiado mediante un modelo tipo 'phase field', la dinámica de una interfase nemático-esméctico B en diversas condiciones de crecimiento. Este sistema presenta fuerte anisotropía en la tensión superficial, correspondiendo a formas de equilibrio con facetas. Simulaciones para distintos valores de sobreenfriamiento conducen a la aparición de morfologías bien diferenciadas que se corresponden con las observadas experimentalmente.

P-50

PROPAGACION DE ONDAS EN UN MEDIO EXCITABLE DESORDENADO

J.M. Noriega[1], M.A. Rodriguez[2], L. Pesquera[2]

(1) Dpto. de Matemáticas, Universidad de Oviedo, Spain

(2) Dpto. Física Moderna, Universidad de Cantabria, Spain

El desorden es un componente esencial de muchos sistemas físicos, siendo sus efectos bien conocidos en sistemas lineales. En los sistemas no lineales el comportamiento colectivo conduce a la formación de estructuras que pueden interactuar con el desorden de forma global. Pretendemos ilustrar esto por medio de un modelo de reacción-difusión con soluciones analíticas, para lo cual estudiamos los efectos del desorden en la propagación de ondas en un medio excitable, consistente en un resistor de Ballast.

Se analizan primeramente los casos de propagación adiabática, en los que la formación de la onda es más rápida que su propagación. En el caso de longitud de correlación larga la onda se comporta como una particula en un campo aleatorio de velocidades. Cuando la amplitud de la onda sea mayor que la longitud de correlación del campo se obtiene una velocidad que depende del coeficiente de difusión equivalente encontrado en el caso lineal desordenado.

Con respecto a los casos no adiabáticos, un análisis teórico sugiere que para longitudes de correlación cortas el parámetro relevante es la intensidad del ruido. En este sentido, de las simulaciones numéricas se desprende que la velocidad sólo varía con este parámetro y, si lo mantenemos fijo, no sufre variaciones con el desorden.

Como conclusión, los efectos del desorden en el caso de una estructura organizada son fuertemente dependientes de la propagación y del tamaño relativo de la onda con respecto a la longitud de correlación del campo.

P-51

Aprendizaje no supervisado: procesamiento lineal y no lineal

Nestor Parga
Departamento de Física Teórica
Universidad Autónoma de Madrid
Canto Blanco, 28049 Madrid

Existe creciente evidencia que la evolución de células ubicadas en las vías sensoriales, en particular en el sistema visual, pudo producirse siguiendo algún principio básico tal como la maximización de la información que ese sistema es capaz de transmitir a capas internas. Sin embargo no existe un estudio sistemático de estas ideas y menos aún una comparación de los diferentes modelos con datos que permitan distinguir aquéllos relevantes. Este trabajo esta dirigido realizar el primer punto, en particular a análizar el efecto del ruido en el procesamiento y a la comparación entre un procesamiento lineal y uno no lineal.

Entre los resultados se obtiene una descripción de cómo el ruido modifica el análisis de componentes principales (PCA), en el caso de procesamiento lineal. Esencialmente ocurre que la dimensión del espacio de acoplamientos se reduce limitándose el sistema a transmitir un número cada vez más pequeño de componentes. En cuanto al caso de procesamiento no lineal, se demuestra que el conjunto estadístico óptimo de estos sistemas tiene un análogo lineal, a partir del cual es posible determinar su comportamiento.

P-52

Estudio mediante Dinámica Molecular del comportamiento de un sistema Lennard-Jones sometido a altas tasas de enfriamiento

José Manuel Gómez Alós y José Gómez Ordóñez
Universidad de Sevilla.Facultad de Física.Física Teórica
Apdo. Correos 1065.Sevilla 41080

Se analiza mediante Dinámica Molecular, el comportamiento de un sistema de partículas interaccionando con un potencial Lennard-Jones a volumen constante cuando es sometido a tasas de enfriamiento suficientemente rápidas. El enfriamiento se realiza reescalando las velocidades de las partículas una cantidad dada a intervalos regulares de tiempo, modificandose la tasa de enfriamiento al cambiar cualquiera de los dos parámetros. Se estudia la influencia de ambos encontrandose que lo relevante es su cociente. Se observa que por encima de una tasa de enfriamiento umbral el sistema pasa por los mismos estados superenfriados, para tasas de enfriamiento inferiores el sistema decae al estado cristalino al alcanzar una temperatura dada. Esta temperatura decrece al hacerlo la tasa de enfriamiento, aproximándose asintóticamente a la temperatura de fusión. En la rama metaestable se han estudiado los tiempos de relajación al estado cristalino cuando el sistema se abandona a diferentes temperaturas, existiendo un rango de temperaturas donde la relajación al sólido es más favorable. Las magnitudes estudiadas para analizar las características estructurales de la rama metaestable han sido la función de distribución radial g(r) y la función de fluctuación radial W(r) que mide las fluctuaciones del número de partículas que se encuentran a una distancia menor que r de una dada.

0

P-53

Comportamiento Resonante del Tiempo de Primer Paso en una Red Fluctuante

J. Casado Pascual
Matemáticas Aplicadas II, E.U. Politécnica,
Universidad de Sevilla. Virgen de Africa, 7. E-41011 Sevilla
J. Javier Brey
Física Teórica, Universidad de Sevilla, Apdo. Correos 1065,
E-41080 Sevilla

Estudiamos el tiempo medio de estancia de una partícula que realiza un camino aleatorio sobre un segmento de línea de una red, que salta aleatoriamente entre dos posibles estados. En cada estado de la red sólo se permite el movimiento en una dirección. Cuando la partícula puede abandonar el segmento por ambos extremos, el tiempo de estancia es una función monótona creciente de la probabilidad de transición entre los dos estados y no depende del estado inicial de la red. No obstante, si una de las fronteras del segmento es reflectante, aparece un mínimo para un valor dado de la probabilidad de transición, mostrando un comportamiento resonante. Los resultados se comparan con estudios previos de poblemas de tiempos de primer paso en campos dependientes del tiempo.

P-54

Estudio Monte-Carlo de polimeros injertados en superficies

Raul Toral
Departamento de Física
Universitat de les Illes Balears
07071- Plama de Mallorca

Presentamos un detallado estudio, mediante técnicas Monte-Carlo, de las propiedades configuracionales de polimeros injertados en superficies planas y esféricas (los llamados "cepillos"). Se analiza con detalle el perfil de densidad para diversos valores de la densidad de injerto y longitud de las cadenas poliméricas, para sistemas definidos en una red y fuera de ella. Se calcula tambien las fuerzas repulsivas entre dos cepillos y se compara con una teoría reciente de campo medio.

P-55

Derivation of a Landau Expansion for Ternary Surfactant Mixture

H. Leitao[1] and M. M. Telo da Gama[2]

[1,2]Departamento de Física, Universidade de Lisboa/ CFMC
Av. Prof. Gama Pinto 2, 1699 Lisboa Cedex, Portugal

[1] Centro de Física da Materia Condensada, Universidade de Lisboa
Av. Prof. Gama Pinto 2, 1699 Lisboa Cedex, Portugal

We derive a Landau theory for the interfacial properties of ternary surfactant mixtures, starting from a general density functional theory for inhomogeneous fluid mixtures.

Assuming slowly varying densities, the free energy is expanded in a gradient series which is truncated at fourth order, the coefficients of this expansion are identified, using standard linear response arguments, as moments of the direct correlation function

The espressions for these coeffiecients are evaluated for a particular (microscopic) model, and the validity of the Landau expansion is checked. Additionally, various Landay theories proposed in the literature are analysed and discussed in the light of our general expansion

P-56

Variational Theory of Nouniform Fluids

P.G. Ferreira[1], M. M. Telo da Gama[1] and A.G. Schlijper[2]

[1]Departamento de Física, Universidade de Lisboa/ CFMC Av. Prof. Gama Pinto 2, 1699 Lisboa Cedex, Portugal

[2]Shell Research Ltd. Thornton Research Centre PO Box 1, Chester CH1 3SH England

The extension of the Cluster Variational Method (CVM) of lattice theory to continuos system provides a systematic approach to the study of homogeneous and inhomogeneous fluid phases. The formalism generates integral equations for the distribution functions of fluids and consistent thermodynamic relations. We present several results of our systematic analysis of this theory. One of the most interesting approximations provided by this formalism is an extended version of the Hypenetted Chain (HNC) equation that allows for fluid inhomogeneity and for three body interactions. We investigate the stability of fluid phases and the liquid-vapour phase diagram of simple fluid (modelled by Lennard-Jones type of potentials). We study the influence of a three body potential (Axilrod and Teller tri-dipolar dispersion) an the (structure and thermodynamc) properties of this system. The inhomogeneous fluid in the presence of a flat hard wall is also analysed. In particular, we discuss the onset of the drying transition. The boundedness and convexity properties of the approximate free energies at the different order approximations of this formalism are analysed. Its consequences for the validity of the generalization to liquids of the Cluster Variational Method of solids are discussed.

P -57

Termodinámica de la adsorción de fluidos Lennard-Jones

F. Cuadros y A. Mulero
Dpto. de Física. Universidad de Extremadura
06071 - BADAJOZ.

RESUMEN

La Termodinámica de la adsorción es un tema de gran actividad científica. Aunque existe una gran variedad de resultados experimentales, se cuenta únicamente con un reducido número de propuestas teóricas que aborden el problema satisfactoriamente, siendo la mayoría de ellas de carácter semiempírico.

Utilizando un procedimiento híbrido entre la teoría WCA y resultados de simulación en ordenador de fluidos Lennard-Jones bidimensionales, hemos propuesto una parametrización para el cálculo de la energía libre de Helmhotz que es, hasta la fecha, la más exacta y fácil de manejar de las propuestas en la literatura para dichos fluidos [1,2]. Esta expresión permite una aplicacción directa de la teoría mecánico-estadística de Steele para la adsorción de monocapas de fluidos clásicos simples sobre superficies perfectas [1,2,3]. En este trabajo nos centramos en la obtención de resultados teóricos para las isotermas de adsorción y calor isostérico de adsorción que concuerdan satisfactoriamente con los obtenidos mediante otras aproximaciones o ecuaciones más complejas [2].

REFERENCIAS

1. F. Cuadros y A. Mulero, *Chem. Phys.* 177, 53 (1993); Lecture Notes in Fluid Physics. Ed. M.G. Velarde and C. Christov. World Scientific. Singapore (1994).

2. A. Mulero. Tesis Doctoral. Universidad de Extremadura (1994).

3. W.A. Steele, *J. Chem. Phys.*, 65, 5256 (1976).

ASISTENTES

PARTICIPANTES

Acedo Rodríguez, Luis (Univ. de Extremadura)TEOR2@BA.UNEX.ES
Agrait, Nicolás (Univ. Autónoma de Madrid)JGR@UM1.SDI.UAM.ES
Alvarellos Bermejo, José Enrique (UNED)
Alvarez-Estrada, Ramón F. (Univ. Complutense)ALVAREZ@FIS.UCM.ES
Antoranz Callejo, J.M. (UNED)ANTORANZ@UNED.ES
Armero Rovira, Juan (Univ. de Barcelona)ARMERO@UB.ES
Baus, Marc (Univ. Libre de Bruxelles)
Bermejo, Fco.Javier (CSIC)EMBERMEJO@IEM.CSIC.ES
Bravo Yuste, Santos (Univ. de Extremadura)SANTOS@BA.UNEX.ES
Brey Abalo, José Javier (Univ. de Sevila)BREY@CICA.ES
Brito López, Ricardo (Univ.Complutense)BRITO@SENECA.FIS.UCM.ES
Burguete Mas, Javier (Univ. de Navarra)CAPE@CPD.UNAV.ES
Cabral, Benedito (CFMC)BEN@ALF1.CC.FC.UL.PT
Cabrera Fernández, Juan Luis (UNED)JUANL.CABRERA@UNED.ES
Calado, Jorge C.G. (Lisboa)
Careta Pons, Agustí (Univ. de Barcelona)UBAQFT09@PUIGMAL.CESCA.ES
Casademunt, Jaume (Univ. de Barcelona)JAUME@EBUBECM1
Casado Pascual, Jesús (Univ. de Sevilla)
Casado Vázquez, José Manuel (Univ. de Sevilla)CASADO@CICA.ES
Castillo Gimeno, José (UNED)JCAST@UNED.ES
Chacón Fuertes, Enrique(Universidad Autónoma de Madrid)
Colet Rafecas, Pere (Univ. de les Illes Balears)DFSPCA4@PS.UIB.ES
Cuadros, Francisco (Univ. de Extremadura)CUADROS1@BA.UNEX.ES
Cuesta Ruiz, José Antonio (Univ. Carlos III)CUESTA@ING.UC3M.ES
De la Rubia Sánchez, Javier (UNED)JRUBIA@UNED.ES
Degroote, Eugenio (UNED)
Delgado Buscalioni, Rafael (UNED)RAFAEL.DELGADO@UNED.ES
Dellunde, Jaume (Univ. de Barcelona)DELLUNDE@NOISE.ECM.UB.ES
Denk, Claus (Univ. de Sevilla)DENK@OBELIX.CICA.ES
Domínguez-Adame,Francisco(Univ.Complutense)FIMAT02@EMDUCMS1.SIS.UCM.ES
Díaz Hernández, Jaime (Univ. del País Vasco)WMBDIHEJ@LG.EHV.ES
Elizalde Rius, Emilio (Univ. de Barcelona)ELI@ZETA.ECM.UB.ES
Español i Garrigós, Josep (Cavendish Laboratory)PEL0003@CUS.CAM.AC.UK
F.Abascal, José Luis (Univ. Complutense)JL@JUGUETE.QUIM.UCM.ES
Fernández Cara, Enrique (Univ. de Sevilla)
Fernández Tejero, Carlos (Univ. Complutense)TEJERO@EMDUCM11.SIM.UCM.ES
Galeano Prieto, Javier (Univ. Politécnica de Madrid)
Garcés Josep-Lluis (Univ. de Barcelona)FRANCESC@DAPHNE.GF.UB.ES
García de la Torre, José (Univ. de Murcia)GT@FC.UM.ES
García Fernández, Priscila (CSIC)IMTPG39@CC.CSIC.ES
García González, Pablo (UNED)PAGARCIA@UNED.ES
García Ybarra, Pedro Luis (UNED)PGYBARRA@UNED.ES
Garrido Arilla, Luis (Univ. de Barcelona)
Garzó Puertos, Vicente (Univ. de Extremadura)VICENTEG@BA.UNEX.ES
Goméz Alós, José Manuel (Univ. de Huelva)ALOS@CICA.ES
Gómez Estévez, Juan Luis (Univ. de Barcelona)

Gómez Ordoñez, José (Univ. de Sevilla)ORDONEZ@CICA.ES
Gonçalves Ferreira, Paula (Univ. de Lisboa)PGF@ALFA.CC.FC.UL.PT
González Fernández, David (Univ. de Valladolid)
González-Arroyo, Antonio (Univ. Autónoma de Madrid)ARROYO@EMDUAM
González Cinca R. (Univ. Politècnica de Catalunya)
González Tesedo, Luis Enrique (Univ. de Valladolid)DAVID@CPD.UVA.ES
Hernández García, Emilio (Univ. de las Islas Baleares)DFSGHG4@PS.UIB.ES
Hernández Machado, Aurora (Univ. de Barcelona)AURORA@EBUBECM1.ES
Lacasta Palacio, Ana Mª (Univ. Politécnica de Catalunya)ANNA@NOISE.ECM.UB.ES
Largo Cabrerizo, Julio (Univ. de Cantabria)
Leitão, Henrique (C.F.M.C.)LEITAO@ALFA.CC.FC.UL.PT
Lemos Fernández, Maria del Carmen (Univ. de Sevilla)LEMOS@CICA.ES
Leote de Carvalho, Raúl Jorge Fino (Univ de Bristol)PHRJC@SIVA.BRISTOL.AC.UK
López, Anselmo (UNED)
López de Haro, Mariano (UNAM ,Mexico)
López, Juan Manuel (Univ. de Cantabria)LMARTIN@CCUCVX.UNICAN.ES
Luque della Maggiore, Pablo (Univ. de Barcelona)PAU@EBUBECM1.BITNET
Mach, Jordi (Univ. de Barcelona)JORDI@DAPHNE.GF.UB.ES
Maeso Marcos, MªJesús (Univ. de Cantabria)JRS@CCUCVX.UNICAN.ES
Magdaleno, Fco. Javier (Univ. de Barcelona)ARMERO@UB.ES
Marro, Joaquín (Univ. de Granada)JMARRO@UGR.ES
Marín Porgueres, Concepción (Univ. de Extremadura)TEOR2@BA.UNEX.ES
Maza, Diego (Univ. de Navarra)CAPE@CPD.UNAV.ES
Mederos, Luis (CSIC)
Medina Alvarez, Juan Saturnino (UNED)
Mejías López, José Jorge (Univ. de Sevilla)MEJIAS@CICA.ES
Miguel López, MªCarmen (Univ. de Barcelona)CARMEN@ULYSES.UB.ES
Montagne Dubros, Raúl (Univ. de les Illes Balears)DFSRHM4@PS.UIB.ES
Montanero Hernández, José María (Univ. de Extremadura)TEOR2@BA.UNEX.ES
Morillo Buzón, Manuel (Univ. de Sevilla)MORILLO@CICA.ES
Mulero Díaz, Angel (Univ. de Extremadura)
Mustafa, Nasreldin (Univ. de Cantabria)MUSTAFAN@CCUCVX.UNICAN.ES
Noriega Antuña, José Manuel (Univ. de Oviedo)NORIEGA@PINON.CCU.UNIOVI.ES
Pagonabarraga Mora, Ignacio (Uni. de Barcelona)IGNACIO@ULYSES.UB.ES
Parga, Nestor (Univ. Autónoma de Madrid)PARGA@CCUAM3.SDI.UAM.ES
Pastor Ruiz, Juan Manuel (UNED)JMPASTOR@UNED.ES
Pesquera González, Luis (Univ. de Cantabria)PESQUERA@CCUCVX.UNICAN.ES
Piro, Oreste(Univ. de les Illes Balears)PIRO@HP1.UIB.ES
Prados Montaño, Antonio (Univ. de Sevilla)PRADOS@CICA.ES
Price, David L. (Argonne)
Rámirez de la Piscina Millán, Laureano (Univ. Politècnica de Catalunya)
Rascón Díaz, Carlos (Univ. Autónoma de Madrid)
Revuelta, José (Univ. de Cantabria)REVUELTA@CCUCVX.UNICAN.ES
Rodríguez , Miguel Angel (Univ. de Cantabria)RODRIGUEZ@CCUCVX.UNICAN.ES
Rodríguez Parrondo, Juan Manuel (Univ. Complutense)PARR@SENECA.FIS.UCM.ES
Rubí Capaceti, Miguel (Univ. de Barcelona)MIGUEL@ULYSES.FFN.UB.ES
Rubio Alvarez, Miguel Angel (UNED)MIGUEL.RUBIO@UNED.ES
Rull Fernández, Luis F. (Univ. de Sevilla)RULL@CICA.ES
Sagués Mestre, Francesc (Univ de Barcelona)UBAQFT09@PUIGMAL.CESCA.ES
San Martín, Jesús (UNED)JESUS.SANMARTIN@HUMAN.UNED.ES
San Miguel Ruibal, Maximino (Univ. de les Illes Balears)
Sanchez Rey, Bernardo (Univ. de Sevilla)BERNARDO@CICA.ES
Sánchez Sánchez, Angel (Univ. Carlos III)ANXO@ING.UC3M.ES
Sancho Herrero, José María (Univ. de Barcelona)JMSANCHO@EBUBECM1.BITNET
Sankovitch, Vladimir (UNED)
Santos Reyes, Andrés (Univ. de Extremadura)ANDRES@BA.UNEX.ES
Sierra, Germán (CSIC)SIERRA@CC.CSIC.ES
Sintes Olives, Tomás (Univ. de les Illes Balears)DFSTSO4@PS.UIB.ES
Solana Quirós, J.Ramón (Univ. de Cantabria)JRS@CCUCVX.UNICAN.ES
Somoza Gimeno, Andrés (Univ. Autónoma de Madrid)
Tarazona Lafarga, Pedro (Univ. Autónoma de Madrid)
Telo da Gama, Margarida (Univ. de Lisboa)MARGARID@PTIFM.BITNET
Toral Garcés, Raúl (Univ. de les Illes Balears)DFSRTG0@PS.UIB.ES
Torrent, Mª Carme (Univ. Politècnica de Catalunya)CARME@EBUBECM1.BITNET
Velasco, Enrique (Univ. Autónoma de Madrid)
Vives Santa-Eulalia, Eduard (Univ. de Barcelona)EDUARD@EBUBECM1.ES
Zúñiga, Ignacio (UNED)IZUNIGA@UNED.ES

ESTE LIBRO SE TERMINÓ DE IMPRIMIR
EN LOS TALLERES GRÁFICOS DE A. PINELO
EL DÍA 29 DE SEPTIEMBRE DE 1994,
SIENDO FESTIVIDAD
DE LOS
SANTOS ARCÁNGELES.

CAMAS - SEVILLA