

DIVISIÓN DE MECÁNICA ESTADÍSTICA, FÍSICA NO LINEAL Y SISTEMAS COMPLEJOS

CHARLAS DE DIVISIÓN AFA 2007

1 - Dinámica lenta y eventos de relajación en líquidos sobreenfriados y sistemas vítreos

G.A. Appignanesi, J.A. Rodríguez Fris, M.A. Frechero, L.M. Alarcón, R.A. Montani
Fisicoquímica, Depto. de Química, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca.

Los sistemas vítreos se caracterizan por presentar heterogeneidades dinámicas, con dinámicas que pueden variar órdenes de magnitud de una región a otra del sistema. Los tamaños y tiempos de vida de las regiones de relajación de dichos sistemas crecen al disminuir la temperatura, con lo cual a cierta temperatura la dinámica se vuelve dramáticamente lenta y la viscosidad crece abruptamente. En esta charla presentaremos evidencias que confirman y otorgan precisión a este escenario general (para sistemas que van desde formadores de vidrios modelo hasta agua sobreenfriada y sílice amorfa), determinando los eventos dinámicos relevantes a la relajación estructural y dilucidando la relación existente entre estructura local y dinámica. Asimismo, mostraremos cómo estos resultados permitieron establecer un nuevo observable experimental en experiencias de "single-molecule", el cual posibilita una resolución hasta el momento inalcanzable en este campo.

Referencias:

G.A. Appignanesi, J.A. Rodríguez Fris, R.A. Montani and W. Kob, Phys. Rev. Lett. 96, 057801 (2006).
G.A. Appignanesi, J.A. Rodríguez Fris and M.A. Frechero, Phys. Rev. Lett. 96, 237803 (2006).
J.A. Rodríguez Fris, G.A. Appignanesi, E. La Nave and F. Sciortino, Phys. Rev. E 75, 041501 (2007).
R.A.L. Vallée, M. Van der Auweraer, W. Paul and K. Binder, Phys. Rev. Lett. 97 217801 (2006)

2 - Descripción termodinámica de líquidos sobreenfriados: un solo estado o muchos estados metaestables?

T. Grigera

Universidad Nacional de La Plata, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), La Plata, Argentina

A nivel de modelos de campo medio (especialmente p-spin), el líquido sobreenfriado por debajo de la temperatura crítica de la teoría de Mode-Coupling está compuesto por un número exponencial de estados metaestables, separados por barreras infinitas de energía libre. La teoría del mosaico se basa en estas ideas para describir los líquidos sobreenfriados y su relajación. Según esta, la relajación en el líquido sobreenfriado está gobernada por dos mecanismos en mutua competencia: la tensión superficial, que se opone a la creación de excitaciones locales (es decir, otro estado metaestable), y la entropía, que favorece el reacondicionamiento configuracional de una dada región. Presentaremos los resultados de un experimento numérico diseñado para poner a prueba esta descripción. Dada una configuración de equilibrio por debajo de la temperatura de Mode-Coupling, se inmovilizan todas las partículas por fuera de una esfera y se estudia la termodinámica de esta esfera, sujeta al campo externo producido por las partículas inmovilizadas. A partir de una adecuada función de solapamiento, se intenta establecer si la esfera permanece siempre en el mismo estado, o si ocurren saltos entre estados metaestables.

Presentaremos los resultados obtenidos con distintas funciones de solapamiento, y mostraremos que es posible determinar una longitud de correlación estática para un líquido sobreenfriado.

3 - Entrelazamiento Cuántico a Temperatura Finita

R. Rossignoli¹, N. Canosa²

Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata, C.C.67, 1900 La Plata, Argentina. (1) CICPBA, (2) CONICET

El entrelazamiento cuántico denota las correlaciones sin análogo clásico que pueden ser exhibidas por sistemas cuánticos compuestos, y que resultan de fundamental interés en el campo de la Información Cuántica. En la presente contribución se discutirán algunos aspectos del entrelazamiento cuántico en cadenas de espines a temperatura finita recientemente investigados. En primer lugar, se examinará el entrelazamiento global en estos sistemas, el cual puede ser estimado en base a la evaluación de la negatividad. Esta es una medida aproximada computable de entrelazamiento bipartito apta para estados no puros. Se mostrará en particular que las correspondientes temperaturas límites de entrelazamiento son estrictamente independientes del campo magnético transversal aplicado en cadenas con interacción XXZ, a pesar de las transiciones exhibidas a temperatura cero, mientras que en cadenas anisotrópicas tipo XYZ estas tienden a aumentar con el campo, siendo en ambos casos superiores a las temperaturas límites para entrelazamiento de pares. Se discutirán también aspectos peculiares del entrelazamiento de pares en cadenas finitas con interacción de primeros vecinos tipo XX, donde es posible una evaluación exacta de la concurrencia por medio de la transformación de Jordan-Wigner y el empleo de estadística proyectada. Se mostrará que mientras a $T = 0$ existe entrelazamiento para cualquier separación del par en un determinado intervalo de campo, a temperatura finita el mismo es no nulo aún para campos arbitrariamente grandes, en acuerdo con los resultados globales anteriores, por debajo de una temperatura límite que decrece con la separación. Otros aspectos relacionados actualmente en investigación serán también discutidos.

4 - Propiedades Estadísticas del Movimiento Bacteriano bajo Restricción Energética

Gustavo J. Sibona

CONICET, Fac. de Matemat., Astronomía y Fis., Univ. Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina

La optimización de la utilización de los recursos energéticos cumple un papel fundamental en los organismos vivos. Esta optimización se manifiesta en la dinámica de los microorganismos marinos que se mueven en ambientes pobres en nutrientes. En este contexto, los sistemas de propulsión de dichos organismos deben haber evolucionado para mejorar la búsqueda de nuevas fuentes de nutrientes. En el presente trabajo analizamos las propiedades del movimiento bacteriano, basándonos en un modelo que describe el movimiento Browniano de objetos con depósitos internos de energía. Encontramos que existe un límite inferior en el tamaño de los microorganismos para obtener beneficios de un sistema propulsor. Otro resultado sorprendente es que el consumo en forma no cinética de la energía almacenada, optimiza el uso de los nutrientes, permitiendo a las bacterias aumentar el tiempo de búsqueda de nuevas fuentes energéticas.

5 - Quimioterapia: Mutación, Heterogeneidad y Resistencia en un Modelo Extendido del Cáncer

S.A. Menchón

CONICET, Fac. de Matemat., Astronomía y Fis., Univ. Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina

Una de las principales causas por la cual la quimioterapia falla como tratamiento clínico contra el cáncer es la aparición de resistencia. Hay dos tipos de resistencia: la intrínseca, que es ocasionada por

un daño genético, y la adquirida, que es producida por la interacción entre la droga y la célula. Para una descripción fidedigna de la evolución del tumor bajo terapia es crucial que el modelo describa los aspectos espaciales de las interacciones relevantes. Aquí presentamos un modelo basado en interacciones locales para estudiar la acción de la quimioterapia sobre un tumor homogéneo en función de la sensibilidad de las células al tratamiento y de las dosis aplicadas. Posteriormente ampliamos nuestro modelo para analizar la aparición de resistencia tanto intrínseca como adquirida y estudiamos la evolución del tumor heterogéneo.

6 - Validación numérica de la ecuación compleja de Swift Hohenberg para láser

J. Pedrosa², C. Martel¹ y M. Hoyuelos²

(2) *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Mar del Plata, Funes 3350, 7600 Mar del Plata, Argentina.*

(1) *Departamento de Fundamentos Matemáticos, ETSI Aeronáuticos, Universidad Politécnica de Madrid, 28040 Madrid, España.*

La ecuación compleja de Swift-Hohenberg (CSH) es una ecuación de parámetro de orden genérica que se aplica a muchos sistemas físicos. En el caso de láser de clase C, puede obtenerse a partir de las ecuaciones de Maxwell Bloch (MB) usando las suposiciones de amplitud suave y desintonía (detuning) pequeña. La ecuación CSH resultante contiene inevitablemente términos de diferente orden de magnitud, asociados al dominio de efectos de dispersión sobre difusión. Se realizó una comprobación numérica de la precisión de la ecuación CSH como ecuación de parámetro de orden que describe la dinámica de las ecuaciones de MB. Se comprobó que la diferencia entre las soluciones de la ecuación CSH y las ecuaciones de MB crece como la distancia al umbral de emisión, parámetro que se considera pequeño en la deducción de la ecuación CSH.

7 - Desarrollo del patrón de nervaduras: un aporte desde la Física

M. F. Laguna¹, S. Bohn² y E. A. Jagla¹

(1) *Centro Atómico Bariloche, Instituto Balseiro, (8400) Bariloche, Argentina*

(2) *Laboratoire de Physique Statistique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France.*

Los patrones de nervaduras son diferentes de una hoja a otra, aún en una misma planta, pero comparten algunas características comunes. Una es la naturaleza jerárquica de las nervaduras, determinada por su radio y que tiene origen en la formación sucesiva de las nervaduras durante el crecimiento de la hoja. Otra es la abundancia de caminos cerrados: el patrón de nervaduras divide a la hoja en pequeñas superficies poligonales. Existen trabajos experimentales que muestran que un gel secado bajo condiciones controladas desarrolla un patrón de fracturas similar al de las nervaduras [1]. Por otro lado, imágenes tomadas en las primeras etapas de la formación de una nervadura sugieren que, en las etapas iniciales del desarrollo, las células que la conforman se distinguen de las restantes solo porque se encuentran deformadas mecánicamente [2]. Estos hechos se tomaron como evidencia de que las tensiones mecánicas jugarían un rol fundamental en el desarrollo del patrón de nervaduras y dieron origen a una teoría que propone como ingrediente principal en la aparición y desarrollo de dicho patrón, la existencia de un campo de tensiones generado durante el crecimiento de la hoja [1,3]. Para explorar esta hipótesis en detalle, desarrollamos un modelo elástico que describe una hoja en crecimiento y realizamos un estudio numérico utilizando el método de campo de fase. Nuestro modelo da lugar a patrones que son cualitativa y cuantitativamente comparables con los de las hojas reales.

[1] Y. Couder et al., *Eur. Phys. J. B* 28, 135 (2002).

[2] T. Nelson y N. Dengler, *The Plant Cell* 9, 1121 (1997).

[3] S. Bohn et al., Phys. Rev. E 65, 061914 (2002).

8 - Estimando la calidad de las “oscilaciones estocásticas”

Guillermo Abramson

Grupo de Física Estadística e Interdisciplinaria Centro Atómico Bariloche, (8400) Bariloche, Argentina

Ciertos sistemas estocásticos tienen la peculiaridad de exhibir un comportamiento aproximadamente oscilatorio aún cuando el sistema determinista correspondiente a su límite macroscópico no es oscilatorio. Veremos cómo se puede caracterizar este comportamiento para sistemas de dos componentes, del tipo generalmente usado en dinámica de poblaciones, cinética química, epidemiología, etc. Como se trata de oscilaciones estocásticas, es importante distinguirlas del ruido propio de la dinámica. Si bien la motivación para este estudio surgió de la existencia de epidemias cuasi-cíclicas, los resultados son de aplicación mucho más general.

9 - Sistemas caóticos acoplados con retardos aleatorios: conectividad, topología y sincronización.

Arturo C. Martí

Instituto de Física, Facultad de Ciencias, Montevideo, Uruguay.

Los sistemas compuestos por muchas unidades no lineales acopladas muestran propiedades más complejas que las de cada unidad particular, típicamente, exhiben fenómenos relacionados con la sincronización. Estos modelos son ampliamente utilizados para describir una gran variedad de fenómenos en Biología, Química y Física. Entre éstos podemos destacar poblaciones de luciérnagas oscilando sincrónicamente, arreglos de láseres, ritmos circadianos y células cardíacas. El efecto del retardo temporal de las interacciones, que proviene de considerar velocidades finitas en la propagación de la información, es determinante en la dinámica de estos sistemas. En esta presentación discutimos la influencia de los retardos aleatorios en la sincronización de mapas logísticos acoplados interactuando sobre redes complejas. Consideramos diferentes distribuciones de retardos y diferentes topologías. Dependiendo de la intensidad del acoplamiento encontramos diferentes comportamientos, la coherencia aumenta o disminuye con el número de vecinos y, sorprendentemente, para determinadas intensidades del acoplamiento existe un número óptimo de vecinos que muestra un máximo en la coherencia.

Referencias:

Arturo C. Martí, M. Ponce, C. Masoller, Steady-state stabilization due to random delays in maps with self-feedback loops and in globally delayed-coupled maps, *Physical Review E*, 72, 066217 (2005).

Cristina Masoller and Arturo C. Martí, Random Delays and the Synchronization of Chaotic Maps, *Phys. Rev. Lett.* 94, 134102 (2005).

Arturo C. Martí, Marcelo Ponce and Cristina Masoller, Chaotic maps coupled with random delays: connectivity, topology, and network propensity for synchronization, *Physica A*, 371, 104 (2006).

10 - Clasificación de ruidos empleando el plano Entropía-Complejidad.

Hilda A. Larrondo (*)

Facultad de Ingeniería - Universidad Nacional de Mar del Plata Juan B. Justo 4302 - B7608FDQ.

Los sistemas caóticos deterministas comparten con los procesos estocásticos propiedades que los hacen indistinguibles en muchos aspectos. Esa similitud es precisamente la que hace posible utilizar pseudo ruidos generados por sistemas caóticos en lugar de señales estocásticas, en múltiples aplicaciones: encriptado de mensajes en comunicaciones digitales, reducción de la interferencia electro-

magnética, filtrado por muestreo pseudoaleatorio, etc. Sin embargo el proceso de generación del caos determinista deja su sello particular en la señal generada. En este trabajo se presenta un espacio de representación entropía-complejidad que permite caracterizar y diferenciar los ruidos tanto caóticos como estocásticos. Empleando este espacio se evalúa además la eficiencia de distintas técnicas de randomización que pueden aplicarse a sistemas caóticos para aproximarlos a sistemas estocásticos ideales.

(*) Trabajo en colaboración con O. A. Rosso, L. De Micco, C. M. González, M. T. Martín, A. Plastino

11 - Percolación de partículas adsorbidas sobre superficies en estado de equilibrio

M. Cecilia Giménez, A. José Ramirez-Pastor and Félix D. Nieto

Departamento de Física, Universidad Nacional de San Luis, CONICET,

Chacabuco 917, D5700BWS, San Luis, Argentina

cecigime@unsl.edu.ar; fnieto@unsl.edu.ar; antorami@unsl.edu.ar

Presentamos un modelo para investigar el proceso de adsorción de monómeros interactuantes sobre redes cuadradas, triangulares y hexagonales y estudiamos las propiedades de percolación de la fase adsorbida en estado de equilibrio. También estudiamos la adsorción de dímeros interactuantes en redes cuadradas y la de monómeros adsorbidos sobre superficies heterogéneas (con dos clases de sitios de adsorción de diferente energía) sin interacción lateral.

Utilizando simulaciones de Monte Carlo y teoría de escaleo de tamaño finito, obtenemos los umbrales de percolación para diferentes valores de cubrimiento y temperatura. A partir de estos datos, se obtiene una curva crítica en el espacio $\theta - T$.

12 - Enantioselectividad de especies quirales mediante la preadsorción de patrones superficiales selectivos

Raúl H. López¹, F. Romá¹, and G. Zgrablich¹, W.T. Tysoe² and D.J. Stacchiola²

(1) Laboratorio de Ciencias de Superficies y Medios Porosos, Dpto. de Física, Universidad Nacional de San Luis, San Luis, Argentina - CONICET

(2) Department of Chemistry and Laboratory for Surface Studies University of Wisconsin-Milwaukee

Los compuestos químicos enantioméricamente puros son de importancia central en la industria farmacéutica, ya que frecuentemente sólo uno de los enantiómeros de una especie quiral posee las propiedades terapéuticas buscadas, mientras que su imagen especular puede incluso producir efectos nocivos. En este trabajo se presenta un panorama de los métodos que se utilizan para la separación catalítica heterogénea de enantiómeros opuestos de especies quirales, para luego focalizarse en el Template Mechanism. Se presentan y discuten, tanto los experimentos que se realizan para detectar la enantioselectividad, como los modelos que se utilizan para lograr un entendimiento del proceso a nivel molecular.

13 - Título a confirmar

Claudio Dorso

(1) Departamento de Física, UBA