

Charlas de la División MECÁNICA ESTADÍSTICA, FÍSICA NO LINEAL Y SISTEMAS COMPLEJOS

Cronograma

Sesión conjunta con la DMC

Horario	Martes
10:30-10:55	F. Romá
10:55-11:20	M. J. Sánchez
11:20-11:45	O. Billoni
11:45-12:10	C. Pastorino
12:10-12:35	M. Zuriaga

Horario	Miércoles	Viernes
10:30-11:00	A.J. Banchio	G Fabricius
11:00-11:30	V.D. Pereyra	P.M. Gleiser
11:30-12:00	J.F. Valdés	L. Alarcón
12:00-12:30	H.G. Solari	C.G. Sánchez

Martes 26 de setiembre Sesión conjunta con la División Materia Condensada

10:30hs a 10:55hs

Estudio del defecto de energía en el modelo de Edwards-Anderson $\pm J$:
influencia de la topología del estado fundamental

F. Romá¹, S. Risau-Gusman², A.J. Ramirez-Pastor³, F. Nieto³ y E.E. Vogel⁴

¹ CAB, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina. Departamento de Física, UNSL, Chacabuco 917, 5700 San Luis, Argentina. CONICET.

² CAB, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina. CONICET.

³ Departamento de Física, UNSL, Chacabuco 917, 5700 San Luis, Argentina. CONICET.

⁴ Departamento de Física, Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco, Chile
E-mails: froma@unsl.edu.ar, srisau@cab.cnea.gov.ar, antorami@unsl.edu.ar,
fnieto@unsl.edu.ar, ee_vogel@ufro.cl

En este trabajo hemos estudiado la estabilidad de la fase de baja temperatura del modelo de vidrio de espín de Edwards-Anderson. Para una distribución bimodal de enlaces $\pm J$, un análisis topológico del estado fundamental permite separar el sistema en dos regiones diferentes: el *backbone* (o *Red Rígida*) y su *entorno*. Nosotros hemos determinado que la superficie de las excitaciones (defecto de energía) inducidas por un cambio en las condiciones de contorno, es muy diferente en cada región. En particular encontramos que en 3D, el backbone es tan estable como un ferromagneto, siendo su entorno significativamente inestable. Estos dos comportamientos opuestos, junto con la existencia de correlaciones, producen el pequeño defecto de energía global reportado en la literatura y sugieren la existencia de una $T_c > 0$ para 3D. Por otro lado en 2D, nuestros cálculos indican que en el límite termodinámico, el defecto de energía evita el backbone. Este último comportamiento sugiere que $T_c = 0$ en esta dimensión. Para ambas dimensiones, nuestros cálculos nos han permitido determinar la dimensión fractal de la superficie de las excitaciones de energía.

10:55hs a 11:20hs

Efectos de la temperatura y el voltaje de bias sobre distribución de conductancia en cables cuánticos desordenados.

Federico Foieri¹, María José Sánchez², Liliana Arrachea³ y Victor A. Gopar⁴

¹*Departamento de Física “J. J. Giambiagi” FCEyN, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria Pab.I, (1428) Buenos Aires, Argentina*

²*Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Bustillo 9500 (8400), Bariloche, Argentina*

³*Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Zaragoza, Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza, España e Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos, Universidad de Zaragoza, Corona de Aragón 42, 50009 Zaragoza, España*

⁴*Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos, Universidad de Zaragoza, Corona de Aragón 42, 50009 Zaragoza, España*

La presencia de impurezas y el desorden otorgan un carácter estocástico al transporte electrónico coherente en la escala meso–nanoscópica. En el caso de cables o hilos, existen estudios teóricos que analizan las propiedades estadísticas de la conductancia G , pero éstos no incorporan el efecto conjunto de la temperatura T y el voltaje de bias V , hecho limita la interpretación de numerosos experimentos que usualmente se realizan para un amplio rango de T y V . Recientemente hemos obtenido la distribución completa de la conductancia $P(G(V,T))$ para un cable unidimensional desordenado a temperatura T y sometido a un voltaje de bias V . En esta charla contaré estos resultados y comentaré algunos experimentos recientes de transporte en cables, polímeros conjugados y nanotubos de pared única.

11:20hs a 11:45hs

Distribución de tiempos de inversión en una partícula monodominio

Orlando V. Billoni¹ y Daniel A. Stariolo²

¹*FaMAF-UNC*

²*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul
CP 15051, 91501-970 Porto Alegre RS, Brazil*

E-mails: billoni@famaf.unc.edu.ar, stariolo@if.ufrgs.br

El estudio de un partícula magnética monodominio con anisotropía uniaxial concita la atención de investigadores debido a su importancia en sistemas de almacenamiento magnético. El problema de la inversión térmica de estas partículas a escalas de tiempos muy cortos -nanosegundos- adquiere relevancia actualmente debido al incremento en la densidad de almacenamiento y en la velocidad del lectura y escritura los discos rígidos. En el marco del modelo de Néel-Brown la inversión térmica de una partícula está descrita por una dinámica de Langevin obtenida a partir de la ecuación Landau-Lifshitz-Gilbert donde los tiempos característicos de inversión se obtienen de la ecuación de Fokker Planck asociada. En este trabajo realizamos simulaciones numéricas de esta dinámica mediante un algoritmo de Monte Carlo a tiempo real [1] para obtener distribuciones de tiempos de inversión en partículas monodominio con y sin campo aplicado. Encontramos que a este método es adecuado para simular distribuciones de tiempos de inversión y que cuando los resultados en el límite de barreras bajas son comparados con cálculos analíticos estas distribuciones pueden caracterizarse con dos tiempos de relajación.

[1] ”Mapping the Monte Carlo Scheme to Langevin Dynamics: A Fokker-Planck Approach” X. Z. Cheng, M. B. Jalil, Hwee Kuan Lee and Yutaka Okabe, Phys. Rev. Lett, 96, 067208 (2006).

11:45hs a 12:10hs

Simulaciones de interfases poliméricas fuera del equilibrio, con aplicaciones a Nano- y Micro-fluídica

Claudio Pastorino¹

CONICET-CNEA, Centro Atómico Constituyentes

Con el creciente desarrollo de aplicaciones de Nano- y Microfluídica, en las cuales se intenta automatizar reacciones químicas y procesos bioquímicos complejos, creció también el interés en el estudio básico de fluidos a muy pequeñas escalas (pico-litros). En este rango espacial, las superficies influyen enormemente el comportamiento en volumen de los fluidos. Se mostrarán simulaciones de dinámica molecular en, y fuera de equilibrio para el estudio de flujos de líquidos poliméricos sobre sustratos blandos (polymer brushes). Interesa también la interfase polimérica, cuyas propiedades cambian en función del número de moléculas por unidad de áreas fijados a la pared rígida del sustrato. Las interacciones de las moléculas se describieron con modelos de grano grueso sencillos, que permiten el estudio de estos sistemas a escalas espaciales mayores y por períodos de tiempo más prolongados que los modelos atomísticos. Se analizarán las propiedades de las interfases en flujos de Couette, Poiseuille y gotas poliméricas en función de los parámetros de interés del sistema.

12:10hs a 12:35hs

Polimorfismo y Poliamorfismo en Alcanos Clorados

N. Veglio, M. Zuriaga, G.J. Cuello y F. J. Bermejo.

Facultad de Matemática, Astronomía y Física, FaMAF, Universidad Nacional de Córdoba

Los alcanos (clorados) al igual que muchos cristales moleculares pueden existir en mas de una forma en estado sólido (polimorfismo) a veces dependiendo de la historia térmica previa. Son además lí quidos buenos formadores de vidrios. Los compuestos estudiados, Clorohexano y Tricloropropano presentan comportamientos similares debido a su historia térmica. Enfriados bruscamente muestran una transición glassy alrededor de 120 K y evolucionan hacia la fase estable de alta temperatura atravesando una serie de "fases" metaestables. Combinando distintas técnicas experimentales se ha intentado una caracterización de las fases de estos compuestos y dilucidar la existencia del fenómeno de poliamorfismo observado en muy pocos compuestos orgánicos. Las técnicas aplicadas han sido: Análisis Térmico Diferencial, que permitió determinar la existencia de diferentes fases y su correspondientes temperatura de transición; Resonancia Cuadrupolar Nuclear que dio información acerca de la estructura, la dinámica de los compuestos y mostró las regiones de coexistencia de fases y Scattering de Neutrones que confirma la presencia de fases desordenadas y el tipo de desorden.

Miércoles 27 de setiembre

10:30hs a 11:00hs

Propiedades de transporte en suspensiones coloidales: un estudio con dinámica de Stokes.

Adolfo J. Banchio¹

¹ *CONICET y FaMAF, Universidad Nacional de Córdoba*
E-mails: banchio@famaf.unc.edu.ar

Los efectos de las interacciones hidrodinámicas mediadas por el solvente son de fundamental importancia en la dinámica y reología de dispersiones coloidales. Debido a que éstas interacciones representan un problema de muchos cuerpos, dificultando su tratamiento, no son muchos los estudios teóricos existentes que se encarguen de la dinámica a tiempos largos en sistemas coloidales incluyendo efectos hidrodinámicos. En esta charla se presentarán resultados, obtenidos mediante simulaciones del tipo dinámica de Stokes (incluye interacciones hidrodinámicas), para las propiedades de transporte a tiempos cortos y largos, en suspensiones de esferas duras cargadas y neutras. Se hará especial énfasis en la comparación entre estos dos sistemas modelo. Se compararán los resultados de las simulaciones numéricas con teorías disponibles y datos experimentales.

11:00hs a 11:30hs

Metodo preciso para el cálculo de la función de estado.

R. E. Belardinelli¹ y V. D. Pereyra¹

¹ *Departamento de Física, Laboratorio de Ciencias de Superficie,*
Universidad Nacional de San Luis, CONICET, Chacabuco 917, 5700 San Luis, Argentina
E-mails: rolybelar@unsl.edu.ar, vdpereyra@unsl.edu.ar

En este trabajo se presenta un nuevo método para el cálculo de la densidad de estado en modelos mecánico estadísticos. En base al trabajo realizado por F. Wang y D.P. Landau, (Phys. Rev. Lett. 86, 2050 (2001)), se realiza una caminata al azar por el espacio de las energías del sistema, de manera que todos los estados son visitados de igual forma (equiprobable). La aceptación de un nuevo estado se realiza de acuerdo a la probabilidad de transición $p(E_i \rightarrow E_f) = \min[1, \frac{g(E_i)}{g(E_f)}]$ donde $E_i(E_f)$ son las energías de los estados inicial (final), respectivamente. Siempre que un intento es realizado, se incrementa la cantidad $\log(g(E_i)) = \log(g(E_i)) + F(t)$, donde $F(t) = N/L^2/t$ es un parámetro dependiente del tiempo, L el tamaño de la red y N el rango de energía. Este proceso es realizado hasta que F(t) alcance un determinado F_{final} . Como consecuencia de ello, la densidad de estado $g_m(E, t)$, se aproxima en forma asintótica $\propto t^{-1/2}$ al valor exacto $g_{ex}(E)$ evitando, de esta manera, la saturación en el error. La ventajas del método son considerables ya además de permitir todos los observables a partir del cálculo de la función de partición, se puede predecir en forma precisa el tiempo de cálculo y el error, ventajas que no presentan los metodos conocidos hasta ahora.

11:30hs a 12:00hs

Modelo de Ising $\pm J$ sobre la red Dice

J.F. Valdés¹, W. Lebrecht¹ y E.E. Vogel¹

¹ *Departamento de Ciencias Físicas, Universidad de La Frontera, Casilla 54-D, Temuco, Chile.*
E-mails: jvaldes@ufro.cl, wlebrecht@ufro.cl, e_evfogel@ufro.cl

En el presente trabajo se informa sobre los resultados de magnitudes físicas y topológicas relacionadas al nivel fundamental del modelo de Ising $\pm J$ para espines ubicados en los sitios de la red Dice. Se adaptó el método de la subred introducida previamente para las redes Kagomé y Five-points-star [1] con el objeto de caracterizar las propiedades mencionadas anteriormente. Consideramos muestras de tamaño N , donde N representa el número total de espines, restringidas a condiciones periódicas de borde. Sobre estos sistemas se distribuyen aleatoriamente interacciones $\pm J$ a primeros vecinos ($+J$: antiferromagnética (AF), $-J$: ferromagnética (F)). La concentración de interacciones F, x , se varía en el intervalo $[0.0,1.0]$. Usamos dos métodos diferentes para obtener los resultados presentados aquí. En primer lugar, mediante un análisis combinatorio y de probabilidades se generan funciones de peso que permiten calcular propiedades tales como: distribución de plaquetas frustradas, longitud de frustración, energía por enlace y fracción de enlaces no frustrados para el nivel fundamental completo; estas expresiones analíticas se presentan como funciones de la concentración de enlaces ferromagnéticos x . En segundo lugar, a través de un método numérico exacto asociado a réplicas múltiples de todos los estados del nivel fundamental, se calculan las variables enunciadas anteriormente. Estos resultados se comparan con similares obtenidos previamente para otras redes, tales como: cuadrada (SL), hexagonal (HL), triangular (TL), Kagomé (KL), Five-points-star (FL) y cuadrada-octogonal (4; 82) [2].

[1] W. Lebrecht, J.F. Valdés, E.E. Vogel, Physica A 323 (2003) 466.

[2] E.E. Vogel, J.F. Valdés, W. Lebrecht, Physica A (2006) en prensa.

12:00hs a 12:30hs

Ecuaciones de Langevin en dinámica poblacional: ¿una ilusión universal?

Hernán G Solari¹

¹ *Departamento de Física, FCEN - Universidad de Buenos Aires*

E-mails: hgsolari@gmail.com

En numerosos problemas de dinámica poblacional, donde el espacio de fases es $(Z^+ \cup \{0\})^n$, se han planteado descripciones de la dinámica en términos de ecuaciones de Langevin, interpretadas en el sentido de Itô, como sustitutos (algunas veces llamados “exactos”) de la dinámica poblacional estocástica correspondiente.

La intuición normalmente está alimentada por simulaciones numéricas de promedios de observables y manipulaciones de la ecuación maestra, que en algunos casos puede considerarse una heurística y en otros no.

Me propongo discutir las dos heurísticas más conocidas (aproximación de difusión y expansión Ω de van Kampen) y también la heurística de Kurtz, única que ha sido elevada a la calidad de teorema. Presentaré también un resultado nuestro (1), que sugiere que algunas propiedades solo dependen de la existencia de sub/super-martingalas y no de otros detalles.

Finalmente mostraré una estadística en el caso de deposición de átomos en “superficies unidimensionales” que claramente distingue el proceso de Langevin del proceso de Poisson y su proceso de Monte Carlo inmerso en un caso donde se había “demostrado” la exactitud del reemplazo de Monte Carlo por Langevin (Phys. Rev. **E 72**, 051103 (2005)).

(1) Blowing-up of deterministic fixed points in stochastic population dynamics (preprint). MA Natiello y HG Solari.

Viernes 29 de setiembre

10:30hs a 11:00hs

Correlaciones en la dinámica de los sistemas vítreos.

Gabriel Fabricius¹ y Daniel A. Stariolo²

¹*Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Sucursal 4, CC 16 (1900) La Plata, Argentina.*

²*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul
CP 15051, 91501-970 Porto Alegre RS, Brazil*

E-mails: fabriciu@fisica.unlp.edu.ar, stariolo@if.ufrgs.br

Por qué la dinámica de los líquidos formadores de vidrios se enlentece tan violentamente al aproximarse a la temperatura de transición vítrea T_g ? Pese a todos los intentos que ha habido en los últimos años por responder a esta pregunta, sigue sin haber una teoría que aporte una explicación completa a este fenómeno. Existen dos enfoques muy diferentes al problema de la transición vítrea que han sido objeto de numerosos estudios teóricos. Por un lado se ha intentado asociar el cambio brusco en la dinámica con las propiedades topológicas del paisaje de energía que recorre el sistema en función de la temperatura. Más recientemente la actividad se ha inclinado a tratar de vincular la dificultad de relajar del sistema con la existencia de heterogeneidades en la dinámica que cobrarían importancia al bajar la temperatura. Estas heterogeneidades estarían caracterizadas por una longitud de correlación dinámica cuyo comportamiento (creciente) en función de la temperatura es el punto central de este enfoque. Sin embargo la obtención de esta longitud de correlación, ya sea a partir de simulaciones, de estudios teóricos o experimentales es un punto delicado y controvertido [1,2,3]. En el presente trabajo exploraremos la vinculación entre ambos enfoques. Con este propósito, realizamos simulaciones de dinámica molecular en un sistema binario de Lennard-Jones a diferentes temperaturas. A partir de la definición de funciones de correlación entre mínimos locales de energía podemos detectar la existencia de "metacuencas" que contienen varios mínimos donde el sistema va quedando confinado tiempos cada vez mayores al bajar la temperatura. Por otra parte estudiamos para el mismo sistema las correlaciones espaciales y temporales de la densidad a partir de funciones de correlación de 4 puntos con el objeto de vincular las heterogeneidades dinámicas espaciales con las del paisaje energético.

[1] C.Toninelli *et al.* *Phys.Rev.E* **71** 041505 (2005)

[2] L.Berthier *et al.* cond-mat/0512379

[3] D.Chandler *et al.* cond-mat/0605084

11:00hs a 11:30hs

Violación de la relación de fluctuación-disipación, en la dinámica fuera del equilibrio del modelo de Edwards-Anderson $\pm J$

F. Romá¹, S. Bustingorry², P. M. Gleiser² y D. Domínguez ²

¹ *CAB, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina. Departamento de Física, UNSL, Chacabuco 917, 5700 San Luis, Argentina. CONICET.*

² *CAB, 8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina. CONICET.
E-mails: gleiser@cab.cnea.gov.ar*

En este trabajo hemos analizado la violación de la relación de fluctuación-disipación (FDT) en el modelo de vidrio de espín de Edwards-Anderson $\pm J$ en 3D. A partir del análisis de la densidad

de probabilidad de que un espín tenga una dada correlación y respuesta, mostramos la existencia de heterogeneidades en la dinámica fuera del equilibrio a una temperatura por debajo de la crítica. En particular, encontramos que el sistema posee dos regiones diferentes: en una de ellas se viola FDT (como si hubiese un proceso de coarsening) y en la otra se cumple esta relación (como si el sistema estuviese en su fase paramagnética). Para cada muestra del desorden, dichas regiones pueden ser identificadas a partir de un análisis topológico adecuado del estado fundamental. Esto demuestra que existe una fuerte conexión entre la dinámica del sistema y su nivel fundamental.

11:30hs a 12:00hs

Buscando regiones “calientes” en un líquido sobreenfriado.

Laureano Alarcón¹ y Gustavo Appignanesi

¹ *CONICET, Depto. de Qca., UNS*
E-mails: appignan@criba.edu.ar

De acuerdo con de la teoría de Adam y Gibbs propuesta hace unos cuarenta años, los líquidos sobreenfriados y vidrios resultan dinámicamente heterogéneos, presentando zonas cuya dinámica es (órdenes de magnitud) más rápida que el resto del sistema. El tamaño y los tiempos de vida de de estas regiones aumenta significativamente al sobreenfriar tal como lo prescribe dicha teoría, dado que estos eventos de relajación se tornan cada vez más lentos al requerir de la participación cooperativa de un número creciente de partículas (regiones de reacomodación cooperativa), con la consiguiente pérdida de entropía configuracional.

En esta charla describiremos un resultado que permite identificar y dotar de sentido físico a dichas regiones de reacomodación cooperativa y presentaremos un método para detectar regiones “calientes” o “activas” en sistemas vítreos.

Referencias: G.A. Appignanesi, J.A. Rodríguez Fris and M.A. Frechero, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 237803 (2006). G.A. Appignanesi, J.A. Rodríguez Fris, R.A. Montani and W. Kob, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 057801 (2006).

12:00hs a 12:30hs

Diámica electrónica en sistemas nanoscópicos fuera del equilibrio

Cristián G. Sánchez¹

¹ *Unidad de Matemática y Física, Facultad de Ciencias Químicas,*
Universidad Nacional de Córdoba E-mails: cristian.g.sanchez@gmail.com

Dentro de los sistemas de interés nanotecnológico la relajación de excitaciones ópticas en nanopartículas metálicas y la conducción a través de dispositivos moleculares representan dos de los más estudiados. Las posibles aplicaciones de interés de estos sistemas dependen crucialmente de sus propiedades de no equilibrio: la respuesta dinámica de los electrones a campos electromagnéticos y sus mecanismos de relajación. En esta charla voy a mostrar como es posible estudiar estos problemas utilizando modelos simples de “tight-binding” dependiente del tiempo. Mostraré algunos resultados sobre las características de las excitaciones plasmónicas en nanoagregados metálicos y su dependencia con la estructura atómica del agregado y la conductancia de una molécula modelo obtenida a partir de simulaciones dinámicas.