

**Tesis Doctoral.**

**Desarrollo y estudio modelos en Mecánica  
Estadística y Física del Estado Sólido.**

**Tesista: Roberto Adrián Monetti**

**Director: Prof. Dr. Ezequiel V. Albano.**

*Facultad de Ciencias Exactas.  
U.N.L.P.*

*Abril 1995.*



**FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS  
BIBLIOTECA DEL DEPARTAMENTO  
DE FISICA**

*A mis padres, a mis abuelos y a Vero.*

## INDICE

● Introducción. Aspectos Generales. . . . .	1
● Capítulo 1. Modelo Estandar de Percolación. . . . .	5
1.1 Introducción. . . . .	5
1.2 Introducción Teórica. . . . .	8
1.3 Resultados y su discusión. . . . .	24
Comportamiento crítico en una geometría rectangular $L \times M$ . . . . .	24
I. La distribución de largos de los clusters de percolación a $p_c$ . . . . .	26
II. Los perfiles de densidad. . . . .	30
III. La función de correlación a $p_c$ . . . . .	35
1.4 Conclusiones. . . . .	44
● Capítulo 2. Modelo de Adsorción de Dímeros Calientes. . . . .	47
2.1 Introducción. . . . .	47
2.2 Introducción Teórica. . . . .	50
2.3 Resultados y su discusión. . . . .	55
I. Comportamiento crítico del modelo. . . . .	55
II. Análisis de los efectos de bordes en el modelo. . . . .	64
III. Estudio de las propiedades de transporte en el modelo de deposición de dímeros muy calientes. . . . .	67
2.4 Conclusiones. . . . .	80
● Capítulo 3. Transiciones irreversibles en sistemas dinámicos. . . . .	83
3.1 Introducción. . . . .	83
3.2 Introducción Teórica. . . . .	87

3.3 Resultados y su discusión. . . . .	94
I. Análisis epidémico y estudio de la estabilidad dinámica en el modelo 2JV estocástico. . . . .	96
II. Análisis epidémico y estudio de la estabilidad dinámica en el modelo 1JV estocástico. . . . .	110
3.4 Conclusiones. . . . .	125
● Capítulo 4. Conclusiones Generales. . . . .	129

## Resumen

En el presente trabajo de tesis se estudian diversos modelos de sistemas desordenados, mediante el uso intensivo de simulaciones Monte Carlo. El análisis de propiedades estáticas y dinámicas, permite lograr un entendimiento más profundo de los procesos que se simulan.

Con el propósito de estudiar la influencia que los defectos superficiales de tipo escalón ejercen sobre una monocapa adsorbida, se analiza el comportamiento crítico del modelo estandard de percolación en una geometría rectangular. Se calculan algunas propiedades de interés, como la función de distribución de largos de clusters de percolación a  $p_c$ , los perfiles de densidad y la función de correlación. El efecto ejercido por los bordes de la muestra, es entendido en base al uso de una hipótesis de escala denominada *multiscaling*.

Observaciones muy recientes basadas en imágenes STM, han demostrado que moléculas de oxígeno se quimisorben disociativamente sobre una superficie de Al(111) y que al menos parte del exceso de energía, aparece como grados de libertad paralelos a la superficie, dando lugar a un movimiento traslacional durante el cual esta energía es disipada. Estas observaciones, motivaron el desarrollo del modelo de adsorción de dímeros calientes. El estudio del comportamiento crítico de este modelo, lo sitúa dentro de la clase de universalidad del modelo estandard de percolación. Con el propósito de simular la preferencia observada para la adsorción de monómeros sobre los bordes de los escalones, se estudia el modelo de deposición de dímeros muy calientes. El análisis de las propiedades de transporte sobre los clusters de percolación generados mediante este mecanismo, conduce a interesantes resultados, que se diferencian tanto de las propiedades dinámicas del modelo estandard de percolación, como de dichas propiedades dinámicas en un espacio homogéneo.

Finalmente se estudian dos modelos de sistemas dinámicos que exhiben transiciones de fase irreversibles. Estos modelos han sido derivados de modelos autómatas celulares (el "Juego de la Vida" de J. Conway y el "Juego unidimensional de la Vida"), con el propósito de analizar la conexión entre las dinámicas fuera del equilibrio que presentan y otras dinámicas fuera del equilibrio en procesos disipativos. Los modelos son denominados modelo 2JV estocástico y modelo 1JV estocástico. El estudio del comportamiento crítico de ambos modelos, se efectúa utilizando la técnica del análisis epidémico. Se realiza además un análisis de la estabilidad dinámica de los sistemas, mediante el uso de la técnica de la propagación del daño. El modelo 2JV estocástico presenta una transición irreversible "vida-muerte" de primer orden. La "fase vida" exhibe un comportamiento caótico. El modelo 1JV estocástico presenta un comportamiento más complejo que el modelo 2JV estocástico. Se hallan tres fases llamadas "saturación, vida y muerte", de manera que dos transiciones irreversibles son posibles: "vida-saturación" y "vida-muerte". El análisis del comportamiento crítico, indica que el modelo 1JV estocástico pertenece a la clase de universalidad de la percolación dirigida. Un análisis de la estabilidad dinámica del sistema, indica que la fase vida presenta dos regiones caóticas y una frozen.

# Introducción: Aspectos Generales.

Estructuras desordenadas generadas por procesos aleatorios, que son autosimilares sobre ciertas escalas de longitud y tiempo son muy comunes en la naturaleza. Dichas estructuras, pueden ser encontradas desde las más grandes a las más pequeñas escalas: en galaxias y paisajes, en terremotos y fracturas, en agregados y coloides, en superficies rugosas e interfaces, en vidrios y polímeros, en proteínas y otras grandes moléculas, etc. En los últimos años una amplia variedad de estructuras complejas de interés han sido caracterizadas cuantitativamente usando la idea de dimensión fractal  $d_f$ : una dimensión que es propia de la forma geométrica bajo consideración y a menudo no es una cantidad entera. La clave del progreso está en el reconocimiento que muchas estructuras aleatorias obedecen a una simetría. Esta simetría de escala tiene la consecuencia que tales objetos lucen similares sobre diferentes escalas de observación.

Existen ejemplos de estructuras fractales que observamos cotidianamente como nubes o rayos [1-3]. A decir verdad, el mismo acto de observar, requiere que las células nerviosas de la retina del ojo envíen una señal, y estas células nerviosas son ellas mismas objetos fractales [4].

Por otro lado cabe mencionar ejemplos de estructuras fractales que han surgido a partir de modelos teóricos, como clusters infinitos de percolación, agregados limitados por difusión, modelos de polímeros, etc.

Hoy en día existen alrededor de  $10^3$  fractales reconocidos en la naturaleza, aunque una década atrás, cuando B. Mandelbrot escribió el clásico texto titulado "*Fractal Geometry of Nature*" muchos de esos sistemas no eran reconocidos como fractales.

Resulta a menudo sorprendente que sistemas físicos que en principio parecen diferentes puedan ser estudiados utilizando el mismo modelo teórico. Por ejemplo, fenómenos tales como transiciones sol-gel, crecimiento de películas metálicas delgadas, adsorción sobre superficies sólidas, difusión de fluidos en medios porosos, conducción eléctrica en medios desordenados, etc, puedan ser analizados en base al

modelo de percolación. El modelo de agregación limitada por difusión (DLA) posee alrededor de 50 sistemas físicos en los cuales es aplicable. Estructuras del tipo DLA surgen naturalmente en el estudio de muchos fenómenos de interés para físicos y químicos como la deposición electroquímica [5], solidificación dendrítica [6-9], ruptura dieléctrica [10], crecimiento de colonias de bacterias [11], disolución química [12], cristalización rápida de la lava [13], crecimiento externo de las neuronas [14, 15], etc. Se hace en consecuencia evidente la importancia de estos modelos (y de muchos otros no nombrados), ya que su estudio abre luz sobre la extensa variedad de fenómenos que representan.

En los últimos años, un gran número de fenómenos muy interesantes han sido estudiados, en los cuales es necesario un número infinito de exponentes para su descripción. Tales fenómenos, llamados fenómenos multifractales, han conformado recientemente un área de investigación extremadamente activa sobre diferentes campos que van desde la física y química hasta la dinámica de fluidos y meteorología.

En los siguientes capítulos se tratarán diversas características de modelos de sistemas desordenados. El modelo standard de percolación representa el caso más simple de sistema desordenado. Vale la pena entonces finalizar esta sección introductoria con una muy breve reseña histórica sobre este modelo. El primer trabajo que introduce el concepto de percolación fue realizado por Flory y Stockmayer alrededor de 50 años atrás cuando estudiaban el proceso de gelación [16]. El nombre *percolación* fue sugerido por Broadbent y Hammersley en 1957 cuando estudiaban la difusión de fluidos en medios aleatorios [17]. Ellos también introdujeron los importantes conceptos geométricos y probabilísticos. Los desarrollos de la teoría de transiciones de fase en los años subsiguientes, en particular el método de la expansión en serie de Domb [18] y la teoría del grupo de renormalización de Wilson, Fisher y Kadanoff [19], estimularon enormemente el estudio de la transición de fase geométrica. El concepto de fractal introducido por Mandelbrot [1] ha resultado ser una herramienta poderosa, la cual, junto con el desarrollo de las computadoras a gran escala, han contribuido de manera significativa al entendimiento de la percolación y de una gran variedad de sistemas desordenados.

En este trabajo de tesis se estudian diversos modelos de sistemas desordenados mediante el uso intensivo de simulaciones Monte Carlo. Estas simulaciones han sido realizadas en un sistema de procesadores que trabajan en paralelo llamados "transputers". El lenguaje adecuado para programación con estos procesadores es el "OCCAM" [20], el cual ha sido desarrollado especialmente para este fin. Los datos obtenidos de las simulaciones son interpretados mediante teorías de escala y eventualmente se emplearán calculos analíticos.

El trabajo de tesis está organizado de la siguiente manera. En el capítulo 1 se estudian múltiples aspectos del comportamiento crítico del modelo standard de percolación en una geometría rectangular. El capítulo 2 está dedicado al análisis de diversas características del modelo de adsorción secuencial de dímeros calientes y del modelo de adsorción de dímeros muy calientes. En el capítulo 3 se estudian dos modelos de sistemas dinámicos que exhiben transiciones de fase irreversibles. Estos modelos dinámicos han sido derivados de modelos autómatas celulares (modelo de Conway y "juego de la vida" en una dimensión) con el propósito de investigar sus comportamientos críticos y comparar con otros procesos fuera del equilibrio.

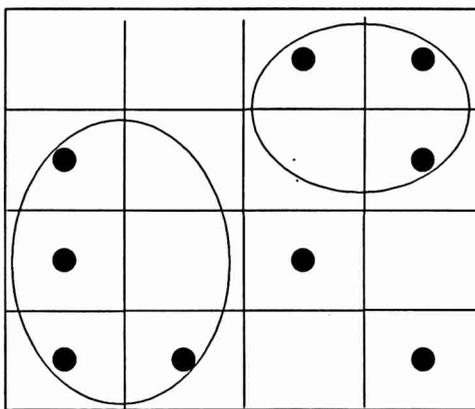
11  
 12  
 13  
 14  
 15  
 16  
 17  
 18  
 19  
 20  
 21  
 22  
 23  
 24  
 25  
 26  
 27  
 28  
 29  
 30  
 31  
 32  
 33  
 34  
 35  
 36  
 37  
 38  
 39  
 40  
 41  
 42  
 43  
 44  
 45  
 46  
 47  
 48  
 49  
 50  
 51  
 52  
 53  
 54  
 55  
 56  
 57  
 58  
 59  
 60  
 61  
 62  
 63  
 64  
 65  
 66  
 67  
 68  
 69  
 70  
 71  
 72  
 73  
 74  
 75  
 76  
 77  
 78  
 79  
 80  
 81  
 82  
 83  
 84  
 85  
 86  
 87  
 88  
 89  
 90  
 91  
 92  
 93  
 94  
 95  
 96  
 97  
 98  
 99  
 100

# Capítulo 1

## Modelo estandar de percolación

### 1.1 Introducción

Consideremos una red cuadrada donde cada sitio está ocupado aleatoriamente con probabilidad  $p$ , o desocupado con probabilidad  $(1 - p)$ . Sitios ocupados o desocupados pueden representar distintas propiedades físicas. Por simplicidad supongamos que los sitios ocupados representan conductores eléctricos, los desocupados representan aislantes, y que la corriente eléctrica puede fluir entre sitios conductores que son primeros vecinos.



**Figura 1.1** Definición de cluster. Los clusters, grupos de cuadrados vecinos ocupados, son marcados con un círculo excepto cuando el cluster consiste de un sólo cuadrado.

Ahora definimos un "cluster" como un grupo de primeros vecinos ocupados (ver figura 1.1). A baja concentración  $p$ , los sitios conductores o están aislados o forman pequeños clusters. Luego, a baja concentración  $p$ , la mezcla es un aislante, ya que no existe un camino conductor que conecte los extremos opuestos de la red. Por otro lado, para grandes valores de  $p$ , existen muchos caminos conductores entre extremos opuestos de la red y en consecuencia la mezcla es un conductor. Por lo tanto, para alguna concentración intermedia, debe existir un umbral de concentración  $p_c$ , donde por primera vez la corriente eléctrica pueda *percolar* de un extremo a otro del sistema. Por debajo de  $p_c$  tenemos un aislante y por encima un conductor. La concentración umbral es llamada *umbral de percolación* o *concentración crítica* ya que separa dos fases de características diferentes. En contraste con las transiciones de fase térmicas, donde la transición entre dos fases ocurre a una temperatura crítica, la transición percolativa descrita aquí es una transición de fase geométrica, la cual está caracterizada por las propiedades geométricas de los clusters más grandes en la vecindad de  $p_c$ . Para valores de  $p$  por debajo de  $p_c$  sólo existen clusters pequeños de sitios ocupados. Cuando se incrementa la concentración, crece también el tamaño promedio de los clusters que se forman. A la concentración crítica  $p_c$ , aparece por primera vez un gran cluster que conecta los extremos opuestos del sistema. Llamamos a este cluster **cluster de percolación** o *cluster infinito* ya que su tamaño diverge cuando el tamaño de la red es llevado a infinito. Para  $p > p_c$  la densidad del cluster infinito aumenta, ya que más y más sitios forman parte del cluster infinito. Al mismo tiempo, el tamaño promedio de los clusters finitos que no pertenecen al cluster infinito decrece. Trivialmente, a  $p = 1$ , todos los sitios pertenecen al cluster infinito.

Hasta aquí sólo hemos definido la "percolación por sitios" (*site percolation*). Su contraparte es llamada percolación por lazos (*bond percolation*) y se define de la siguiente manera. Imaginemos que todos los sitios de una red cuadrada están ocupados y que dibujamos líneas entre sitios vecinos de la red. Luego cada línea puede representar un lazo abierto (*open bond*) con probabilidad  $p$  o un lazo cerrado (*closed bond*) con probabilidad  $(1 - p)$ . Un cluster es entonces un grupo de sitios

conectados por lazos abiertos.

**Tabla 1.1** Concentraciones críticas para diferentes redes. "Sitio" se refiere a percolación por sitios y "lazo" a la percolación por lazos. En todos los casos, sólo los primeros vecinos forman clusters y no existen interacciones entre sitios o lazos. Si los resultados no son exactos, el error probablemente afecta a la última cifra decimal

Red	Sitio	Lazo
Panal de abeja	0.6962	0.65271
Cuadrada	0.592746	1/2
Triangular	1/2	0.34729
Diamante	0.43	0.388
Cúbica simple	0.3116	0.2488
BCC	0.246	0.1803
FCC	0.198	0.119
d=4 hipercúbica	0.197	0.1601
d=5 hipercúbica	0.141	0.1182
d=6 hipercúbica	0.107	0.0942
d=7 hipercúbica	0.089	0.0787

Los procesos percolativos están siendo estudiados con creciente interés debido a sus múltiples aplicaciones en diversas ramas de la física y la fisicoquímica. Gran parte de los trabajos realizados en percolación en dos dimensiones utilizando diferentes técnicas, han sido llevados a cabo en geometría cuadrada  $L \times L$  [21-26]. Sin embargo, numerosos autores han considerado también geometrías no cuadradas en teoría de percolación. En efecto, geometrías  $L \times M$  han sido estudiadas con los métodos de la matriz de transferencia (*transfer matrix*) y renormalización fenomenológica (*phenomenological renormalization*) [27-31, y referencias allí citadas]. Además, estudios realizados sobre otros modelos en geometría rectangular, tales como por ejemplo el modelo de Ising [32-34, y referencias allí citadas ], han demostrado que ésta es una aproximación útil la cual contribuye al entendimiento cabal del problema. En particular, esta geometría es adecuada para el estudio de fenómenos de adsorción en superficies escalonadas [32-36] como así también de procesos de difusión y conducción en medios estratificados.

## 1.2 Introducción Teórica

Como muchos otros problemas en física teórica, el problema de percolación tiene solución exacta en una dimensión, y algunos aspectos de esa solución son válidos en dimensiones más altas. Estudiemos el problema de percolación en una cadena lineal infinita, donde cada sitio de red está separado por una distancia fija de sus vecinos. Cada uno de estos sitios es ocupado aleatoriamente con probabilidad  $p$ . Un cluster es un grupo de sitios vecinos ocupados. Un sólo sitio vacío dividiría el grupo en dos clusters diferentes. Para que un cluster resulte separado de otros clusters, tanto el sitio vecino de la izquierda como el de la derecha deben estar vacíos. La probabilidad de que un sitio esté ocupado es  $p$ . Ya que todos los sitios son ocupados aleatoriamente, la probabilidad de que  $s$  sitios arbitrarios estén ocupados es  $p^s$ . La probabilidad de que un extremo del cluster tenga un vecino desocupado es  $(1 - p)$ . Por lo tanto, la probabilidad total de que un sitio de la red sea un extremo de un cluster de tamaño  $s$  es  $p^s(1 - p)^2$ .

Cuántos clusters de tamaño  $s$  tenemos en la cadena, si la longitud  $L$  de la cadena es mucho mayor que la longitud del cluster? Cada sitio tiene una probabilidad  $p^s(1 - p)^2$  de ser el extremo de dicho cluster, y hay  $L$  de tales sitios (cuando se ignora el pequeño número de sitios de los extremos de la cadena completa para los cuales la situación es diferente, ya que no resta espacio para colocar  $s$  sitios ocupados y dos desocupados). Así, el número total de  $s$ -clusters, despreciando los efectos de los extremos, es  $Lp^s(1 - p)^2$ . En consecuencia se observa que es práctico hablar del número de  $s$ -clusters por sitio de red, el cual es el número total dividido por  $L$ , o sea,  $p^s(1 - p)^2$ . Este valor así normalizado, es independiente del tamaño de la red  $L$  y es igual a la probabilidad de que un sitio sea extremo de un  $s$ -cluster. Así definimos  $n_s$  como

$$n_s = p^s (1 - p)^2 \quad (1.1)$$

Para  $p < 1$ ,  $n_s$  tiende a cero si el tamaño del cluster  $s$  tiende a infinito.

La probabilidad de que un sitio arbitrario sea parte de un cluster de tamaño  $s$  y no sólo un extremo, es mayor por un factor  $s$  ya que ahora ese sitio puede ser

cualquiera de los  $s$  sitios que forman el cluster. Así esta probabilidad es  $n_s s$ .

Cuál es el umbral de percolación? A  $p = 1$  todos los sitios de la cadena están ocupados y la cadena en su totalidad conforma un sólo cluster. Para cualquier valor de  $p$  menor que la unidad, habrá algunos huecos en la cadena. Así en una cadena de longitud  $L$  se encontrarán en promedio  $(1 - p)L$  sitios vacíos. Para  $L$  tendiendo a infinito a  $p$  fijo, este número también tiende a infinito. Así tendremos al menos un sitio vacío en la cadena, lo cual significa que no hay una fila continua de sitios ocupados y en consecuencia no existe un cluster unidimensional que conecte los dos extremos. En otras palabras, no tenemos un cluster de percolación para  $p < 1$ . Así el umbral de percolación es la unidad:

$$p_c = 1 \quad (1.2)$$

Luego, no es posible observar la región  $p > p_c$  para percolación en una dimensión.

Como se discutió anteriormente, la probabilidad de que un sitio pertenezca a un cluster de tamaño  $s$  es  $n_s s$ . Cada sitio ocupado debe pertenecer a un cluster, ya que un sitio ocupado aislado por vecinos desocupados, son también clusters de tamaño unidad. La probabilidad de que un sitio arbitrario pertenezca a cualquier cluster es entonces igual a la probabilidad  $p$  de que esté ocupado. Así

$$\sum_s n_s s = p \quad (p < p_c) \quad (1.3)$$

La suma va desde  $s = 1$  hasta  $s = \infty$ . Esta ley también puede ser corroborada directamente a partir de la ecuación (1.1) y de la solución para series geométricas:

$$\begin{aligned} \sum_s p^s (1 - p)^2 s &= (1 - p)^2 \sum_s p \frac{d(p^s)}{dp} \\ &= (1 - p)^2 p \frac{d(\sum_s p^s)}{dp} \\ &= (1 - p)^2 p \frac{d(p/(1 - p))}{dp} \\ &= p \end{aligned}$$

Para  $d > 1$ , la ecuación (1.3) es también válida sólo que se deben tomar en cuenta separadamente los sitios pertenecientes al cluster infinito. Luego la ecuación (1.3) está restringida a  $p < p_c$ . Aún en una dimensión a  $p = p_c = 1$ , existe un sólo cluster que cubre toda la red, así  $s = \infty$  y  $n_s = 0$ , lo cual hace que la ecuación (1.3) resulte indefinida a  $p = 1$ .

Escojamos aleatoriamente un sitio de red que sea parte de un cluster finito. Qué tamaño promedio tiene este cluster? Existe una probabilidad  $s n_s$  de que un sitio arbitrario (ocupado o no) pertenezca a un  $s$ -cluster, y una probabilidad  $\sum_s n_s s$  de que pertenezca a cualquier cluster finito. Así  $w_s = n_s s / \sum_s n_s s$  es la probabilidad de que el cluster contenga exactamente  $s$  sitios. El tamaño promedio del cluster  $S$  que se mide en este proceso de elegir al azar un sitio de algún cluster es

$$S = \sum w_s s = \sum \frac{n_s s^2}{\sum n_s s} \quad (1.4)$$

Se ha definido  $S$  de tal manera que la ecuación (1.4) es también la definición de  $S$  cuando  $d > 1$  con la única condición de que el cluster infinito sea excluido de la sumas. Se calcula ahora el tamaño medio del cluster explícitamente. De la ecuación (1.3) vemos que el denominador de la ecuación (1.4) es simplemente  $p$ . El numerador es

$$(1-p)^2 \sum_s s^2 p^s = (1-p)^2 \left( p \frac{d}{dp} \right)^2 \sum_s p^s$$

donde la suma corre nuevamente desde  $s = 1$  a  $s = \infty$ , y donde el truco utilizado en la derivación de la ecuación (1.3) se aplica dos veces de manera de calcular las sumas mediante derivadas de sumas más simples. Así

$$S = \frac{(1+p)}{(1-p)} \quad (p < p_c) \quad (1.5)$$

El tamaño medio del cluster diverge cuando  $p$  se aproxima a  $p_c$ . Se obtienen resultados similares para  $d > 1$ . Esta divergencia es una característica esperada, ya que si existe un cluster infinito presente para valores de  $p > p_c$ , luego para valores de  $p$  sensiblemente menores que  $p_c$  se presentan ya clusters muy grandes aunque finitos.

Se puede definir la función de correlación  $g(r)$  como la probabilidad de que un sitio localizado a una distancia  $r$  de un sitio ocupado pertenezca al mismo cluster. Para  $r = 0$ ,  $g(0)$  es igual a la unidad. Para  $r = 1$ , el sitio vecino pertenece al mismo cluster si y sólo si está ocupado y esto ocurre con probabilidad  $p$ . Para un sitio a una distancia  $r$ , este sitio y los  $(r - 1)$  sitios intermedios deben estar ocupados sin excepción, y esto sucede con probabilidad  $p^r$ . Por lo tanto

$$g(r) = p^r \quad (1.6)$$

para todo  $p$  y  $r$ . Para  $p < 1$ , la función de correlación tiende exponencialmente a cero cuando la distancia  $r$  tiende a infinito:

$$g(r) = \exp(-r/\xi)$$

donde

$$\xi = -\frac{1}{\ln(p)} = \frac{1}{(p_c - p)} \quad (1.7)$$

La última igualdad en la ecuación (1.7) es válida solamente para  $p$  cercano a  $p_c = 1$  y utiliza la expansión  $\ln(1 - x) = -x$  para  $x$  pequeño. La cantidad  $\xi$  es llamada longitud de correlación o conectividad y se observa que también diverge a  $p_c$ . Se cumple que para dimensiones más altas ( $d > 1$ ), la longitud de correlación es proporcional al diámetro medio de un cluster típico. Esta relación resulta ser obvia para  $d = 1$ . La longitud de un cluster de  $s$  sitios es  $(s - 1)$  lo cual no es muy diferente de  $s$  si  $s$  es grande. Así la longitud promedio  $\xi$  varía como el tamaño promedio del cluster  $S$ :

$$S \propto \xi \quad (p \rightarrow p_c) \quad (1.8)$$

Desafortunadamente, esta relación resulta ser más complicada para  $d > 1$ . De validez más general es la relación entre la suma sobre todas las distancias  $r$  de la función de correlación y el tamaño medio del cluster:

$$\sum_r g(r) = S \quad (1.9)$$

Se observa a partir de esta solución exacta, que algunas cantidades divergen en el umbral de percolación y que esta divergencia puede ser descripta por simples leyes de potencias, como  $1/(p_c - p)$ , al menos asintóticamente ( $p \rightarrow p_c$ ). Esto mismo es válido para  $d > 1$  donde aún el problema no ha sido resuelto exactamente.

Las cantidades  $S$  y  $\xi$  tienen análogos para las transiciones de fase térmicas. En fluidos cerca del punto crítico, se observa opalescencia crítica en experimentos de dispersión de luz, ya que la compresibilidad (el análogo de  $S$ ) y la longitud de correlación divergen allí. Otro ejemplo ilustrativo es la transición de fase magnética. A bajas temperaturas algunos materiales exhiben magnetización espontánea  $m > 0$  en ausencia de campo magnético externo (fase ferromagnética). Cuando se incrementa la temperatura, la magnetización espontánea decrece continuamente y se anula a la temperatura crítica  $T_c$ . En la fase paramagnética, por encima de  $T_c$ ,  $m = 0$ .

Un material magnético está compuesto de momentos magnéticos elementales (spins). La interacción entre ellos favorece la formación de un estado ordenado donde todos los momentos son paralelos, mientras el aumento de energía térmica conduce a un estado donde los momentos tienen orientaciones aleatorias. A bajas temperaturas la interacción spin-spin domina, y se observan correlaciones de largo alcance, lo cual es evidente ya que la magnetización espontánea  $m$  es distinta de cero. Ya que  $m$  describe el orden en el sistema, es llamado *parámetro de orden*. Cuando se incrementa la temperatura  $m(T)$  decrece, y cerca de  $T_c$  se comporta como  $m(T) \sim (T_c - T)^\beta$ . Para  $T > T_c$ , la energía térmica domina. Luego, sólo pueden existir clusters finitos de momentos alineados temporalmente, y su orientación aleatoria conduce a una magnetización nula.

En percolación, la concentración de sitios ocupados  $p$  juega el mismo rol que la temperatura para las transiciones de fase térmicas. En general, para  $d \geq 1$ , la transición percolativa está caracterizada por las propiedades geométricas de los clusters cerca del punto crítico  $p_c$ . Una cantidad de importancia es la probabilidad  $P_\infty$  de que un sitio pertenezca al cluster infinito. Para  $p < p_c$ , sólo existen clusters finitos, entonces  $P_\infty = 0$ . Para  $p > p_c$ ,  $P_\infty$  se comporta de manera similar a la

magnetización para  $T < T_c$ , y crece con  $p$  siguiendo una ley de potencia

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta \quad (1.10)$$

De forma similar a la magnetización,  $P_\infty$  describe el orden en percolación y puede ser identificado como el parámetro de orden del sistema.

El tamaño lineal de los clusters finitos, por encima y por debajo de  $p_c$ , está caracterizado por la longitud de correlación  $\xi$ . La longitud de correlación se define como una distancia media entre dos sitios que pertenecen al mismo cluster finito. Cuando  $p$  se aproxima a  $p_c$ ,  $\xi$  se comporta como

$$\xi \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad (1.11)$$

con el mismo exponente  $\nu$  para  $p < p_c$  como para  $p > p_c$ . El tamaño medio de los clusters finitos también diverge a  $p_c$ ,

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma} \quad (1.12)$$

y nuevamente con el mismo exponente tanto por encima como por debajo del umbral. Para obtener  $\xi$  y  $S$ , se requiere realizar promedios sobre todos los clusters finitos en la red. Para sistemas magnéticos, cantidades análogas a  $P_\infty$  y  $S$  son la magnetización  $m$  y la susceptibilidad  $\chi$  (ver tabla 1.2).

Los exponentes  $\beta$ ,  $\nu$  y  $\gamma$  describen el comportamiento crítico de cantidades asociadas con la transición en percolación, y son llamados *exponentes críticos*. Los exponentes son universales y no dependen ni de los detalles estructurales de la red (sea triangular o cuadrada), ni del tipo de percolación (sea por sitios o por lazos); sólo dependen de la dimensión  $d$  de la red. Esta propiedad de universalidad es una característica general de las transiciones de fase, en el caso en que el parámetro de orden tiende a cero continuamente en el punto crítico (transiciones de fase de segundo orden). Esto es debido a que en una transición de fase de segundo orden la longitud de correlación  $\xi$ , que es la única longitud relevante del sistema, diverge en el punto crítico y en consecuencia, cuando se desea describir el sistema cerca del punto

crítico, todos sus detalles resultan irrelevantes. Por ejemplo, la magnetización en cualquier material magnético tridimensional, está descrita por el mismo exponente  $\beta$ , sin importar la estructura cristalina o el tipo de interacción entre los momentos magnéticos, siempre que ésta sea de corto alcance.

Los exponentes  $\beta$ ,  $\nu$  y  $\gamma$  no son los únicos exponentes críticos que caracterizan la transición en percolación. Por ejemplo, la distribución de tamaño de clusters  $n_s$ , está descrita por otros exponentes  $\alpha$ ,  $\tau$  y  $\sigma$ . Sin embargo, existen relaciones y todos los exponentes pueden ser obtenidos a partir del conocimiento de sólo dos de ellos.

En la tabla 1.2 son mostrados los exponentes  $\beta$ ,  $\nu$  y  $\gamma$  para percolación en dos, tres y seis dimensiones, y se comparan con los exponentes análogos correspondientes a una transición de fase magnética. Los exponentes considerados aquí describen las propiedades geométricas de la transición en percolación. Las propiedades físicas asociadas con la transición, también se comportan como leyes de potencias cerca de  $p_c$ , y están caracterizadas por exponentes críticos. Como ejemplos se puede citar la conductividad, la velocidad con que se desparra una epidemia cerca de la probabilidad crítica de infección, etc. Se presume que los exponentes dinámicos no pueden ser relacionados en general con los exponentes geométricos discutidos anteriormente. Las propiedades de transporte en medios desordenados serán tratadas en el capítulo 2.

**Tabla 1.2** Valores exactos y mejores estimaciones de los exponentes críticos en percolación y magnetismo. <sup>a</sup> Valor exacto [37, 38]; <sup>b</sup> Simulación numérica [39]; <sup>c</sup> Exacto [40, 41]

<b>Percolacion</b>	$d = 2$	$d = 3$	$d \geq 6$
<i>Parametro de orden <math>P_\infty : \beta</math></i>	$5/36^a$	$0.417 \pm 0.003^b$	$1^c$
<i>Longitud de correlacion <math>\xi : \nu</math></i>	$4/3^a$	$0.875 \pm 0.008^b$	$1/2^c$
<i>Tamaño medio del cluster <math>S : \gamma</math></i>	$43/18^a$	$1.795 \pm 0.005^b$	$1^c$
<b>Magnetismo</b>	$d = 2$	$d = 3$	$d \geq 4$
<i>Parametro de orden <math>m : \beta</math></i>	$1/8$	$0.32$	$1/2$
<i>Longitud de correlacion <math>\xi : \nu</math></i>	$1$	$0.63$	$1/2$
<i>Suceptibilidad <math>\chi : \gamma</math></i>	$7/4$	$1.24$	$1$

Se analizarán ahora algunas propiedades estructurales de interés, ya que conducirán al concepto de dimensión fractal. Se define el *radio de giro* de un  $s$ -cluster de la siguiente manera:

$$R_s^2 = \sum_{i=1}^s \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_0|^2}{s} \quad (1.13)$$

donde

$$\mathbf{r}_0 = \sum_{i=1}^s \mathbf{r}_i / s \quad (1.14)$$

es la posición del centro de masa del cluster, y  $\mathbf{r}_i$  es la posición del  $i$ -ésimo sitio del cluster.

Si se promedia sobre todos los clusters que tienen un tamaño dado  $s$ , el promedio de los radios al cuadrado es denotado como  $R_s^2$ . Se puede relacionar también  $R_s$  con una distancia promedio entre dos sitios del cluster:

$$2R_s^2 = \sum_{i,j} \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2}{s^2} \quad (1.15)$$

como se puede derivar fácilmente después de centrar el origen de coordenadas en el centro de masa del cluster:  $\mathbf{r}_0 = 0$ .

La función de correlación  $g(r)$  es la probabilidad de que un sitio situado a una distancia  $r$  de un sitio ocupado pertenezca al mismo cluster. El número promedio de sitios que están conectados a un sitio ocupado en el origen es entonces  $\sum_r g(r)$ . Por otro lado, este promedio es igual a  $\sum_s s^2 n_s / p$ , ya que  $s n_s / p$  es la probabilidad de que un sitio ocupado pertenezca a un  $s$ -cluster, o sea a un cluster que contiene  $s$  sitios mutuamente conectados. Así

$$pS = \sum_s s^2 n_s = p \sum_r g(r) \quad (1.16)$$

El segundo momento de la distribución de tamaño de cluster es igual a la suma sobre todas las correlaciones (a menos de un factor  $p$ ). Por encima de  $p_c$ , esta relación es también válida si se sustrae la contribución del cluster infinito, lo cual se consigue reemplazando  $g(r)$  por  $g(r) - P^2$ .

Se puede dar una definición operativa de la longitud de correlación  $\xi$  a partir de la función de correlación  $g(r)$

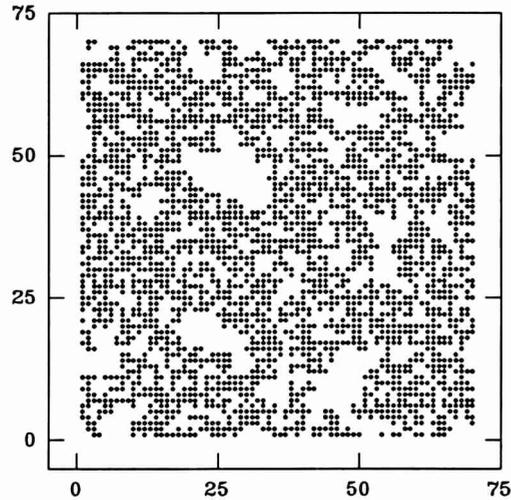
$$\xi^2 = \frac{\sum_r r^2 g(r)}{\sum_r g(r)} \quad (1.17)$$

Dado que para un determinado cluster,  $2R_s^2$  es la distancia cuadrática media entre dos sitios del cluster, un sitio pertenece a un  $s$ -cluster con probabilidad  $sn_s$  y luego está conectado a  $s$  sitios, el promedio correspondiente sobre  $2R_s^2$  dá la longitud de correlación al cuadrado

$$\xi^2 = \frac{2 \sum_s R_s^2 s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s} \quad (1.18)$$

Así, a menos de algunos factores numéricos, la longitud de correlación es el radio de aquellos clusters que dan la contribución principal al segundo momento de la distribución de tamaño de clusters cerca del umbral de percolación. Se ha visto anteriormente que muchas cantidades de interés que involucran sumas sobre los tamaños de clusters, divergen en el umbral de percolación. Se observa de la ecuación (1.18) que la longitud de correlación, la cual es simplemente el radio de aquellos clusters que dán la contribución fundamental a esta divergencia, es también una de ellas. Luego existe una y sólo una longitud  $\xi$  que domina el comportamiento crítico. Este efecto es el fundamento de la teoría de escala.

Consideremos un cluster infinito a la concentración crítica en dos dimensiones. Un ejemplo representativo de cluster infinito es el mostrado en la figura 1.2. Coloquemos un marco de tamaño  $l \times l$ , con  $l \ll$  que el tamaño de la red, en el centro de la figura 1.2 y contemos cuántos puntos dentro de este marco pertenecen al cluster infinito. Llamemos  $M(l)$  a esta cantidad. Podemos efectuar este ejercicio con marcos de tamaño  $l = 3, 5, 7, 9$ , etc. Se observa en la figura 1.2 que el cluster es bastante ramificado y contiene huecos en diversas escalas de longitud. Si se mide  $M(l)$  como una función de  $l$  a  $p_c$ , uno esperaría en primera instancia que  $M(l)$  crezca linealmente con el area del marco  $l^2$ .



**Figura 1.2** Cluster de percolación generado en una red cuadrada bidimensional ( $L = 70$ ) a la concentración crítica  $p_c = 0.592746$ .

Sin embargo este no es el resultado, ya que si se grafica  $\log M(l)$  versus  $\log l$  se encuentra una línea recta de pendiente 1.9, lo cual implica que a  $p_c$  se tiene

$$M(l) \propto l^{1.9}$$

donde el exponente 1.9 se denomina *dimensión fractal*. La dimensión fractal  $d_f$  describe en promedio, cómo la masa  $M$  del cluster dentro de un marco de lado  $r$  se escala con  $r$ ,

$$M(r) \sim r^{d_f} \quad (1.19)$$

Una medida de  $M(r)$  requiere un promedio sobre las diferentes configuraciones de clusters o, equivalentemente, sobre diferentes marcos centrados en diferentes puntos sobre el cluster infinito.

Por encima y por debajo de  $p_c$ , el tamaño medio de los clusters finitos en el sistema, está descrito por la longitud de correlación  $\xi$ . A  $p_c$ ,  $\xi$  diverge y se presentan huecos en el cluster infinito sobre todas las escalas de longitud. En consecuencia, el cluster infinito a  $p_c$  es un objeto autosimilar, en el sentido que su aspecto, en promedio, es el mismo sobre distintas escalas de longitud (mayores que la celda

unidad y menores que el tamaño de la red). Por encima de  $p_c$ ,  $\xi$  representa también el tamaño lineal de los huecos en el cluster infinito. Ya que  $\xi$  es finita por encima de  $p_c$ , el cluster infinito puede ser autosimilar sólo sobre escalas de longitud menores que  $\xi$ . Se puede interpretar a  $\xi(p)$  como una longitud típica hasta la cual el cluster es autosimilar y puede ser considerado como un fractal. Para escalas de longitud mayores que  $\xi$ , la estructura del cluster no es autosimilar y puede ser considerado como homogéneo. Matemáticamente podemos expresar las estas conclusiones de la siguiente forma:

$$M(r) \sim \begin{cases} r^{d_f}, & r \ll \xi \\ r^d, & r \gg \xi. \end{cases} \quad (1.20)$$

Es posible relacionar la dimensión fractal del cluster de percolación  $d_f$ , con los exponentes  $\beta$  y  $\nu$ . La probabilidad de que un sitio arbitrario localizado dentro de un círculo de radio  $r$  menor que  $\xi$  pertenezca al cluster infinito, es la razón entre el número de sitios del cluster infinito y el número total de sitios.

$$P_\infty \sim \frac{r^{d_f}}{r^d}, \quad r < \xi. \quad (1.21)$$

Esta ecuación es correcta para  $r = a\xi$ , donde  $a$  es una constante arbitraria menor que 1. Sustituyendo  $r = a\xi$  en (1.21) se obtiene

$$P_\infty \sim \frac{\xi^{d_f}}{\xi^d}. \quad (1.22)$$

Ambos miembros de la ecuación son potencias de  $(p - p_c)$ . Sustituyendo (1.10) y (1.11) en (1.22) se sigue [40-43],

$$d_f = d - \beta/\nu. \quad (1.23)$$

Así, la dimensión fractal del cluster infinito a  $p_c$  no es una nueva dimensión, sino que depende de los exponentes  $\beta$  y  $\nu$ . Ya que  $\beta$  y  $\nu$  son exponentes universales,  $d_f$  también lo es.

Hemos visto que la distribución de tamaño de clusters  $n_s(p)$  juega un papel central en la descripción de la transición geométrica en percolación. A partir de

ella, se pueden calcular todas las cantidades de interés que describen la transición, tales como el tamaño medio de los clusters  $S$ , la longitud de correlación, el radio cuadrático medio de los clusters finitos  $R^2$ , etc. Pero desafortunadamente  $n_s(p)$  no se conoce exactamente para  $d > 1$ . Sin embargo [21, 23, 41], no toda la información contenida en  $n_s(p)$  es necesaria para conocer el comportamiento de las cantidades relevantes cerca del umbral de percolación. Lo importante es la forma de escala de  $n_s(p)$ , a partir de la cual puede ser aplicada una teoría de escala para hallar las relaciones entre los distintos exponentes críticos, o también determinar el comportamiento dominante de cantidades importantes sobre escalas de longitud  $r < \xi$  y  $r > \xi$ . Se describe ahora una teoría de escala que describe el cambio en el comportamiento sobre escalas de longitud  $r < \xi$  a  $r > \xi$  (crossover), en cantidades como  $P_\infty$  y  $M(r)$ . Considérese la probabilidad  $P_\infty$  de que un sitio ocupado pertenezca al cluster infinito. Para determinar  $P_\infty$  se escoge un subsistema de tamaño lineal  $r$  y se halla la fracción de sitios en este sistema que pertenecen al cluster infinito. Si  $r \gg \xi$ , el sistema se comporta como si fuera  $r = \infty$ , y consecuentemente  $P_\infty$  es independiente de  $r$  y está descrito por  $P_\infty \sim (p - p_c)^\beta$ . Por otro parte, si  $r \ll \xi$ , el número de sitios del cluster infinito dentro de un círculo de radio  $r$  es proporcional a  $r^{d_f}$ . El número total de sitios ocupados dentro del mismo círculo es proporcional a  $pr^d$ , y luego  $P_\infty \sim r^{d_f-d}$ . Ya que  $\xi$  es la única longitud característica, se puede asumir que  $P_\infty$  depende de  $r$  y  $\xi$  vía la razón  $r/\xi$ . Esto conduce a la siguiente proposición de escala

$$P_\infty \sim (p - p_c)^\beta G(r/\xi) \sim \xi^{-\beta/\nu} G(r/\xi) \quad (1.24)$$

La función de escala  $G$  describe el *crossover* en el comportamiento de  $P_\infty$  para  $r/\xi \ll 1$  a  $r/\xi \gg 1$ . Con el propósito de obtener los resultados esperados en los dos límites, se debe requerir que

$$G(x) \sim \begin{cases} x^{d_f-d}, & x \ll 1 \\ \text{constante}, & x \gg 1. \end{cases} \quad (1.25)$$

A partir de (1.25) podemos determinar cómo se comporta la masa media  $M$  del cluster infinito con  $r$  y  $\xi$  para  $p > p_c$ . Ya que  $M \sim r^d P_\infty(r, \xi)$ , la masa media del

cluster infinito adopta la siguiente forma de escala

$$M \sim r^{d-\beta/\nu} H(r/\xi), \quad H(x) = x^{\beta/\nu} G(x), \quad (1.26)$$

y recuperamos (1.20) y (1.23). Las ecuaciones (1.25) y (1.26) generalizan (1.19) para  $p \geq p_c$ .

Considérese un sistema finito, por ejemplo una red cuadrada de  $L \times L$  sitios. Se espera que las cantidades de interés que caracterizan la transición geométrica en percolación, dependan de la magnitud  $L$  del sistema. Ya que la longitud característica del sistema es la longitud de correlación  $\xi$  (la cual es definida para un sistema infinito), se tendrá un comportamiento diferente para  $L/\xi \gg 1$  que para  $L/\xi \ll 1$ .

Considérese nuevamente  $P_\infty$ . Para  $L \gg \xi$ , el sistema se comporta como si  $L = \infty$ , es decir,  $P_\infty$  es independiente de  $L$  y está descrito por  $P_\infty \sim (p - p_c)^\beta$ . Para  $\xi \gg L \gg 1$ , el número de sitios del cluster infinito dentro de un marco  $L \times L$  es proporcional a  $L^{d_f}$ . Se obtiene  $P_\infty$  dividiendo por el número total de sitios ocupados en el marco  $L \times L$ , el cual es  $pL^d$ , luego  $P_\infty \sim L^{d_f-d}$ . Como  $\xi$  es la única longitud característica,  $P_\infty$  sólo depende de  $L$  vía la razón  $L/\xi$ , lo cual conduce, en analogía con (1.26), a la siguiente proposición de escala

$$P_\infty \sim (p - p_c)^A G(L/\xi) \sim \xi^{-A/\nu} G(L/\xi) \quad (1.27)$$

La función de escala  $G(x)$  describe el crossover en el comportamiento de  $P_\infty$  para  $L/\xi \ll 1$  a  $L/\xi \gg 1$ . Con el propósito de obtener los resultados esperados para ambos regímenes, se debe tener  $A = \beta$  y

$$G(x) \sim \begin{cases} x^{d_f-d}, & x \ll 1 \\ \text{constante}, & x \gg 1. \end{cases} \quad (1.28)$$

Para ver las consecuencias de estas relaciones, supongamos que se van a efectuar simulaciones computacionales sobre una red triangular, donde la concentración crítica para percolación por sitios es conocida exactamente ( $p_c = 1/2$ ), con el propósito de calcular  $P_\infty$ . Escojamos una red grande,  $L = 1000$ , y ocupémosla aleatoriamente

con probabilidad  $p$ . Luego se analizan los clusters y se determina el tamaño del cluster infinito (si es que existe). Se repiten los cálculos sobre un gran número de configuraciones diferentes y se promedia el valor de  $P_\infty$  sobre todas las configuraciones. Para  $p \gg p_c$ , donde  $\xi$  es conderablemente más pequeño que  $L = 1000$ , no se advierten efectos de tamaño finito. Acordemente, si nos aproximamos a  $p_c$ ,  $P_\infty$  decrecerá como  $(p - p_c)^\beta$ , en la medida que  $L \gg \xi$ . Si nos aproximamos más aún a  $p_c$  alcanzaremos una concentración  $p^*$  para la cual  $L \sim \xi$ . Entre  $p^*$  y  $p_c$ ,  $L < \xi$  y  $P_\infty$  permanece aproximadamente constante a un valor finito.

Este comportamiento puede ser entendido de la siguiente manera. En un sistema finito del orden de  $10^6$  sitios, un pequeño cambio en la concentración es equivalente a agregar o sustraer en promedio unos pocos sitios ocupados, lo cual deja al sistema practicamente inalterado. En esta red no se puede apreciar la diferencia en  $P_\infty$  para  $p = p_c + 10^{-6}$  y para  $p = p_c + 10^{-12}$ . El pequeño cambio en la concentración resulta más efectivo si se toman sistemas más grandes, y para el sistema infinito ocurren cambios drásticos aún muy cerca de  $p_c$ . En el ejemplo anterior,  $P_\infty$  decrece en un factor  $10^{6\beta}$  que es del orden de 10. Es obvio que los efectos de tamaño finito descriptos aquí también ocurren en la distribución de tamaño de clusters y en otras cantidades relacionadas.

Es conveniente escribir la relación de escala (1.24) de manera diferente. Si se multiplica y divide a (1.24) por  $L^{-\beta/\nu}$  se obtiene

$$P_\infty \sim L^{-\beta/\nu} H(L/\xi), \quad (1.29)$$

donde  $H(x) = G(x)x^{\beta/\nu}$  como en (1.26)

A partir de argumentos de escala se puede ver que en principio existen dos maneras de determinar un exponente crítico  $z$  de alguna cantidad  $X$ , con  $X \sim (p - p_c)^{-z}$ , mediante simulaciones computacionales. En vez de determinar la cantidad  $X$  (por ejemplo  $P_\infty$  o  $S$ ) directamente como una función de  $(p - p_c)$ , uno puede calcular  $X$  a  $p_c$  para sistemas de diferentes tamaños. De esta manera se obtiene  $X \sim L^{z/\nu}$ , y si  $\nu$  es conocido se puede hallar  $z$

Toda la discusión anterior se basó en la suposición que  $p_c$  era conocido. Cómo

se identifica  $p_c$  a partir de simulaciones sobre redes finitas? Ya que la red es finita, hay una probabilidad finita de encontrar un cluster que percola a cualquier concentración. Para percolación en una dimensión, la probabilidad de encontrar tal cluster es  $\Pi = p^L = \exp -L/\xi$ . Así, para un dado  $L$ , hay una probabilidad mayor que  $1/e$  de encontrar un cluster de percolación si  $\xi > L$ , es decir  $(1 - p) < L^{-1}$ .

Para un sistema infinito  $\Pi = 1$  encima de  $p_c$  y  $\Pi = 0$  por debajo de  $p_c$ . Además el resultado unidimensional se aproxima a este límite cuando  $L \rightarrow \infty$ . Ya que se espera que  $\Pi$  se aproxime a una función escalón para  $L \rightarrow \infty$ , se podría definir un umbral efectivo  $p_{ef}$  a la concentración para la cual  $\Pi = 0.5$  (la elección  $\Pi = 1/3$ , o  $\Pi = 1/e$ , es también buena). Este umbral efectivo  $p_{ef}$  se debería aproximar a  $p_c$  cuando  $L \rightarrow \infty$ . Si se considera nuevamente como ejemplo el caso unidimensional se tiene que  $\xi(p_{ef}) = L$ , luego  $(p_c - p) \sim L^{-1}$ .

Se pueden aplicar ahora estas ideas para  $d > 1$ , donde el umbral de percolación  $p_c$  es menor que la unidad. Sea  $\Pi(p, L)$  la probabilidad de que exista un cluster de percolación en una red de dimensión lineal  $L$  a la concentración  $p$ . En un sistema infinito se tiene  $\Pi = 1$  encima de  $p_c$  y  $\Pi = 0$  por debajo de  $p_c$ . La cantidad  $d\Pi/dp$  da la probabilidad de que exista un cluster de percolación cuando la concentración es incrementada de  $p$  a  $p + dp$ . Dado que en un sistema infinito  $\Pi = 1$  para todo  $p > p_c$ , el exponente crítico de  $\Pi$  es cero, y en forma análoga a la ecuación (1.29) se tiene

$$\Pi = \Phi[(p - p_c)L^{1/\nu}] \quad (1.30)$$

para  $L$  grande y cerca de  $p_c$ . La función de escala  $\Phi$  se incrementa de cero a uno si su argumento crece desde  $-\infty$  (muy por debajo del umbral de percolación) hasta  $+\infty$  (muy por encima del umbral de percolación). La derivada es

$$\frac{d\Pi}{dp} = L^{1/\nu} \Phi'[(p - p_c)L^{1/\nu}] \quad (1.31)$$

(Cuando  $L \rightarrow \infty$  esta derivada se aproxima a la *función delta*.)

La concentración promedio  $p_{av}$  a la cual por primera vez un cluster conecta los

bordes del sistema se define como

$$p_{av} = \int p \left( \frac{d\Pi}{dp} \right) dp \quad (1.32)$$

donde la integral va desde  $p = 0$  a  $p = 1$ .

Cómo este umbral de percolación efectivo  $p_{av}$  para un sistema de tamaño  $L$ , se aproxima al valor asintótico  $p_c$  para un sistema infinito? Partiendo de las ecuaciones (1.31) y (1.32) se encuentra

$$p_{av} - p_c \propto L^{-1/\nu} \quad (1.33)$$

Esta variación de  $p_{av}$  con el tamaño del sistema  $L$ , es una manera de determinar el exponente crítico  $\nu$ : se grafica  $p_{av}$  vs  $L^{-1/\nu}$  intentando diferentes valores del exponente y se selecciona el valor de  $\nu$  para el cual se obtiene la mejor recta para  $L$  grande. En el caso unidimensional uno tiene  $d\Pi/dp = Lp^{L-1}$ . Luego  $p_{av} = L/(L+1)$  y  $1 - p_{av} = 1/(L+1)$  en concordancia con la ecuación (1.33).

No sólo  $p_{av}$  se aproxima a  $p_c$  como  $L^{-1/\nu}$ . Si se define un umbral efectivo de percolación para redes finitas como el punto donde la curva  $\Pi(p)$  tiene un punto de inflexión, este umbral también se aproxima a  $p_c$  como  $L^{-1/\nu}$ , tal como se sigue de la ecuación (1.32). En otras palabras la ecuación (1.33) es válida para cualquier definición razonable del umbral de percolación para sistemas finitos; sólo la constante de proporcionalidad es diferente para las diferentes definiciones.

Gran parte del trabajo que se expondrá posteriormente, fue efectuada utilizando el modelo standard de percolación en geometría rectangular. Las consideraciones previas de escala son igualmente válidas en esta geometría, con la salvedad de que una nueva variable de escala  $M$  debe ser tenida en cuenta. En consecuencia, las funciones de escala correspondientes a las distintas cantidades de interés, dependerán además de la razón  $L/M$  de la muestra.

Algunos aspectos del comportamiento crítico del modelo standard de percolación en una geometría  $L \times M$ , como la probabilidad de percolación, la probabilidad de pertenecer al cluster de percolación, etc, han sido estudiados [35] en mi tesis de grado y los resultados que a continuación se exponen contribuyen a un entendimiento más profundo del modelo. Para tal fin se analiza a  $p_c$  la función de

distribución de largos de los clusters de percolación, los perfiles de densidad y la función de correlación.

### 1.3 Resultados y su discusión

#### Estudio del comportamiento crítico del modelo standard de percolación en una geometría $L \times M$

Se analizará en esta sección el modelo standard de percolación sobre una red cuadrada en geometría rectangular  $L \times M$  en el umbral de percolación  $p_c$  y con el vínculo  $L \ll M$ . Los estudios se basan en el uso intensivo de simulaciones Monte Carlo usando condiciones de contorno abiertas en ambas direcciones ( $L$  y  $M$ ). La interpretación de los resultados se realiza mediante argumentos de escala. Una característica notable del modelo bajo el vínculo  $L \ll M$ , es el crecimiento preferencial de clusters de percolación en la dirección  $L$  de la red (ver figura 1.3).

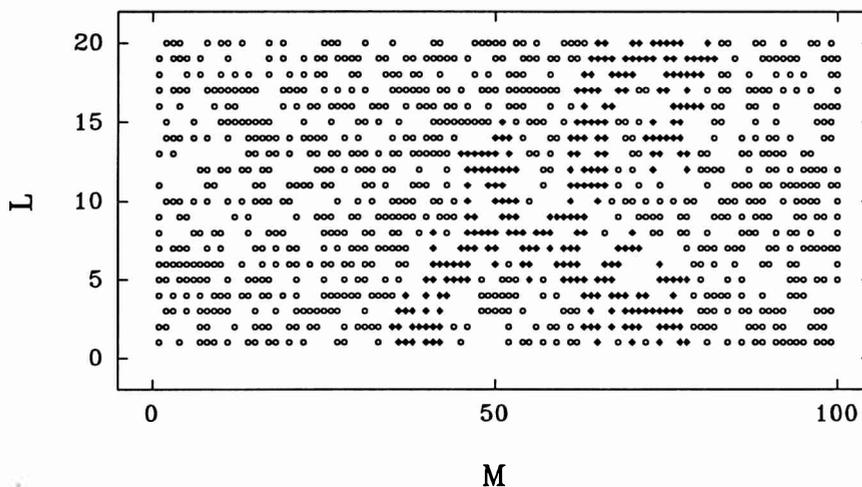


Figura 1.3 a)

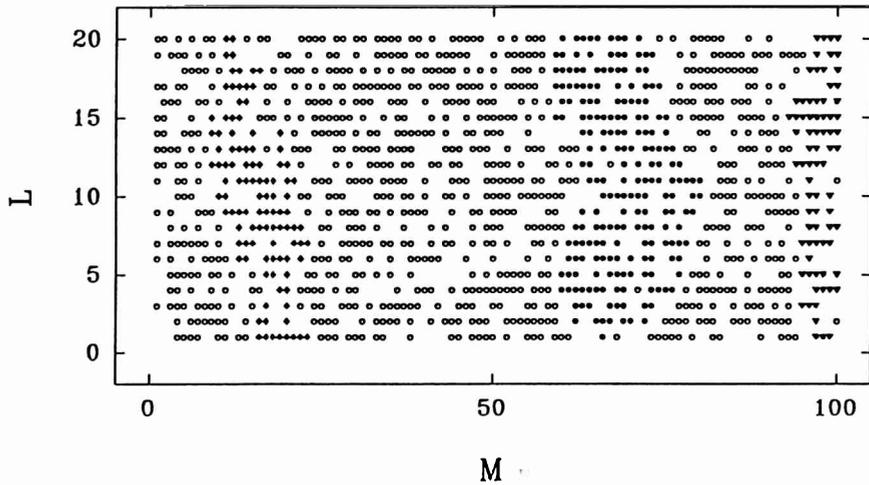


Figura 1.3 b)

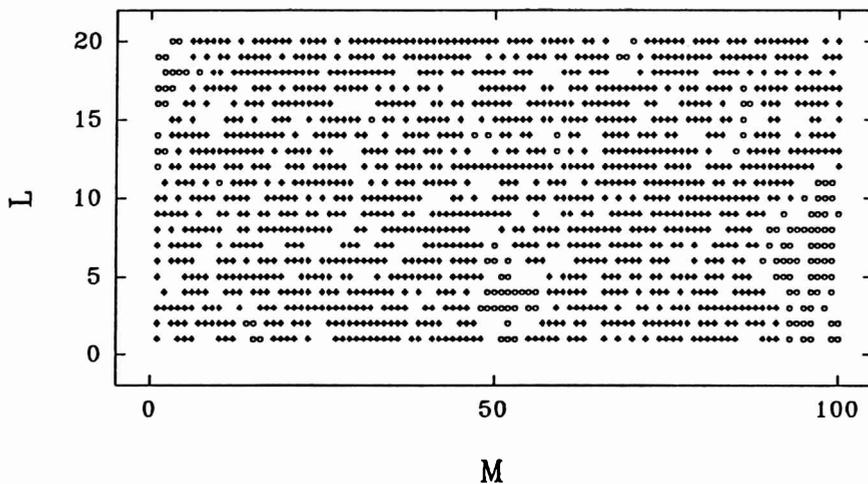


Figura 1.3 c)

Figura 1.3 Configuraciones típicas de redes rectangulares de tamaño  $L = 20 \times M = 100$  tomadas a diferentes valores de la probabilidad de ocupación  $p$ . Los sitios ocupados que pertenecen a clusters de percolación en la dirección  $L$  son mostrados con símbolos negros, los que no pertenecen se muestran en símbolos huecos y los sitios desocupados son dejados en blanco. a)  $p = 0.5$ , b)  $p = p_c = 0.592746$ , c)  $p = 0.7$ .

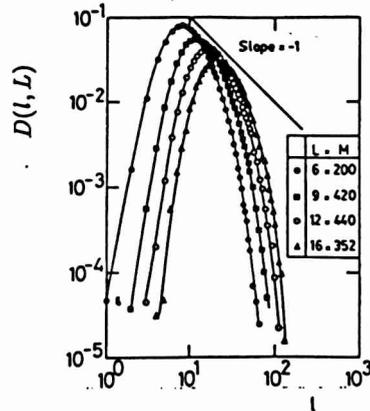
En efecto, para una probabilidad de ocupación relativamente baja ( $p = 0.5$ ) ya han crecido clusters que percolan en la dirección  $L$ . Para  $p = p_c \cong 0.592746$  se observan numerosos clusters de percolación en la dirección  $L$ . El desarrollo de clusters de percolación en la dirección  $M$  ocurre con muy poca frecuencia a  $p_c$  para  $L \ll M$ , pero se observan a menudo para  $p = 0.7 \gg p_c$ . En consecuencia se estudiarán distintas cantidades de interés como la distribución de largos de los clusters de percolación, los perfiles de densidad y la función de correlación.

- **I. La función de distribución de largos a  $p_c$ .**

El estudio de algunas distribuciones adecuadas, brinda información importante sobre las propiedades estructurales del cluster [44, y referencias allí citadas] y en consecuencia su estudio es de gran interés. Por ejemplo las distribuciones de probabilidades de varias propiedades fractales tales como la distribución de voltajes en percolación y las probabilidades de crecimiento en el modelo DLA son del tipo log-normal [45-47]. También existen cálculos de la distribución de masa dentro de un cierto radio para clusters de percolación generados sobre la red de Bethe (*Cayley tree*) y de clusters DLA [48, 49]. En gran parte de los casos se observa comportamiento multifractal, es decir, que se necesita una jerarquía infinita de exponentes independientes para caracterizar los diferentes momentos.

La función de distribución de largos de clusters  $D(l, L)$ , es definida como la probabilidad de que un cluster tenga largo  $l$  en una red de ancho  $L$ , tomando  $L \ll M$ . Se debe notar que todos los clusters considerados deben percolar en la dirección  $L$ , y así, el largo es medido en la dirección perpendicular  $M$ . En el límite  $L \ll M$  la dependencia de  $D(l, L)$  con  $M$  puede ser despreciada. La figura 1.4 muestra un gráfico de  $D(l, L)$  versus  $l$  en escala logarítmica para redes de diferentes tamaños. Se observa que las curvas no son simétricas alrededor del máximo y que la altura de dichos máximos decrece cuando  $L$  crece, independientemente del largo  $M$  de la red. Con el propósito de entender

esta dependencia se analiza el comportamiento de escala de  $D(l, L)$ .



**Figura 1.4** Gráfico log-log de la distribución de largos de clusters de percolación  $D(l, L)$  versus  $l$  utilizando redes de diferentes tamaños como es indicado con símbolos. La recta de pendiente  $-1$  ha sido dibujada con el propósito de mostrar el comportamiento del máximo de la distribución.

Se evalúa en primera instancia el largo medio de los clusters  $\langle l_{CL} \rangle$  definido como

$$\langle l_{CL} \rangle = \sum l D(l, L). \quad (1.34)$$

Se asume ahora que a  $p = p_c$ ,  $D(l, L)$  es una función homogénea de sus variables. Luego

$$D(l, L) = L^{-\omega} f(l/L). \quad (1.35)$$

donde  $\omega$  es un exponente a determinar y  $f$  es una adecuada función de escala. Combinando las ecuaciones (1.34) y (1.35) y transformando la sumatoria en una integración mediante técnicas estándar [23] se sigue

$$\langle l_{CL} \rangle = \int l L^{-\omega} f(l/L) dl = L^{2-\omega} \int u f(u) du. \quad (1.36)$$

donde  $u = l/L$ . Luego

$$\langle l_{CL} \rangle \propto L^{2-\omega}. \quad (1.37)$$

Dado que el largo medio de los clusters se comporta como  $\langle l_{CL} \rangle \propto L^1$  [35], el valor de  $\omega$  debe ser  $\omega = 1$ . Antes de comprobar la validez de estos argumentos, es conveniente analizar la dependencia con  $L$  de la abscisa  $l_m$  del máximo de la distribución  $D(l, L)$ .

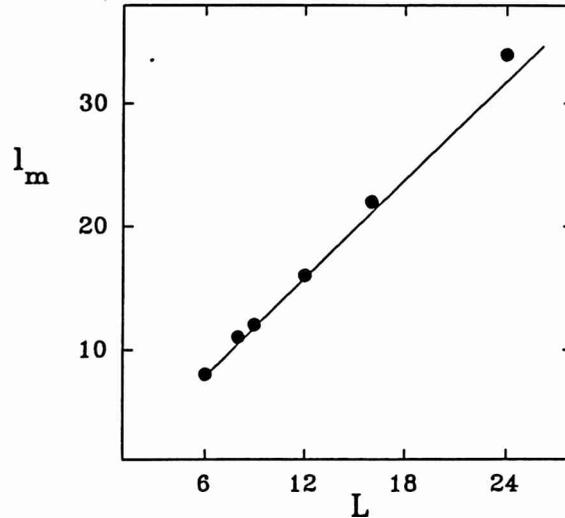


Figura 1.5 Gráfico de  $l_m$  versus  $L$  para redes de diferentes tamaños. La recta de pendiente  $4/3$  es dibujada con el propósito de comparación.

La figura 1.5 muestra un gráfico de  $l_m$  versus  $L$  para redes de diferentes tamaños.  $l_m$  exhibe un comportamiento lineal con pendiente cercana a  $4/3$ . En consecuencia

$$l_m \cong 4/3L, \quad L \ll M. \quad (1.38)$$

Se presume que las desviaciones del comportamiento lineal observadas para las redes de mayor tamaño, es debido a la falta de una estadística apropiada. Luego, reemplazando la ecuación (1.38) en (1.35) se tiene

$$D(l_m, L) = L^{-\omega} f(l_m/L) \cong L^{-\omega} f(4/3). \quad (1.39)$$

entonces la magnitud del máximo de  $D(l, L)$  debería decaer como  $L^{-\omega}$  ( $\omega = 1$ ). La figura 1.6 muestra un gráfico de  $D(l_m, L)$  versus  $L^{-\omega}$  para redes de diferentes

tamaños. La recta obtenida confirma la validez de la hipótesis de escala (1.35) con  $\omega = 1$ .

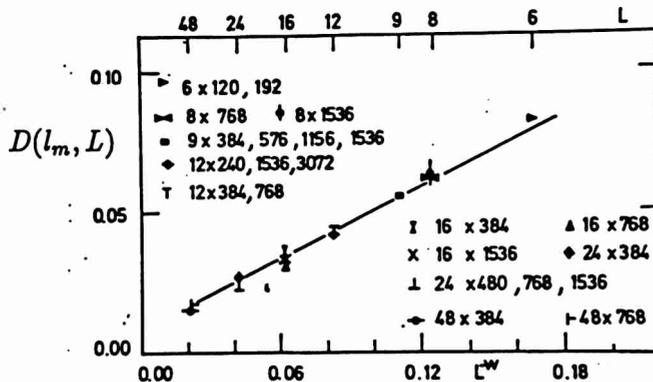


Figura 1.6 Gráfico de  $D(l_m, L)$  versus  $L^{-\omega}$  ( $\omega = 1$ ) para diferentes tamaños de red como es especificado por símbolos. Notar que para ciertos valores de  $L$ , las diferencias debidas a cambios en la longitud  $M$  de la red, son menores que el tamaño mismo de los puntos. La recta de pendiente 1/2 ha sido dibujada con el propósito de comparación.

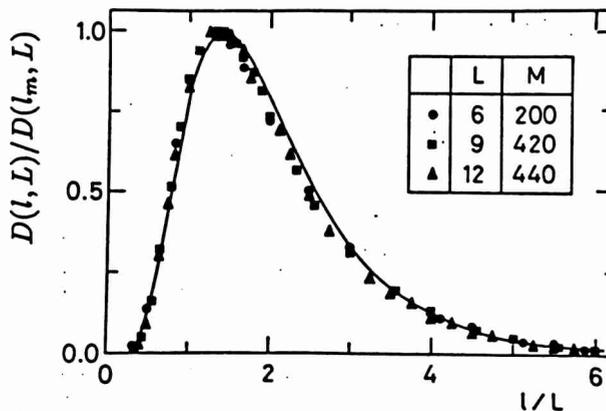


Figura 1.7 Gráfico de la distribución de largos de los clusters de percolación normalizada con respecto al máximo versus  $l/L$  para diferentes tamaños de red. La curva dibujada corresponde al mejor ajuste obtenido con la distribución exp-exp dada por la ecuación (1.40) utilizando las constantes y exponentes listados en (1.41).

De la pendiente de la figura (1.6) se puede evaluar también la función de escala para un valor particular de su argumento, es decir  $f(4/3) \cong 1/2$ .

Un test más concluyente de la hipótesis de escala involucrada en la ecuación (1.35), se muestra en la figura 1.7 donde se grafica  $D(l, L)/D(l_m, L)$  versus  $l/L$  para muestras de diferentes tamaños. El excelente colapso de los datos observado en el gráfico corrobora la validez de la ecuación (1.35). Además la forma de la curva colapsada sugiere que la función de distribución puede ser del tipo exp-exp, es decir

$$D(l, L)L^\omega = \exp[A + B(l/L)^{-\Delta_1} + C(l/L)^{\Delta_2}]. \quad (1.40)$$

donde  $A$ ,  $B$  y  $C$  son constantes y  $\Delta_1$  y  $\Delta_2$  son exponentes característicos. Una regresión por cuadrados mínimos de los datos conduce al mejor ajuste (curva trazada en la figura (1.7)) con los siguientes resultados:

$$\begin{aligned} A &\cong 84.9, & B &\cong -46.6 \\ C &\cong -38.6, & \Delta_1 &\cong \Delta_2 \cong 0.21. \end{aligned} \quad (1.41)$$

- **II. Los perfiles de densidad.** Los perfiles de densidad de los clusters que percolan en la dirección  $L$  se definen como la probabilidad  $F(i, \xi, L, M)$  de que un sitio localizado en la  $i$ -ésima fila paralela a la dirección  $M$  pertenezca al cluster de percolación, es decir

$$F(i, \xi, L, M) = (pM)^{-1} \sum_{j=1}^M c(i, j) \quad i = 1, \dots, L \quad (1.42)$$

donde  $\xi$  es la longitud de correlación,  $p$  es la probabilidad de ocupación y  $c(i, j) = 1$  ( $c(i, j) = 0$ ) si el sitio  $i, j$  pertenece al cluster de percolación (caso contrario). Acorde con la ecuación (1.33), para valores de  $p$  cercanos a  $p_c$  y para  $L \rightarrow \infty$  la longitud de correlación se comporta como

$$\xi \propto |p - p_c|^{-\nu} \quad (1.43)$$

donde  $\nu$  es el exponente de la longitud de correlación ( $\nu = 4/3$  en dos dimensiones [21-26]). En estas condiciones se espera que los perfiles de densidad sean

funciones homogéneas de sus argumentos, esto es

$$F(i, \xi, L, M) = L^x \bar{F}(i/L, \xi/L, L/M) \quad (1.44)$$

donde  $x$  es un exponente a determinar y  $\bar{F}(i/L, \xi/L, L/M)$  es una adecuada función de escala. Debido al vínculo  $L \ll M$ , los perfiles de densidad resultan independientes de  $M$ . De manera que, utilizando la ecuación (1.43) la ecuación (1.44) resulta

$$F(i, \xi, L) = L^x \bar{\bar{F}}[i/L, (p - p_c)L^{1/\nu}] \quad (1.45)$$

donde  $\bar{\bar{F}}$  es otra función de escala.

Por otro lado, la probabilidad de percolación  $P(p)$ , definida como la probabilidad de que un sitio pertenezca a algún cluster de percolación, puede ser escrita en términos de los perfiles de densidad como

$$P(p) = L^{-1} \sum_{i=1}^L F(i, \xi, L) = L^{x-1} \sum_{i=1}^L \bar{\bar{F}}[i/L, (p - p_c)L^{1/\nu}]. \quad (1.46)$$

Transformando la segunda sumatoria en una integral se obtiene

$$P(p) = L^{x-1} \int \bar{\bar{F}}[i/L, (p - p_c)L^{1/\nu}] di \quad (1.47)$$

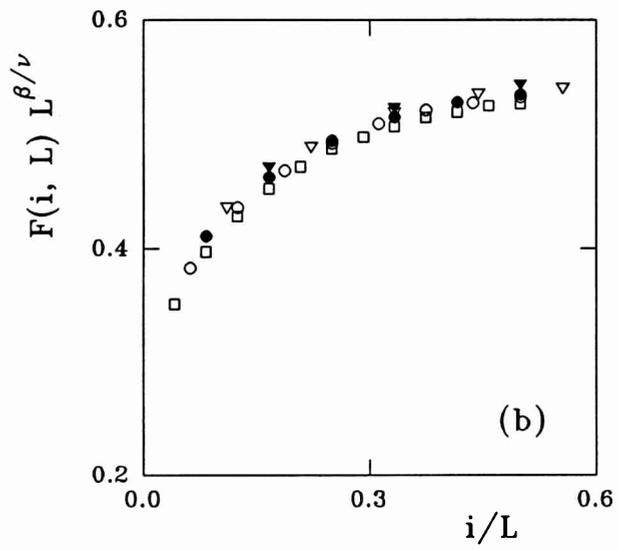
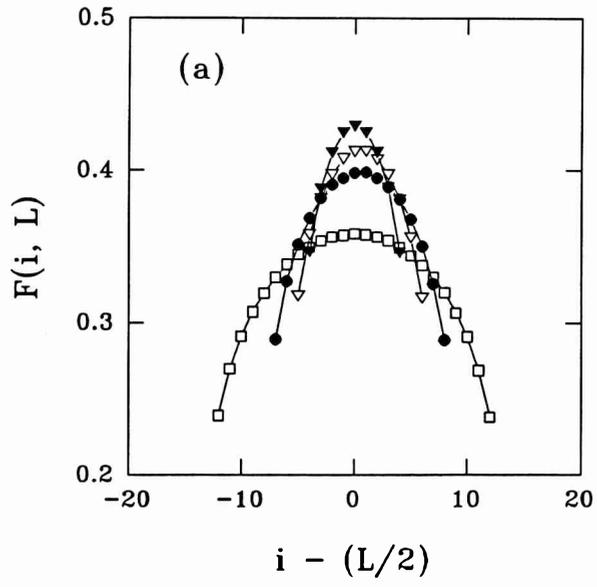
y esta integral puede ser expresada en términos de la variable  $u = i/L$ . Luego

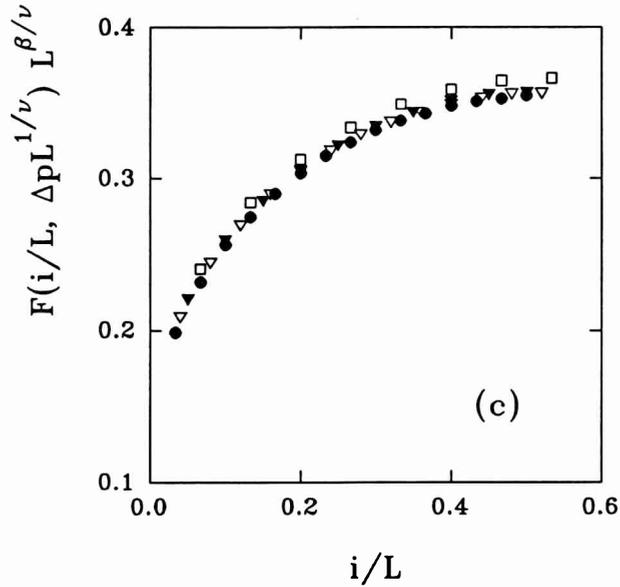
$$P(p) = L^x \int \bar{\bar{F}}[u, (p - p_c)L^{1/\nu}] du \quad (1.48)$$

A la probabilidad crítica y para grandes redes, la probabilidad de percolación se comporta como

$$P(p) \propto L^{-\beta/\nu} \quad (1.49)$$

donde  $\beta = 5/36$  en dos dimensiones [21-26]. Dado que cuando  $p = p_c$  el segundo argumento de  $\bar{\bar{F}}$  en la ecuación (1.48) se anula, se concluye a partir de las ecuaciones (1.48) y (1.49) que  $x = -\beta/\nu$ .





**Figura 1.8** (a) Gráfico de los perfiles de densidad  $F(i, L)$  versus  $\{i - (L/2)\}$  para redes de diferentes tamaños ( $L \times M$ ):  $\blacktriangledown$ ,  $9 \times 420$ ;  $\nabla$ ,  $12 \times 440$ ;  $\bullet$ ,  $16 \times 576$ ;  $\square$ ,  $25 \times 150$ . (b) Gráfico de  $F(i, L)L^{\beta/\nu}$  versus  $i/L$  para redes de distintos tamaños ( $L \times M$ ):  $\circ$ ,  $16 \times 576$ ;  $\bullet$ ,  $12 \times 440$ ;  $\nabla$ ,  $9 \times 420$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $6 \times 200$ ;  $\square$ ,  $24 \times 600$ . (c) Gráfico de  $F(i/L, \Delta p L^{1/\nu})L^{\beta/\nu}$  versus  $i/L$ , con  $\Delta p L^{1/\nu} = 0.24$ , para redes de diferentes tamaños ( $L \times M$ ):  $\square$ ,  $15 \times 120$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $20 \times 160$ ;  $\bullet$ ,  $30 \times 240$ ;  $\nabla$ ,  $25 \times 200$ .

Luego, la ecuación (1.45) resulta

$$F(i, \xi, L) = L^{-\beta/\nu} \bar{F}[i/L, (p - p_c)L^{1/\nu}]. \quad (1.50)$$

La figura 1.8a muestra un gráfico de los perfiles de densidad  $F(i, L)$  versus  $\{i - (L/2)\}$  en el umbral de percolación y utilizando redes de distintos tamaños. Como consecuencia de la pérdida de vecinos en los bordes de la muestra, los perfiles decrecen cuando  $i \rightarrow 1$  e  $i \rightarrow L$ . Este efecto se propaga hacia el masivo y los perfiles resulta simétricos alrededor de  $i = L/2$ , como puede apreciarse en la figura 1.8a. Esta característica se puede comprender en términos de la longitud de correlación  $\xi$  la cual, si bien sería infinito en el límite  $L \rightarrow \infty$  y a  $p_c$ , en

el presente caso resulta del orden de  $\xi \cong L$  debido a la restricción geométrica. Perfiles de densidad obtenidos para  $p < p_c$ , son también simétricos y exhiben un pico en  $i = L/2$ . La presencia de picos en los perfiles de densidad en vez de perfiles chatos para el masivo de las muestras con  $L = 100$ , sugiere que aún lejos de  $p_c$  (por ejemplo  $p = 0.50$ ) la longitud de correlación es suficientemente grande. A causa de la simetría, los datos correspondientes a filas equidistantes de  $i = L/2$  son promediados. Cabe mencionar que los perfiles del parámetro de orden del modelo de Ising ferromagnético en ausencia de campo magnético externo [32] (o equivalentemente los perfiles de cubrimiento del modelo de gas de red [33]), también exhiben una simetría análoga pero, en contraste con los perfiles de densidad de la figura 1.8a, éstos se aplanan suavemente cerca de la temperatura crítica.

Con el propósito de analizar la hipótesis de escala contenida en la ecuación (1.50), se trabaja en principio a la concentración crítica. A  $p \equiv p_c$  se anula la segunda variable en la ecuación (1.50), y entonces es conveniente realizar un gráfico de  $F(i, L)L^{\beta/\nu}$  versus  $i/L$ . El colapso de los datos para redes de diferentes tamaños que se observa en la figura 1.8b es bastante bueno, si se consideran los errores asociados con la simulación Monte Carlo, y sugiere que la ecuación (1.50) es válida. Sin embargo, una inspección cuidadosa de la figura 1.8b, revela la existencia de una desviación sistemática: cuanto menor es el ancho de la red  $L$ , mayor es el valor de  $F(i, L)L^{\beta/\nu}$ . Este comportamiento no es sorprendente ya que una desviación similar ha sido observada en el estudio de la probabilidad de pertenecer al cluster de percolación, la cual está relacionada con los perfiles de densidad de acuerdo con las ecuaciones (1.46) a (1.49), y es debida a una corrección de orden  $L^{-1}$  del término dominante [35]. Otra posibilidad de análisis de la ecuación (1.50) es calcular los perfiles de densidad para  $p \neq p_c$  y manteniendo la segunda variable de escala constante. La figura 1.8c muestra un gráfico de  $F(i, L)L^{\beta/\nu}$  versus  $i/L$  para redes de distintos tamaños, con  $p \neq p_c$  y manteniendo  $(p - p_c)L^{1/\nu} \equiv 0.24$  constante. Una vez más se observa el colapso de los datos sobre una curva, aunque la desviación

sistemática antes mencionada está también presente.

Una inspección de los perfiles de densidad colapsados de las figuras (1.8) b) y (1.8) c), sugiere una simetría parabólica alrededor del máximo. En efecto, cerca del máximo de la curva, los datos pueden ser ajustados mediante una curva de la forma  $(F_{max} - F)L^{\beta/\nu} \propto \{[(L/2) - i]/L\}^\delta$ , con  $\delta \cong 1.8$ . Sin embargo, un mejor ajuste es logrado usando un polinomio de tercer grado de la forma  $Q(X) \cong 0.18 + 0.96X - 1.82X^2 + 1.24X^3$ , con  $X \equiv i/L$ .

• **III. La función de correlación a  $p_c$ .**

La función de correlación es la probabilidad de que dos sitios separados una distancia  $r$  pertenezcan al mismo cluster. Debido a la geometría usada, ( $L \ll M$ ) sólo es de interés el estudio de la función de correlación en una dirección paralela a la dirección  $M$  sobre los clusters de percolación a  $p_c$ . A partir de argumentos de escala se tiene que, en la vecindad de  $p_c$ , la función de correlación  $G(r, \xi, L, M)$  se comporta como [21-26]

$$G(r, \xi, L, M) = L^{-\beta/\nu} g[r/L, (p - p_c)L^{1/\nu}, L/M]. \quad (1.51)$$

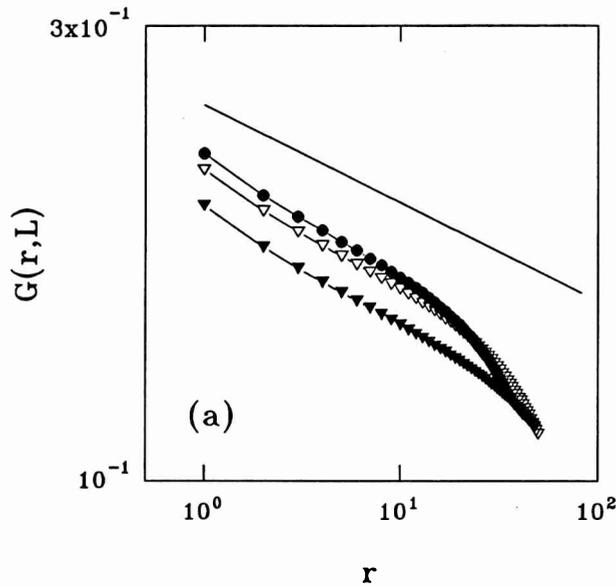
donde  $r$  es ahora la distancia paralela medida en la dirección  $M$ , y  $g$  es una adecuada función de escala. En el límite  $L \ll M$ , la función  $g$  resulta independiente de la razón  $L/M$ , y en el umbral de percolación, se anula la segunda variable con lo cual la ecuación (1.51) resulta

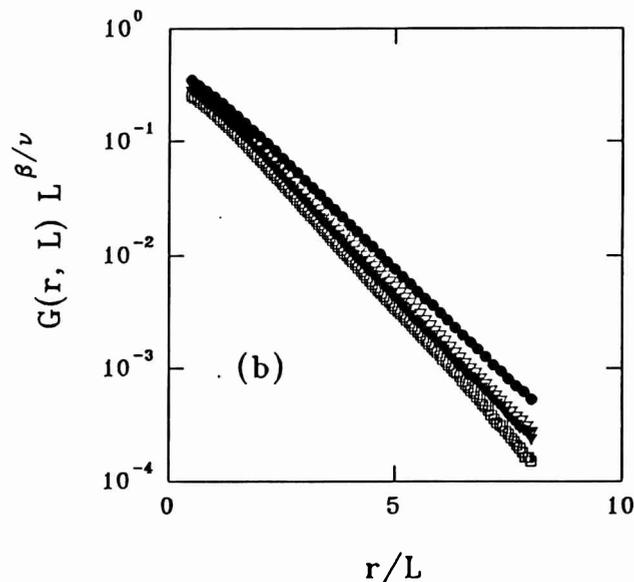
$$G(r, L) = L^{-\beta/\nu} g(r/L). \quad (1.52)$$

Notar que en el límite termodinámico se tiene que  $g(r/L) \propto (r/L)^{-\beta/\nu}$ , de manera que  $G(r) \propto r^{-\beta/\nu}$ . Luego, para  $r \ll L$ ,  $G(r, L)$  exhibe el denominado comportamiento algebraico [50], mientras que para  $L < r < M$  emerge un comportamiento exponencial de la forma

$$G(r, L) \propto L^{-\beta/\nu} \exp(-ar/L). \quad (1.53)$$

donde  $a$  es una constante independiente de  $L$  [50]. La interpretación física de este comportamiento es la siguiente [50]: cuando se utilizan argumentos de escala en el estudio de un sistema que es finito en todas sus dimensiones, una de las longitudes importantes a ser tenida en cuenta es su dimensión lineal más pequeña ( $L$ ). Así, al aproximarse al punto crítico, la longitud de correlación crece uniformemente hasta  $\xi \sim L$ , luego el sistema "siente" su tamaño finito y en consecuencia  $\xi$  permanece del orden de  $L$  sobre toda la región crítica. Luego,  $G(r, L)$  debe presentar un decaimiento exponencial en la dirección  $M$ , con una longitud de correlación proporcional a  $L$ . Por lo tanto existen dos regiones, denominadas región algebraica y región exponencial, que resultan de particular interés cuando se analiza el comportamiento crítico de la función de correlación. Notemos también que  $G(r, L)$  es obtenida promediando sobre los distintos valores de  $i$  con  $1 \leq i \leq L$ .





**Figura 1.9** (a) Gráfico logarítmico de la función de correlación  $G(r, L)$  versus  $r$  dentro de la región algebraica ( $r \ll L$ ), obtenido para redes de diferentes tamaños ( $L \times M$ ):  $\bullet$ ,  $70 \times 280$ ;  $\nabla$ ,  $100 \times 300$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $150 \times 600$ . La recta dibujada tiene pendiente  $\beta/\nu = 5/48$  y ha sido incluida para comparación. (b) Gráfico semi-logarítmico de  $G(r, L)L^{\beta/\nu}$  versus  $r/L$ , dentro del régimen exponencial ( $L < r < M$ ), realizado con redes de distintos tamaños ( $L \times M$ ):  $\bullet$ ,  $6 \times 420$ ;  $\nabla$ ,  $9 \times 576$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $12 \times 384$ ;  $\square$ ,  $16 \times 384$ .

La figura 1.9a muestra un gráfico de  $G(r, L)$  versus  $r$  en escala logarítmica para redes de diferentes tamaños dentro del régimen algebraico ( $r \ll L$ ). De acuerdo con la ecuación (1.52), uno debería esperar un comportamiento lineal de pendiente dada por  $\beta/\nu = 5/48 \cong 0.105$ , sin embargo, la pendiente obtenida de las rectas de la figura 1.9a es  $\beta/\nu \cong 0.128 \pm 0.003$ , donde la barra de error refleja solamente el error estadístico. Fue intentado sin éxito un colapso de los datos.

Por otro lado la figura 1.9b muestra un gráfico semilogarítmico de  $G(r, L)L^{\beta/\nu}$  versus  $r/L$  (ver ecuación (1.53)) para redes distintos tamaños dentro del régimen exponencial ( $L < r < M$ ). A pesar de que los puntos correspondientes a

las distintas redes están sobre rectas, el colapso de los datos es pobre. Cabe mencionar que la razón  $L/a$ , que entra como argumento de la exponencial en la ecuación (1.53), es la longitud media de los clusters ( $\langle l \rangle$ ) medida en la dirección  $M$  [50]. Además se ha obtenido a partir de una medida directa que  $\langle l \rangle \cong 2L$  [51]. Por otro lado, a partir de las pendientes de las rectas de la figura 1.9b se obtienen valores de  $a$  entre  $a \cong 0.38$  ( $L = 6 \times M = 420$ ) y  $a \cong 0.46$  ( $L = 24 \times M = 576$ ). Este resultado sugiere que, en el límite termodinámico, el valor esperado de  $a$  ( $a \cong 0.5$ ) sería recuperado.

Es interesante notar que el crecimiento de clusters de percolación en la dirección  $L$ , bajo el vínculo  $L \ll M$ , puede ser comparado cualitativamente con el desarrollo de dominios de *spin-up* y *spin-down* a través de la muestra, observado en el estudio del modelo de Ising ferromagnético en la misma geometría, y en ausencia de campos externos [32-34]. A partir de argumentos de invariancia conforme [52] y de estudios Monte Carlo del comportamiento exponencial de función de correlación [32, 33], la distancia promedio  $\langle l_d \rangle$  entre bordes de dominios con distinto spin esta dada por  $\langle l_d \rangle = (\pi/2)^{-1}L$ . En conclusión, el análisis de los datos de las figura 1.9a y 1.9b, condujo a que los exponentes  $\beta/\nu$  calculados no coinciden con los valores exactos, como así también a un pobre colapso de la función de correlación. Es posible comprender estas desviaciones si se tiene en cuenta que, algunos de los exponentes que gobiernan el comportamiento crítico de ciertas propiedades en el masivo, pueden ser diferentes de aquellos que son válidos al aproximarse a la superficie del sistema. Por ejemplo, la intersección de un cluster de percolación con la superficie de la red, reduce fuertemente la conectividad y causa en consecuencia un gran aumento del valor del exponente  $\beta$  ( $\beta_s \cong 0.398 \pm 0.005$  [53], donde  $\beta_s$  es el exponente correspondiente al parámetro de orden en la superficie del sistema). Sin embargo el exponente  $\nu$  no se altera. Los resultados previos concernientes a la función de correlación en la dirección  $M$ , involucran promedios sobre filas pertenecientes no sólo al masivo, sino también a la superficie y cercanas a ella. Luego, debido a la contribución de las últimas, la razón  $\beta/\nu$

obtenida de la figura 1.9a sobrestima levemente el valor exacto.

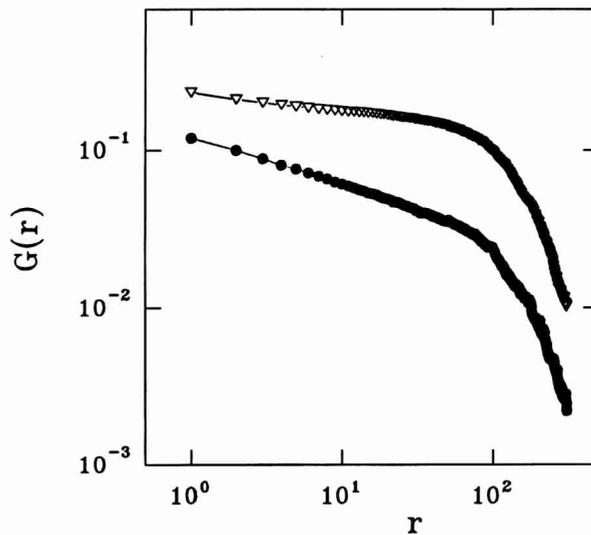
Por otro lado, la corrección que se debería introducir en los perfiles de densidad debido al cambio del exponente  $\beta$  (ecuación (1.50)), resulta irrelevante en vista del excelente colapso de los datos de la figuras 1.8b y 1.8c.

En virtud de las consideraciones anteriores, es de interés analizar el crossover entre el comportamiento en el masivo y el comportamiento superficial en los exponentes críticos para percolación en dos dimensiones. En efecto, el comportamiento crítico en superficies y el desarrollo de métodos para el cálculo de los exponentes críticos asociados, son tópicos de gran interés no sólo en teoría de percolación [53-57, y referencias allí citadas] sino también en el estudio de fenómenos críticos térmicos [32, 58, y referencias allí citadas]. Los exponentes superficiales están relacionados entre si y con los exponentes del masivo, de manera tal que, si sólo uno de ellos es conocido, los restantes pueden ser determinados [53-58]. En particular, son conocidos los valores de los exponentes críticos superficial  $\beta_s$  ( $\beta_s \cong 0.4$  [53, 56]) y del masivo  $\beta_b$  ( $\beta_b = 5/36$  [23-26]) asociados con el parámetro de orden para percolación en dos dimensiones. Los exponentes serán evaluados calculando la función de correlación mediante el método Monte Carlo. Una característica interesante del presente análisis es que el crossover entre  $\beta_s$  y  $\beta_b$  puede ser comprendido en términos de una aproximación de escala general denominada *multiscaling* [59]. Esta novedosa aproximación de escala, introduce un conjunto infinito de exponentes obtenidos variando en forma continua un parámetro característico. Más específicamente, el presente modelo exhibe una estructura muy rica, dado que la dimensión fractal de los clusters de percolación varía en forma continua desde  $D_s = 1 - \beta_s/\nu$  hasta  $D_b = 2 - \beta_b/\nu$ , para la superficie y el masivo respectivamente, donde  $\nu = 4/3$  es el exponente crítico asociado con la longitud de correlación, el cual es el mismo tanto en la superficie como en el masivo. La razón física que conduce a este resultado es, que la única longitud divergente que debe ser considerada para describir el comportamiento crítico, tanto en la superficie como en el masivo del sistema, es la longitud de correlación  $\xi \propto |p - p_c|^{-\nu}$ .

Como se mencionó anteriormente, los exponentes críticos correspondientes al parámetro de orden son determinados mediante el cálculo de la función de correlación  $G(r, i)$ , la cual es definida como la probabilidad de que dos sitios de la  $i$ -ésima fila ( $i = 1, \dots, L$ ) separados una distancia  $r$  pertenezcan al mismo cluster. En el umbral de percolación  $G(r, i)$  se comporta como [23-26]

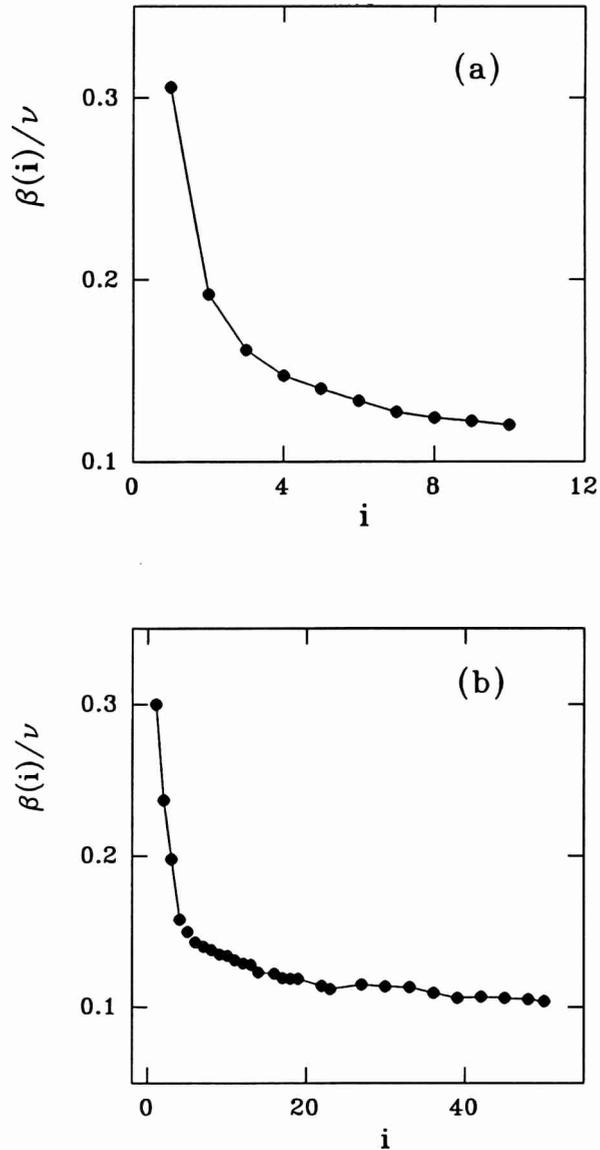
$$G(r, i) \propto r^{-\beta(i)/\nu} \quad (1.54)$$

donde la dependencia del exponente  $\beta$  con la distancia a la superficie ha sido indicada explícitamente.



**Figura 1.10.** Gráfico logarítmico de la función de correlación  $G(r, i)$  versus  $r$  para  $i = 1$  ( $\bullet$ ) y  $i = L/2$  ( $\nabla$ ), respectivamente. Todas las longitudes son medidas en unidades de red. El tamaño de la red es  $L = 100 \times M = 700$  y los datos fueron promediados sobre 200 configuraciones distintas.

La figura 1.10 muestra un gráfico en escala logarítmica de  $G(r, i)$  versus  $r$  evaluado para  $i = 1$  e  $i = L/2$ .



**Figura 1.11.** Gráfico del exponente crítico  $\beta/\nu$  versus  $i$ . El valor del exponente fue obtenido de la función de correlación calculada sobre la  $i$ -ésima fila ( $i = 1, \dots, L$ ) en la dirección  $M$ . Todas las longitudes son medidas en unidades de red. (a) El tamaño de la red es  $L = 20 \times M = 600$  y los datos fueron promediados sobre  $8 \times 10^3$  configuraciones diferentes. (b) El tamaño de la red es  $L = 100 \times M = 600$  y los datos fueron promediados sobre  $3 \times 10^2$  configuraciones diferentes.

Pueden ser observados claramente los dos regímenes característicos de  $G(r, i)$ : (i) el régimen algebraico para  $r < L$  y (ii) el decaimiento exponencial para  $L < r < M$  [50]. Cabe mencionar que para el cálculo de los exponentes críticos sólo son consideradas las rectas dentro del régimen algebraico. En efecto, para  $i = 1$  se obtiene  $\beta_s/\nu = 0.30 \pm 0.03$ , en buen acuerdo con los resultados Monte Carlo  $\beta_s/\nu \cong 0.31$  [56] y  $\beta_s/\nu = 0.299 \pm 0.005$  [53], y en parcial acuerdo con el presunto valor exacto  $\beta_s/\nu = 1/3$  [57]. Por otra parte, para  $L/2 = 50$  se obtiene  $\beta(50)/\nu \cong 0.104 \pm 0.005$ , con lo cual el valor del masivo  $\beta_b/\nu = 5/48$  es prácticamente recobrado. El crossover entre el comportamiento superficial y del masivo de los exponentes críticos resulta evidente en la figura 1.11a, donde se muestra un gráfico de  $\beta(i)/\nu$  versus  $i$ . Un gráfico similar, donde se observa el mencionado crossover se muestra en la figura 1.11b. Se puede apreciar en las figuras (1.11) a) y b) que  $\beta(i)/\nu$  decrece abruptamente muy cerca de la superficie y luego se aproxima al valor del masivo. Tal comportamiento sugiere un decaimiento exponencial de la forma

$$[\beta(i/L) - \beta_b]/\nu = \{[\beta_s - \beta_b]/\nu\} \exp[-C(i-1)/L] \quad (1.55)$$

donde para  $i = 1$  ( $i \rightarrow \infty$ ) el valor  $\beta(i) = \beta_s$  ( $\beta(i) = \beta_b$ ) es recobrado y  $C$  es una constante. Se debe notar que la hipótesis de *multiscaling* ha sido introducida explícitamente al suponer  $\beta(i, L) = \beta(i/L)$  [59]. Con el propósito de evaluar la validez de la conjetura contenida en la ecuación (1.55), se muestra en la figura (1.12) un gráfico semi-logarítmico de  $[\beta(i/L) - \beta_b]/\nu$  versus  $(i-1)/L$  para redes de diferentes tamaños. La recta obtenida y el excelente colapso de los datos, sostiene fuertemente la validez de la ecuación (1.55) y de la hipótesis de *multiscaling*. De la pendiente de la recta se obtiene el valor de  $C \cong -5.5$ , mediante un ajuste de los datos por cuadrados mínimos. Además la ordenada al origen de la recta da  $[\beta_s - \beta_b]/\nu \cong 0.200 \pm 0.005$ , en excelente acuerdo con el valor esperado  $[\beta_s - \beta_b]/\nu \cong 0.1958$ .

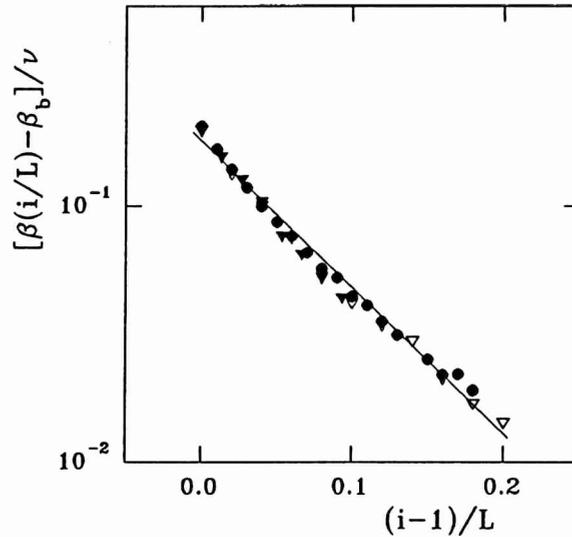


Figura 1.12. Gráfico semi-logarítmico de  $[\beta(i/L) - \beta_b]/\nu$  vs  $(i-1)/L$  realizado utilizando datos obtenidos de redes de distintos tamaños:  $L = 50$ ,  $M = 700$  ( $\bullet$ );  $L = 100$ ,  $M = 600$  ( $\nabla$ );  $L = 70$ ,  $M = 900$  ( $\blacktriangledown$ ). Todas las longitudes son medidas en unidades de red. Los exponentes son calculados después de promediar entre  $10^2$  a  $10^3$  configuraciones distintas.

Se presume que la hipótesis de multiscaling sea una característica general de diversos procesos dinámicos, tales como el DLA [59], la descomposición spinoidal, que sucede cuando un sistema inicialmente desordenado a alta temperatura es "enfriado" bruscamente por debajo de su temperatura crítica [59], la forma en que se propaga el daño en sistemas magnéticos, tales como el modelo de Ising ferromagnético tridimensional [60], etc. Es interesante comprender ahora el fundamento físico que se halla detrás de la hipótesis de multiscaling. Para ello se analiza el crecimiento de una estructura DLA. Existen dos regiones bien diferenciadas [61]: una región estática caracterizada por una probabilidad de crecimiento prácticamente nula y una región activa en donde ocurre la mayor parte del crecimiento de la estructura. Consecuentemente, los perfiles

de densidad exhiben exponentes diferentes a distintas distancias del centro del agregado, y entonces, la región exterior (activa) de la estructura tiene una dimensión fractal menor que la región interior (estática) [59]. Se debe ahora conciliar el hecho que los clusters de percolación estudiados son agregados estáticos, mientras que la situación física discutida anteriormente es válida para crecimiento dinámico. Con tal propósito, se considera un cluster de percolación en el umbral de percolación y para  $L \rightarrow \infty$ . Después de haber fijado arbitrariamente un cierto origen  $O$ , se corta el cluster imponiendo un borde a una distancia  $L_1$  de  $O$ . La reducción en la conectividad causada por el corte se propagará hasta  $O$  (recordar que la longitud de correlación es infinito). Así que se medirá  $\beta_s$  en  $L_1$  y un valor de  $\beta$  cercano a  $\beta_b$  en  $O$ . Si se efectúa un segundo corte  $L_2 > L_1$ , se observa que parte de la masa del cluster que había sido mutilada por el primer corte, contribuirá ahora a  $G(r)$  en  $O$ . Luego, se medirá nuevamente  $\beta_s$  en  $L_2$  pero se obtendrá en  $O$  un valor de  $\beta$  más aproximado que en el primer corte a  $\beta_b$ . Este proceso puede ser continuado  $n$  veces, pero aún para distancias  $L_n$  muy grandes se tiene, a causa de que la longitud de correlación  $\xi$  es infinita, una probabilidad pequeña pero finita de crecimiento en el origen  $O$  y consecuentemente los valores de  $\beta$  medidos se aproximarán asintóticamente a  $\beta_b$ . Entonces, las regiones interior y exterior de la estructura DLA son cualitativamente similares a las regiones cercana a  $O$  y cercana a  $L_n$  en el presente caso respectivamente.

## 1.4 Conclusiones

Se estudió el comportamiento crítico del modelo standard de percolación en una geometría rectangular con condiciones de contorno abiertas y manteniendo el vínculo  $L \ll M$ . Se observa un crecimiento preferencial de clusters de percolación en la dirección  $L$ . A  $p_c$  se desarrollan frecuentemente varios clusters que percolan en dicha dirección. El número medio de clusters  $N_{cl}$  que percolan en la dirección  $L$  se comporta como  $N_{cl} \cong (3/8)(L/M)^{-\delta}$  con  $\delta = 1$  [51]. Debido a estas características,

se han analizado diversas cantidades de interés, como la función de distribución de largos, los perfiles de densidad y la función de correlación de los clusters que percolan en la dirección  $L$ .

Se encuentra una curva universal para la función de distribución de largos  $D(l/L)$  de tipo exp-exp. Sobre esta curva colapsan todos los puntos correspondientes a las redes de diferentes tamaños. Cabe mencionar que a la concentración crítica, la distribución de masa dentro de la distancia topológica para el cluster de percolación generado sobre la red de Bethe [48] y sobre una red cuadrada [44] exhiben también un comportamiento del tipo exp-exp.

Los perfiles de densidad  $F(i, L)$  a  $p_c$  presentan simetría alrededor del máximo ubicado en  $i = L/2, \forall L$ . Esta característica de los perfiles es consecuencia de la pérdida de vecinos en los bordes de la muestra ( $i \rightarrow 1, i \rightarrow L$ ) debido a las condiciones de contorno adoptadas. Mediante argumentos de escala es logrado un buen colapso de los perfiles tanto a  $p = p_c$  como para  $p > p_c$ . Los puntos correspondientes a la diferentes redes, colapsan sobre una curva universal la cual es aproximada mediante un polinomio de tercer grado.

Finalmente, la función de correlación  $G(r, L)$  presenta dos regiones con comportamientos bien diferenciados: una región algebraica ( $r \ll L$ ) y una región exponencial ( $L < r < M$ ). La función de correlación  $G(r, L)$  es obtenida promediando sobre los distintos valores de  $i$  con  $1 \leq i \leq L$ . El valor del exponente  $\beta/\nu$  obtenido en la región algebraica ( $\beta/\nu = 0.128 \pm 0.003$ ) sobrestima el valor esperado ( $\beta/\nu = 5/48$ ). Utilizando argumentos de escala, no se logra un buen colapso de los datos en la región exponencial. Mediante un ajuste por cuadrados mínimos de los decaimientos exponenciales, es posible obtener el valor  $L/a$  que es al largo medio  $\langle l \rangle$  de los clusters de percolación medido en la dirección  $M$  [50]. Se observa que aumentando el ancho  $L$  de la red, los valores de  $a$  crecen, aproximándose a  $a \approx 0.5$ . Este valor de  $a$  está en concordancia con el valor  $\langle l \rangle \approx 2L$  del largo medio, obtenido mediante una medida directa [51]. La desviación registrada en el valor del exponente  $\beta/\nu$  y el pobre colapso de los datos de la función de correlación en la región exponencial es interpretado como consecuencia de la reducción en la conectividad causada cuando

un cluster de percolación es cortado por la superficie de la muestra. Dado que a  $p = p_c$  y en una red de tamaño finito  $L \times M$  ( $L \ll M$ ), la longitud de correlación  $\xi$  se mantiene del orden de  $L$ , la perturbación originada en la superficie se propaga en todo el masivo. Como consecuencia de esto, cada fila  $i$  con  $1 \leq i \leq L/2$  posee sus propios exponentes críticos, con valores que van desde  $\beta_s/\nu \cong 0.30 \pm 0.03$  para  $i = 1$  a  $\beta_b/\nu \cong 0.104 \pm 0.005$  para  $i = L/2$ . Dichos exponentes se obtienen calculando las funciones de correlación  $G(i, r)$  con  $i = 1, \dots, L/2$ . El crossover superficie-masivo para los exponentes críticos es interpretado finalmente en términos de una novedosa y general hipótesis de escala denominada "multiscaling" la cual conduce naturalmente a que cada fila del cluster de percolación a  $p_c$  (tomada en la dirección  $M$ ) tiene diferente dimensión fractal.

## Capítulo 2

# Modelo de adsorción de dímeros calientes

### 2.1 Introducción

El modelo de adsorción secuencial aleatoria (RSA) de dímeros sobre redes ha sido investigado intensivamente, ya que es útil para el estudio de quimisorción sobre superficies monocristalinas, adsorción en sistemas coloidales, reacciones sobre cadenas de polímeros, etc [62]. Los estudios realizados han apuntado fundamentalmente al entendimiento de la cinética del proceso RSA, de las propiedades percolativas de la monocapa depositada, como así también el estado de saturación. Las propiedades y el comportamiento percolativo de la RSA de monómeros sobre redes bidimensionales está muy bien entendida [23-26]. Por otro lado la cinética y el estado de saturación en la RSA de dímeros, llamado el problema del llenado aleatorio de dímeros (RDF), son procesos no triviales que han sido tratados por diferentes autores utilizando diversas técnicas [62]. Sólo unos pocos trabajos han sido dedicados a tratar las propiedades percolativas en el modelo RDF. Los umbrales de percolación y los exponentes críticos han sido ya determinados [63, 64]. Dichos exponentes toman valores idénticos que en el caso de la RSA de monómeros.

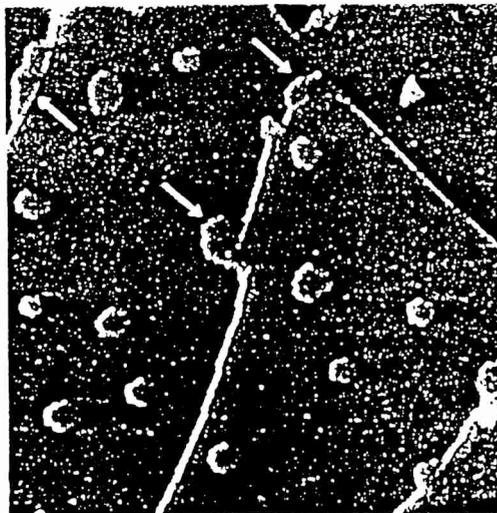
Dímeros calientes son moléculas que después de ser adsorbidas sobre una superficie se disocian, y cada uno de los monómeros calientes resultantes, efectúa un

vuelo balístico en sentidos opuestos hasta una distancia máxima  $R$  del sitio original de adsorción. Cabe mencionar que la movilidad, producto de la incapacidad de la partícula para liberar instantáneamente energía luego de la formación del enlace con la superficie, parece ser un proceso común en la naturaleza. Por cierto, la movilidad superficial de los átomos adsorbidos resultante de la disociación de dímeros, ha sido ya considerada en modelos para la quimisorción del nitrógeno sobre la cara (100) del tungsteno [65, 66]. La influencia del mecanismo de adsorción de dímeros calientes en la reacción catalizada  $H_2(\text{hot}) + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$  sobre  $Pt$  policristalino, ha sido también analizada utilizando una aproximación de campo medio [67]. Además la formación de estructuras ordenadas metaestables resultantes de la adsorción de oxígeno sobre  $Pd(100)$  [62, 68, 69, y referencias allí citadas], también han sido entendidas suponiendo un mecanismo de disociación caliente para el  $O_2$ , donde probablemente la distancia que viaja un monómero sobre la superficie es bastante corta, digamos unas pocas constantes de red.

Recientemente, Ertl y colaboradores [70], basados en observaciones realizadas con un microscopio de efecto túnel (STM), han demostrado que las moléculas de oxígeno se quimisorben disociativamente sobre la superficie del  $Al(111)$  y que al menos parte su exceso de energía aparece como grados de libertad paralelos a la superficie, dando lugar a un movimiento traslacional durante el cual esta energía es disipada. Se dan evidencias también, que los átomos resultantes de la disociación de estas moléculas calientes, realizan vuelos en sentidos opuestos de al menos  $80\text{Å}$  sobre la superficie antes de detenerse definitivamente. Además, se estima que cada átomo de oxígeno, tendría aproximadamente una velocidad inicial de  $6.5 \times 10^3$  m/s, viajando una distancia  $R \cong 40\text{Å}$  dentro del picosegundo [70]. Es de importancia notar que el mecanismo de adsorción de dímeros calientes difiere considerablemente del mecanismo de relajación por difusión en deposición de dímeros, el cual ha sido estudiado muy recientemente [71-73].

En muy recientes estudios STM de adsorción de Xe sobre  $Pt(111)$  [74] se halla evidencia de que a muy bajas temperaturas los átomos de Xe se nuclean sobre las terrazas de la superficie de Pt. Este efecto puede ser observado en el gráfico 2.A

extraído de la referencia [74]. La figura muestra una micro-fotografía STM obtenida después de la adsorción de aproximadamente 0.06 de monocapa de Xe sobre Pt(111) y llevando posteriormente al sistema a la temperatura de 29 K.



Graf. 2.A STM micrograph ( $1500 \text{ \AA} \times 1500 \text{ \AA}$ ) of a Pt(111) surface covered with about 0.06 ML of Xe adsorbed at 17 K and annealed at 29 K. The image was recorded at 17 K (tip bias  $V = -0.2 \text{ V}$ , tunneling current  $I = 1 \text{ nA}$ ). The STM signal is high-pass filtered such that the surface appears to be illuminated from the left. Several Xe islands have nucleated on the Pt terraces and some have grown from the Pt step edge onto the lower Pt terrace (arrows). The upper Pt step edges are decorated with a single atomic chain of Xe atoms.

Unas pocas islas de Xe se han nucleado sobre las terrazas de Pt. Estas pueden ser reconocidas por poseer bordes más rugosos que los rectos bordes de los escalones que separan terrazas contiguas de la superficie de Pt(111). Se observa también muy claramente que los bordes de los escalones están cubiertos por una línea delgada de átomos de Xe, formando una especie de cadena. Nótese que la población de los sitios del borde es muy alta considerando el bajo cubrimiento de Xe. Una cuestión de gran importancia es comprender cómo los átomos de Xe podrían alcanzar los bordes de los escalones de Pt, ya que la movilidad térmica a estas temperaturas es despreciable. Puede ser dada una explicación convincente, en términos de la movilidad

transitoria que adquieren los átomos de Xe, como consecuencia de la conversión de la energía de ligadura, relajada después de la adsorción, en energía cinética lateral [75]. Esto no es más que un mecanismo caliente de adsorción de monómeros. Luego, es de interés el estudio del modelo de adsorción de dímeros muy calientes, el cual difiere del modelo de adsorción de dímeros calientes en que, ocurrida la adsorción del dímero, los monómeros resultantes de la disociación sólo pueden ser detenidos por los bordes del sistema o por otro monómero en estado de reposo sobre la superficie. Se denominarán dímeros muy calientes (VHD) a los dímeros calientes que tengan estas características. El estudio del modelo de deposición de dímeros muy calientes es relevante para el entendimiento de la adsorción de átomos y moléculas calientes sobre sustratos confinados tales como superficies monocristalinas escalonadas y muestras policristalinas, donde los escalones y los bordes de los cristales actúan como barreras físicas que pueden detener efectivamente el vuelo del adsorbato. Como se discutió anteriormente a partir de la imagen STM del gráfico 2A, se observa una notable preferencia en la nucleación de átomos de Xe sobre los bordes de los escalones del Pt(111). Cabe mencionar además que ha sido observada también mediante imágenes STM, una notable preferencia para la nucleación de átomos de oxígeno producto de la disociación de  $O_2$  (hot) sobre los bordes de los escalones [76].

## 2.2 Introducción Teórica

Se tratarán en esta sección propiedades dinámicas de un sistema desordenado. Se verá que debido a la naturaleza fractal de los clusters cerca del umbral de percolación  $p_c$ , se alteran esencialmente las leyes de la dinámica transformándose en anómalas.

El proceso de difusión puede ser modelado por medio de un caminante aleatorio (*random walk*), el cual en una unidad de tiempo avanza un paso de longitud  $a$  hacia un sitio primer vecino escogido aleatoriamente de una red  $d$ -dimensional. Se supone que el caminante comienza a  $t = 0$  en el origen de la red. Pasado un tiempo  $t$  ( $t$

pasos), la posición del caminante está descripta por el vector

$$\mathbf{r}(t) = a \sum_{\tau=1}^t \mathbf{e}_{\tau} \quad (2.1)$$

donde  $\mathbf{e}_{\tau}$  es un vector unidad apuntando en la dirección del salto en el  $\tau$ -ésimo paso.

La distancia media que el caminante ha viajado después de  $t$  pasos está descripta por la raíz cuadrática media del desplazamiento  $\langle r^2(t) \rangle^{1/2}$ , donde el promedio  $\langle \rangle$  se realiza sobre todas las configuraciones de caminantes en la red. A partir de (2.1) se obtiene

$$\langle r^2(t) \rangle = a^2 \sum_{\tau, \tau'}^t \langle \mathbf{e}_{\tau} \cdot \mathbf{e}_{\tau'} \rangle = a^2 t + \sum_{\tau \neq \tau'} \langle \mathbf{e}_{\tau} \cdot \mathbf{e}_{\tau'} \rangle \quad (2.2)$$

Ya que los saltos a diferentes pasos  $\tau$  y  $\tau'$  no están correlacionados, se tiene que  $\langle \mathbf{e}_{\tau} \cdot \mathbf{e}_{\tau'} \rangle = \delta_{\tau, \tau'}$  y se obtiene la ley de Fick de la difusión

$$\langle r^2(t) \rangle = a^2 t \quad (2.3)$$

Notar que (2.2) y (2.3) son independientes de la dimensión  $d$  de la red. En el caso general, cuando el caminante tiene una probabilidad de permanecer en el sitio,  $\langle r^2(t) \rangle = 2dDt$ , donde  $D$  es la *constante de difusión*.

El desplazamiento cuadrático medio puede ser obtenido de la densidad de probabilidad  $P(r, t)$ , la cual es la probabilidad de encontrar el caminante después de  $t$  pasos en un sitio a una distancia  $r$  de su punto de partida, via  $\langle r^2(t) \rangle \sim \int dr r^2 P(r, t)$ .

La densidad de probabilidad puede ser hallada facilmente para una cadena lineal donde el caminante sólo puede saltar en dos direcciones. Los saltos hacia la izquierda o hacia la derecha ocurren con probabilidad  $p = 1/2$ . Se supone por simplicidad  $a = 1$ . Después de  $t$  pasos, el caminante ha saltado  $m$  veces hacia la derecha y  $t - m$  veces hacia la izquierda, así que su posición es  $x = m - (t - m) = 2m - t$ . La probabilidad de que esto suceda está descripta por una distribución binomial,

$$P(m, t) = \binom{t}{m} p^m (1-p)^{t-m} = \binom{t}{m} \left(\frac{1}{2}\right)^t. \quad (2.4)$$

Para grandes valores de  $t$ ,  $m$  y  $(t - m)$ , el coeficiente binomial puede ser expresado utilizando la fórmula de Stirling,  $t! \cong (2\pi t)^{1/2}(t/e)^t$ , etc. Dado que la distancia  $x$  que ha avanzado el caminante es mucho más pequeña que el número de pasos que ha dado hacia la derecha y hacia la izquierda, las expresiones resultantes pueden ser desarrolladas en serie en términos de  $x/t \ll 1$ , obteniendo finalmente

$$P(x, t) \cong \frac{1}{(2\pi t)^{1/2}} e^{-x^2/2t}. \quad (2.5)$$

La ecuación (2.5) representa una curva de Gauss de ancho  $t$ , el cual es idéntico a  $\langle x^2(t) \rangle$ . Ya que  $P(x, t)$  representa una probabilidad,  $\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x, t) = 1$ , lo cual es satisfecho por (2.5). En el caso más general de una red hipercúbica  $d$ -dimensional, (2.5) resulta simplemente

$$P(r, t) \sim \frac{1}{\langle r^2(t) \rangle^{d/2}} e^{-(d/2)r^2/\langle r^2(t) \rangle}. \quad (2.6)$$

donde  $\langle r^2(t) \rangle = 2Dt$ , y la probabilidad  $P(0, t)$  que el caminante regrese al origen después de  $t$  pasos es proporcional a  $\langle r^2(t) \rangle^{-d/2}$ .

La discusión hasta aquí realizada es válida para un sistema homogéneo. Un objeto fractal presenta grandes huecos, cuellos de botella (bottlenecks) y callejones sin salida (dangling ends) que frenan el movimiento del caminante. Debido a la autosimilaridad, los huecos, cuellos de botella y callejones sin salida ocurren sobre todas las escalas de longitud y en consecuencia el movimiento del caminante es resistido sobre todas las escalas de longitud. La ley de Fick (2.3) ya no es válida y el desplazamiento cuadrático medio es descrito por una ley de potencia más general [4, 77]

$$\langle r^2(t) \rangle \sim t^{2/d_w} \quad (2.7)$$

donde el nuevo exponente  $d_w$  (*exponente de difusión* o *dimensión fractal del caminante*) es siempre mayor que 2. En régimen asintótico  $t \rightarrow \infty$ , el número medio de sitios diferentes  $S_t$  visitados por el caminante después de  $t$  saltos (llamado espacio de exploración) está dado por

$$S_t \sim t^f \quad (2.8)$$

donde  $f$  es un exponente del caminante. Para un sustrato Euclídeo  $d$ -dimensional con  $d \geq 2$ ,  $f$  toma el valor unidad (difusión clásica), mientras que si  $f < 1$  la difusión es anómala. Para objetos fractales  $f = d_s/2$ , donde  $d_s$  es la dimensión espectral relacionada con la densidad de estados para las excitaciones escalares armónicas sobre el fractal [4, 78, 79].

En percolación estructuras fractales surgen para valores de  $p > p_c$  sobre escalas de longitud menores que la longitud de correlación  $\xi$ . Para escalas mayores que  $\xi$ , el cluster infinito puede ser considerado como homogéneo. Dado que la longitud de correlación es la única longitud de escala relevante, se espera que también las propiedades de transporte pueden ser descritas por simples leyes de escala.

El comportamiento para  $t \rightarrow \infty$  del desplazamiento cuadrático medio del caminante sobre el cluster infinito, está caracterizado por la constante de difusión  $D$ . Es claro que  $D$  está relacionada con la constante de difusión  $D'$  del sistema completo. El desplazamiento cuadrático medio (y en consecuencia  $D'$ ) es obtenido promediando sobre todos los posibles puntos de partida en el sistema. Sólo cuando el caminante parte de sitios sobre el cluster infinito, puede viajar de un extremo a otro del sistema y así contribuir a  $D'$ . Cuando el sitio de partida está sobre un cluster finito, el caminante queda confinado a visitar dicho cluster y así no contribuye a  $D'$ . Luego  $D$  y  $D'$  están relacionados por  $D' = DP_\infty$  (con  $P_\infty$  dado por (1.24)), lo cual implica

$$D \sim (p - p_c)^{\mu - \beta} \sim \xi^{-(\mu - \beta)/\nu}. \quad (2.9)$$

donde  $\mu$  es el exponente asociado con la constante de difusión  $D$ . Combinando (2.7) y (2.8), el desplazamiento cuadrático medio sobre el cluster infinito puede ser escrito como [77, 80]

$$\langle r^2(t) \rangle \sim \begin{cases} t^{2/d_w}, & t \ll t_\xi \\ (p - p_c)^{\mu - \beta} t, & t \gg t_\xi. \end{cases} \quad (2.10)$$

donde

$$t_\xi \sim \xi^{d_w} \quad (2.11)$$

describe la escala de tiempo que en promedio necesita el caminante para explorar el régimen fractal en el cluster. Como  $\xi \sim (p - p_c)^{-\nu}$  es la única longitud de escala,  $t_\xi$

es la única escala de tiempo relevante, y entonces se pueden vincular el régimen para tiempos cortos y para largos tiempos por medio de una función de escala  $f(t/\xi)$

$$\langle r^2(t) \rangle = t^{2/d_w} f(t/\xi). \quad (2.12)$$

Para satisfacer (2.9) se requiere  $f(x) \sim x^0$  para  $x \ll 1$  y  $f(x) \sim x^{1-2/d_w}$  para  $x \gg 1$ . La primera relación se satisface trivialmente. Ya que la constante de difusión se define como  $D = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle r^2(t) \rangle / 2Dt$ , la segunda relación en (2.9) conduce a  $D \sim t_\xi^{2/d_w-1}$ , que en conexión con (2.8) y (2.10) resulta en una relación entre los exponentes  $d_w$  y  $\mu$  [77, 80]

$$d_w = 2 + \frac{\mu - \beta}{\nu} \quad (2.13)$$

Existe otra técnica adecuada para el estudio de propiedades de transporte en sistemas desordenados que consiste en una reacción de caminantes limitada por difusión. El método puede ser explicado de la siguiente manera. Se considera por simplicidad y sin pérdida de generalidad, un cluster de percolación embebido en una red  $d$ -dimensional. Sobre cada sitio del cluster de percolación se coloca un caminante a  $t = 0$ . Un caminante es elegido aleatoriamente. Luego, un sitio primer vecino es escogido al azar, y solamente si dicho sitio pertenece al cluster de percolación el caminante es movido. Cuando dos caminantes se encuentran sobre un sitio del cluster de percolación, reaccionan y ambos son removidos del sistema, resultando desocupados los sitios que ocupaban. La ecuación que describe la reacción de caminantes es [81]

$$d\rho/dt = C_0\rho^X, \quad \rho \rightarrow 0 \quad (2.14)$$

donde  $\rho$  es el cubrimiento de caminantes,  $C_0$  es una constante y  $X$  es el orden de la reacción dado por:

$$X = \begin{cases} 1 + 1/f & f < 1 \\ 2 & f = 1. \end{cases} \quad (2.15)$$

Luego (2.14) dá la relación entre el orden de la reacción y el exponente del caminante del medio donde la reacción tiene lugar. Con el propósito de ser claros en

la presentación de los resultados de las simulaciones, es conveniente integrar (2.13); luego para  $\rho \rightarrow 0$  se tiene

$$1/\rho^{X-1} \sim t \quad (2.16)$$

o de forma equivalente

$$\log(1/\rho) \sim [1/(X - 1)] \log(t) \quad (2.17)$$

Consecuentemente, si los argumentos expuestos son válidos, un gráfico de  $\log(1/\rho)$  vs  $\log(t)$  debería dar una línea recta de cuya pendiente uno obtendría el orden de la reacción.

## 2.3 Resultados y su Discusión

- **I. Comportamiento crítico del modelo de adsorción secuencial aleatoria de dímeros calientes.**

El proceso de adsorción de dímeros calientes es simulado sobre una red cuadrada bidimensional de tamaño  $L \times L$  tomando condiciones de contorno periódicas. Las simulaciones siempre comienzan con redes vacías las que son cubiertas aleatoriamente con dímeros calientes hasta que una cierta fracción pre-determinada  $p$  de sitios resultan ocupados. Luego, al igual que en percolación,  $p$  es la probabilidad de ocupación. El algoritmo de adsorción es el siguiente:

(i) un sitio de la superficie (sitio 1) es seleccionado aleatoriamente. Si el sitio 1 está ocupado finaliza el intento, es decir, la adsorción no se efectúa. Pero si el sitio 1 está vacío, un sitio primer vecino, digamos el sitio 2, es escogido también en forma aleatoria. Si el sitio 2 está ocupado, finaliza nuevamente el intento ya que no hay lugar para la adsorción de un dímero. Pero si el sitio 2 está desocupado, se adsorbe un dímero sobre la superficie.

(ii) ocurrida la deposición, los monómeros resultantes de la disociación del dímero caliente, efectúan un vuelo balístico hasta una distancia máxima  $R$  del sitio original de adsorción, siendo  $R$  el único parámetro del modelo. El vuelo

se asume paralelo al eje de adsorción del dímero caliente. Si durante el vuelo un monómero choca contra una partícula ya adsorbida la cual se encuentra en reposo, el monómero detiene su vuelo y ocupa el sitio primer vecino del sitio de colisión en la dirección de incidencia. Esta suposición está avalada por el hecho que se debería esperar una alta eficiencia para la transferencia de energía y, en consecuencia, una alta probabilidad para que las partículas formen clusters [70]. Además, la formación de clusters de átomos de oxígeno sugiere la existencia de una fuerza neta atractiva entre aquellos adsorbidos sobre sitios primeros vecinos. Cabe mencionar, que la distribución de tamaño de clusters que este modelo predice [82], está en excelente acuerdo con los resultados experimentales reportados por Brune y colaboradores [70].

Las simulaciones fueron efectuadas sobre redes de tamaño  $100 \leq L \leq 450$  y  $0 \leq R \leq 100$  en el límite  $R \ll L$ , con el propósito de evitar correlaciones irrelevantes entre la partículas depositadas. Los promedios de las cantidades de interés se tomaron entre  $10^2$  a  $10^4$  configuraciones diferentes.

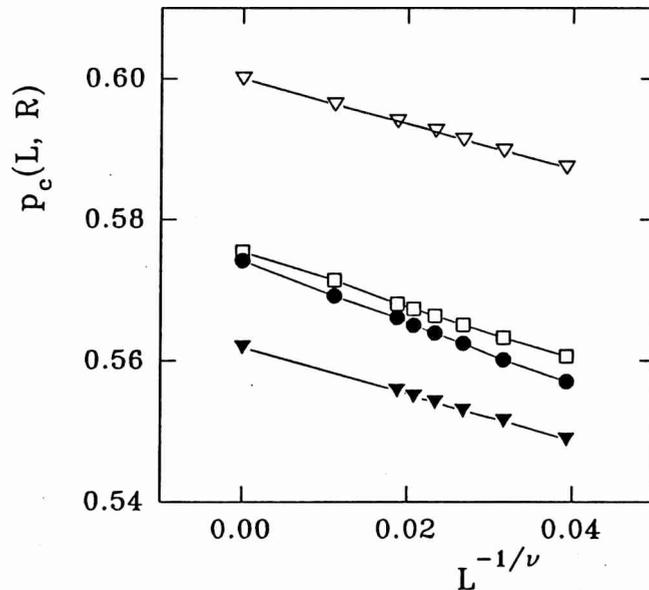
Es sabido que al trabajar con redes finitas existe una probabilidad finita de encontrar clusters de percolación para cualquier valor dado de la probabilidad de ocupación  $p$ . En consecuencia, es posible sólo determinar la dependencia con el tamaño de la red  $L$  de los valores de las probabilidades críticas  $p_c(L, R)$  [23]. Utilizando los mismos argumentos de escala que condujeron a la ecuación (1.33) se sigue que

$$p_c(R, L) = p_c(R) + S(R)L^{-1/\nu} \quad (2.18)$$

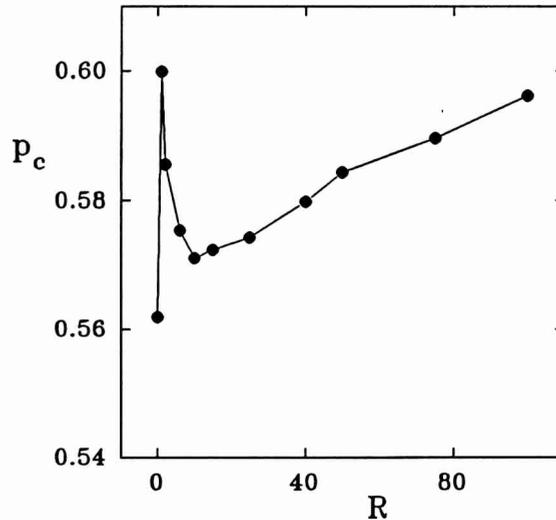
donde  $p_c(R)$  es la concentración crítica en el límite  $L \rightarrow \infty$ ,  $\nu$  es el exponente asociado con la longitud de correlación y  $S(R)$  es un factor el cual en principio puede depender de  $R$ .  $p_c(L, R)$  se determina mediante métodos standard [35, 83].

La figura 3.1 muestra un gráfico de  $p_c(L, R)$  versus  $L^{-1/\nu}$  para diferentes valores del parámetro  $R$ . Las rectas obtenidas sustentan firmemente la validez de la ecuación (2.18) con  $\nu = 4/3$ , es decir el valor del exponente asociado

con la longitud de correlación para la RSA de monómeros [23-26]. Efectuando una extrapolación al límite  $L \rightarrow \infty$ , es posible determinar  $p_c(R)$  por medio de un ajuste de los datos por cuadrados mínimos. Los valores extrapolados también se muestran en la figura 2.1. La figura 2.2 muestra la dependencia de  $p_c(R)$  con  $R$  ( $0 \leq R \leq 100$ ). El valor obtenido para  $R = 0$ , que corresponde a dímeros estandard, es  $p_c(R = 0) \cong 0.5619 \pm 0.0002$ , donde las barras de error reflejan solamente el error estadístico. Este valor está en excelente acuerdo con estimaciones previas del mismo ( $p_c(R = 0) \cong 0.562 \pm 0.001$ ) [62-64] y es considerablemente más pequeño que el mejor ajuste existente del valor del umbral de percolación para la RSA de monómeros ( $p_c \cong 0.5927460 \pm 0.0000005$ ) [84]. Por otra parte se observa que para  $R = 1$ ,  $p_c(R)$  crece bruscamente hasta el valor  $p_c(R = 1) \cong 0.6000 \pm 0.0001 > p_c$  y luego decrece para grandes valores de  $R$ .

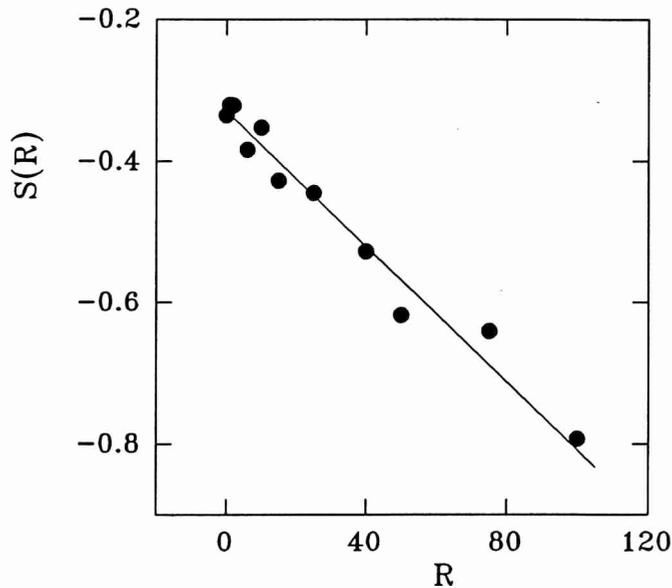


**Figura 2.1.** Gráfico de  $p_c(L, R)$  versus  $L^{-1/\nu}$  realizado usando distintos valores de  $R$  y tomando  $\nu = 4/3$ .  $\bullet$  :  $R = 25$ ;  $\square$  :  $R = 6$ ;  $\nabla$  :  $R = 1$ ; y  $\blacktriangledown$  :  $R = 0$ . Las rectas corresponden al ajuste por cuadrados mínimos de los datos.



**Figura 2.2.** Gráfico de  $p_c(R)$  versus  $R$ . El pico que se observa corresponde a  $R = 1$ .

Este comportamiento está en acuerdo cualitativo con el mínimo observado para el mismo valor de  $R$  en el cubrimiento de saturación para la adsorción secuencial de dímeros calientes [82]. En efecto, existe un mecanismo, el cual no está bien entendido por el momento [82], responsable de incrementar la cantidad de sitios aislados que bloquean la adsorción para  $R = 1$  y en consecuencia se debería esperar que los correspondientes clusters de percolación ocurran a una ocupación más alta de la red, como se muestra en la figura 2.2. Si el valor de  $R$  es incrementado más aún,  $p_c(R)$  decrece hasta un valor mínimo que se encuentra muy cercano a  $R \cong 10$ . Más allá del mínimo,  $p_c(R)$  crece monótonamente con  $R$ . El ajuste por cuadrados mínimos de los datos de la figura 2.2, permite también determinar la dependencia de la pendiente  $S(R)$  de la ecuación (2.18) con  $R$ . El comportamiento de  $S(R)$  se muestra en la figura 2.3.



**Figura 2.3.** Gráfico de la pendiente  $S(R)$  de la ecuación (2.18) versus  $R$ . La recta dibujada corresponde a  $S(R) = -K_1 - K_2R$ .

Se observa en el gráfico que  $S(R)$  no toma un valor universal sino que decrece monótonamente cuando  $R$  aumenta acorde a la expresión  $S(R) \cong -K_1 - K_2R$  ( $0 \leq R \leq 100$ ) donde  $K_1 = 0.340 \pm 0.015$   $K_2 = 0.0046 \pm 0.0003$ . Desafortunadamente, no poseemos por el momento la capacidad computacional suficiente para estudiar el comportamiento asintótico de  $p_c(R)$  y de  $S(R)$  para  $R > 100$ . El parámetro de orden del sistema es la probabilidad  $P_\infty$  de que un sitio pertenezca al cluster infinito. De acuerdo con la ecuación (1.26)  $P_\infty$  se comporta como:

$$P_\infty(\xi, L, R) = L^{-\beta/\nu} \bar{P}([p - p_c(R)]L^{1/\nu}). \quad (2.19)$$

donde  $\xi \propto |p - p_c|^{-\nu}$  es la longitud de correlación,  $\beta$  es el exponente crítico asociado con el parámetro de orden y  $\bar{P}$  es una función de escala adecuada. Notar que se asume que  $P_\infty$  depende de  $R$  sólo a través de  $p_c(R)$ .

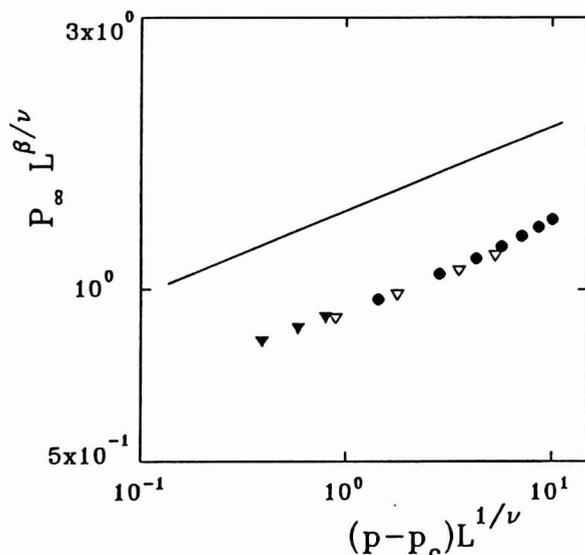


Figura 2.4. Gráfico logarítmico de  $P_\infty L^{\beta/\nu}$  versus  $(p - p_c)L^{1/\nu}$  obtenido utilizando redes de diferente tamaño, distintos valores de  $R$  y tomando  $\beta = 5/36$  y  $\nu = 4/3$ .  $\blacktriangledown$ :  $R = 2$ ;  $\nabla$ :  $R = 6$ ; y  $\bullet$ :  $R = 1$ . La línea recta de pendiente  $\beta$  ha sido trazada para comparación.

La figura 2.4 muestra un gráfico de  $P_\infty L^{\beta/\nu}$  versus  $[p - p_c(R)]L^{1/\nu}$  en escala logarítmica obtenido usando redes de diferentes tamaños, distintos valores de  $R$  y tomando como valor de  $\beta$  el correspondiente a la RSA de monómeros en dos dimensiones ( $\beta = \frac{5}{36}$ ) [23]. El excelente colapso de los datos sugiere la validez de la hipótesis de escala involucrada en la ecuación (2.19). Dado que los exponentes  $\beta$  y  $\nu$  toman los valores correspondientes a la RSA de monómeros, se concluye que ambos modelos pertenecen a la misma clase de universalidad. La función de correlación es la probabilidad de que dos sitios separados una distancia  $r$  pertenezcan al mismo cluster de percolación. Usando argumentos de escala, se tiene que a  $p_c$  y para grandes  $L$  la función de correlación se comporta como (ver ecuaciones (1.51), (1.52) y (1.53) del capítulo 1)

$$G(r) \propto r^{-\beta/\nu} \quad (2.20)$$

La figura 2.5a muestra un gráfico de  $G(r)$  versus  $r$  en escala logarítmica, para redes de diferentes tamaños y pequeños valores del parámetro  $R$  ( $R = 1, 2$  y  $6$ ). Es interesante notar que cada función de correlación presenta un pico para el valor  $r_c = 2R + 1$ . Además, el ancho de los picos crece para mayores valores de  $R$ . Para  $r \gg r_c$  un ajuste por cuadrados mínimos de los datos para  $R = 1$  y  $2$ , conduce a un valor para la pendiente  $\beta/\nu \cong 0.104 \pm 0.002$ , en excelente acuerdo con el valor exacto  $\beta/\nu = \frac{5}{48}$ . Nuevamente, las barras de error sólo reflejan el error estadístico. Este comportamiento puede ser entendido cualitativamente de la siguiente manera. A muy bajos cubrimientos casi todos los dímeros depositados están correlacionados a una distancia  $r_c$ . En consecuencia, esta correlación adicional introducida por el mecanismo de deposición, es la responsable de que la estructura microscópica del cluster de percolación, para  $r < r_c$ , difiera de la estructura macroscópica característica del comportamiento a grandes escalas, para  $r \gg r_c$ , donde se recobra el comportamiento estandar.

La figura 2.5b muestra un gráfico de  $G(r)$  versus  $r$  para redes de diferentes tamaños y para valores grandes de  $R$  ( $R = 25, 50$  y  $100$ ). Si se observa cuidadosamente la figura, es posible observar pequeños picos en  $r_c$  (para  $R = 25$  y  $50$ ), pero las curvas difieren claramente de aquellas de la figura 2.5a para pequeños valores de  $R$ . En efecto, se pueden distinguir ahora dos regiones bien definidas: para  $r \leq 5$  (región 1) y para  $5 < r < r_c = 2R + 1$  (región 2). Una tercera región para  $r \gg r_c$ , que no es mostrada en la figura 2.5b, presentaría el comportamiento macroscópico estandar ya discutido.

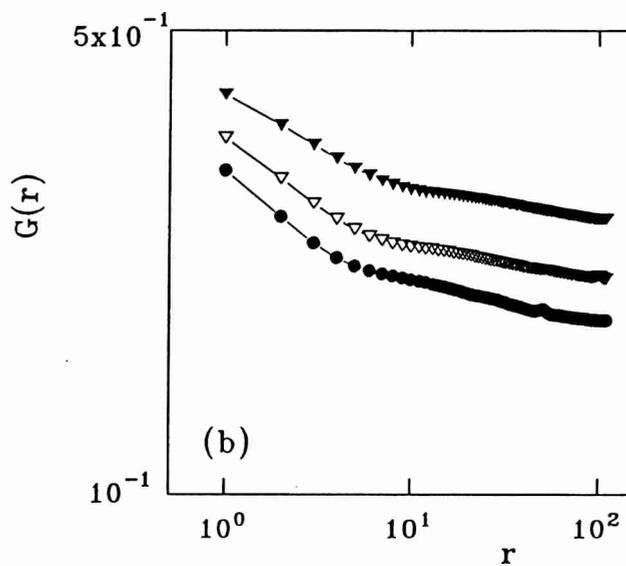
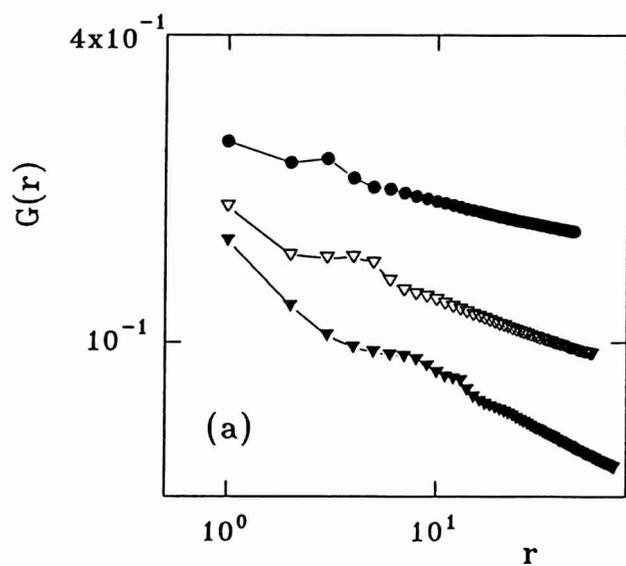


Figura 2.5. Gráfico logarítmico de  $G(r)$  versus  $r$  para redes de diferente tamaño. (a)  $\bullet$  :  $R = 1$ ;  $\nabla$  :  $R = 2$ ; y  $\blacktriangledown$  :  $R = 6$ . (b)  $\bullet$  :  $R = 25$ ;  $\nabla$  :  $R = 50$ ; y  $\blacktriangledown$  :  $R = 100$ .

Un ajuste por cuadrados mínimos de los datos conduce a  $\beta/\nu \cong 0.19 \pm 0.01$  y  $\beta/\nu \cong 0.05 \pm 0.01$  para los valores de los exponentes en las regiones 1 y 2 respectivamente. Considerando las características del comportamiento de  $G(r)$  para valores grandes de  $R$  es posible analizar cualitativamente la estructura de los clusters de percolación. El mecanismo de adsorción de dímeros calientes introduce naturalmente una nueva distancia característica dada por  $r_c$ . Para  $r \gg r_c$ , la estructura del cluster es insensible a los detalles microscópicos, ya que la única longitud relevante es la longitud de correlación la cual diverge en el punto crítico como  $\xi \propto (p - p_c)^{-\nu}$ , y en consecuencia se observa el comportamiento estandar con  $\beta/\nu = \frac{5}{48}$ . Para  $r < r_c$ , el mecanismo de adsorción es responsable de introducir correlaciones adicionales y entonces pueden ser identificadas dos regiones diferentes. Dado que el exponente característico de la región 1 es mayor que el de la región 2 se concluye que el cluster es más compacto en la región 2. Luego, el vuelo balístico que efectúan los monómeros después de la disociación, tiende a acumular partículas dentro de longitudes de escala intermedias (región 2,  $5 < r < r_c$ ) resultando en un aumento de la densidad local. Sin embargo para escalas de longitud menores, del orden de la constante de red (región 1,  $r < 5$ ), los monómeros están más aislados ya que el mecanismo de deposición tiende a separar las partículas para distancias cortas, y consecuentemente, la densidad local es menor. La región 1 resulta apreciable solamente para  $R \geq 10$  y por encima de este límite es independiente del valor de  $R$ .

En conclusión, el comportamiento crítico del modelo de adsorción de dímeros calientes presenta probabilidades críticas que dependen del parámetro  $R$  del modelo. El vuelo balístico de los monómeros después de la disociación introduce una longitud característica adicional al modelo  $r_c = 2R + 1$  la cual enriquece la estructura microscópica de los clusters. Los exponentes hallados lo sitúan dentro de la misma clase de universalidad que el modelo de adsorción secuencial aleatoria de monómeros.

• **II. Análisis de los efectos de borde en la adsorción secuencial de dímeros calientes.**

Con el propósito de completar el estudio de la adsorción secuencial aleatoria de dímeros calientes, se estudian los efectos causados por la presencia de los bordes del sistema. Los efectos de borde son importantes en procesos de adsorción-reacción, ya que es bien sabido que son cubiertos preferentemente los bordes de los escalones luego de la adsorción [36, 85-87]. Esta población selectiva ocurre como consecuencia de que los bordes de los escalones son sitios de adsorción de baja energía, donde los átomos que difunden pueden ser atrapados [36, 85-87]. Sin embargo, a muy bajas temperaturas, cuando la difusión térmica es despreciable, la adsorción preferencial sobre los bordes de los escalones puede ser solamente explicada mediante un mecanismo caliente de adsorción [75] (ver gráfico 2A). Cabe mencionar también que el estudio de los efectos de borde en el problema estandar de la adsorción secuencial aleatoria ha sido analizado por distintos autores [62, 88].

El estudio se lleva a cabo mediante el uso de simulaciones Monte Carlo sobre redes cuadradas de lados  $L \times M$  ( $L \ll M$ ). La terraza de una superficie escalonada puede ser modelada tomando condiciones de contorno abierta (periódicas) en la dirección  $L$  ( $M$ ). Se utiliza una red de tamaño  $L = 100 \times M = 700$ . El mecanismo de deposición es el mismo que fué explicado en la sección previa con la diferencia que si un monómero choca contra el borde de un escalón es depositado en el sitio de impacto.

Con el propósito de analizar la distancia a la que el efecto del borde se propaga dentro del masivo, se analizan los perfiles del cubrimiento de saturación  $\Theta_j(i, R)$  y los perfiles de la probabilidad de percolación  $F(i, R)$ , donde  $i$  mide la distancia al borde.  $F(i, R)$  se define acorde a

$$F(i, R) = (p_c M)^{-1} \sum_{j=1}^M c(i, j), \quad i = 1 \dots, L. \quad (2.21)$$

donde  $p_c$  es el umbral de percolación el cual depende de  $R$  (ver tabla 2.1), y

$c(i, j) = 1$  ( $c(i, j) = 0$ ) si el sitio  $i, j$  pertenece a un cluster de percolación (caso contrario).

Tabla 2.1. Cubrimiento de saturación  $\theta_j$  y umbrales de percolación para diferentes valores de  $R$ .

$R$	0	1	6	10	25	50	100
$\Theta_j$	0.907	0.870	0.909	0.916	0.926	0.931	0.935
$p_c$	0.562	0.600	0.575	0.571	0.574	0.584	0.596

Los perfiles del cubrimiento de saturación son mostrados en la figura (3.6). Para  $R = 0$ , o sea dímeros estandard, los resultados están en excelente acuerdo con los valores aceptados [62]. Se observa un comportamiento levemente oscilante que decae rápidamente y desaparece a unas tres unidades de red del borde de la muestra.

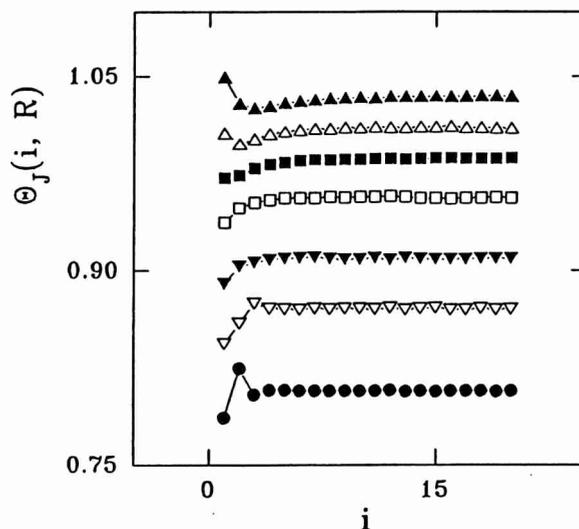
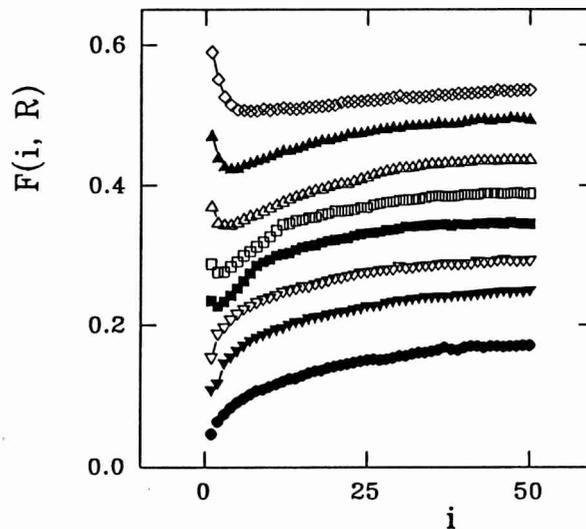


Figura 2.6. Gráfico de los perfiles de cubrimiento de saturación  $\Theta_j(i, R)$  versus  $i$  obtenido para diferentes valores de  $R$ : ●,  $R = 0$  ( $-0.1$ ); ∇,  $R = 1$  ( $0.0$ ); y ▼,  $R = 6$  ( $0.0$ ); □,  $R = 10$  ( $0.04$ ); ■,  $R = 25$  ( $0.06$ ); Δ,  $R = 50$  ( $0.08$ ); ▲,  $R = 100$  ( $0.1$ ). A fin de ser claro, el eje vertical ha sido corrido en las cantidades que se indican entre paréntesis.

Para  $R = 1$  el comportamiento oscilante resulta efectivamente atenuado y el efecto del borde se propaga alrededor de 3-4 unidades de red. Se puede observar claramente que el pico de la oscilación para  $R = 0$  y  $R = 1$  se halla a una distancia  $2R + 1$  del borde de la muestra. Para  $R = 6$  es posible aún observar una leve oscilación, pero dicho efecto se presenta muy atenuado. Debido a que  $2R + 1$  es una longitud que caracteriza la estructura microscópica del cluster de percolación, estas oscilaciones resultan ser el producto de no solamente el borde del sistema en sí mismo, sino también del mecanismo de adsorción de dímeros calientes. Si se incrementa  $R$  aún más ( $6 \leq R \leq 25$ ), se observa que la forma de los perfiles es cualitativamente similar pero la propagación de los efectos de borde aumenta con  $R$ , siendo del orden de 6-7 unidades de red para  $R = 25$ . Para  $R = 50$  y 100 el perfil de saturación tiene un máximo en la primera fila paralela al borde, luego decrece hasta alcanzar un valor



**Figura 2.7.** Gráfico de los perfiles de la probabilidad de percolación  $F(i, R)$  versus  $i$  obtenido para diferentes valores de  $R$ : ●, RSA de monómeros (-0.07); ▽,  $R = 0$  (0.05); ▼,  $R = 1$  (0.0); ■,  $R = 6$  (0.1); □,  $R = 10$  (0.15); △,  $R = 25$  (0.2); ▲,  $R = 50$  (0.25); y ◇,  $R = 100$  (0.3). A fin de ser claro, el eje vertical ha sido corrido en las cantidades que se indican entre paréntesis.

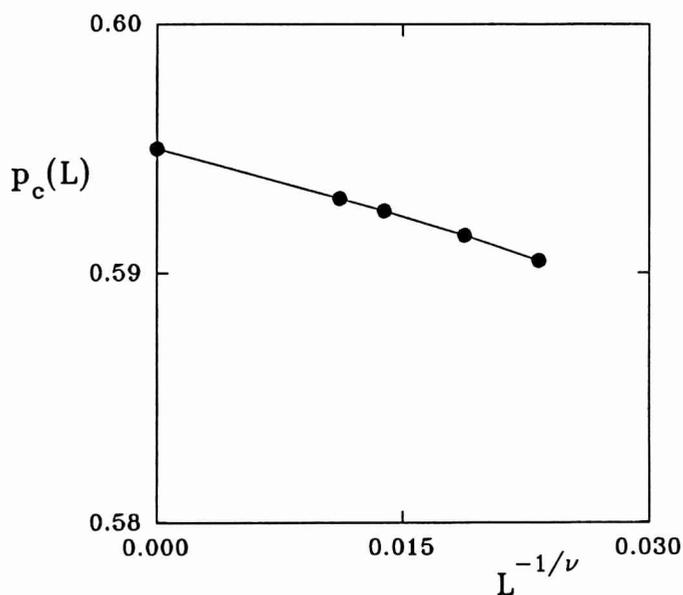
mínimo y finalmente crece hasta tomar el valor del bulk después de 10-12 unidades de red. En estos casos se tiene que  $R$  es del orden del ancho de la terraza ( $L$ ) y en consecuencia se observa la acumulación de partículas en los bordes de la muestra. En la figura 2.7 se muestran los perfiles de la probabilidad de percolación para diferentes valores de  $R$ . Se incluye en este gráfico los resultados obtenidos para la RSA de monómeros. En todos los casos se observa que la fuerte reducción en la conectividad del cluster causada por la presencia del escalón es la responsable de la propagación del efecto del borde hasta el centro de la terraza. Este resultado contrasta con el comportamiento observado en los perfiles de saturación, donde el efecto del borde es bastante local. Sin embargo, una cuidadosa inspección de la figura (3.7), permite distinguir tres comportamientos diferentes. Para  $R \leq 1$  ( $R \ll L$ ) los perfiles exhiben un mínimo en el borde. Para  $6 \leq R \leq 50$  ( $R < L$ ), los perfiles exhiben un máximo local en el borde y un máximo absoluto localizado en el centro de la terraza. Finalmente, para  $R = 100$  ( $R \geq L$ ) el máximo absoluto está localizado en el borde de la muestra y después de unas pocas unidades de red el perfil decrece suavemente hasta alcanzar el valor del masivo.

- **III. Estudio de las propiedades de transporte en el modelo de deposición de dímeros muy calientes.**

El modelo de deposición de dímeros muy calientes resulta de una pequeña modificación del modelo. El algoritmo de deposición es alterado solamente en el punto ii) ya que en este caso el vuelo de los monómeros es detenido también por los bordes del sistema. En consecuencia, las simulaciones se efectúan tomando condiciones de contorno abiertas en los extremos de la red. Los clusters de percolación son identificados utilizando técnicas standard [23]. Se seleccionaron solamente los clusters de percolación cuyo largo y ancho fueran iguales a  $L$ . La probabilidad crítica del modelo es hallada a partir de la probabilidad de percolación  $p_c(L)$  que se comporta

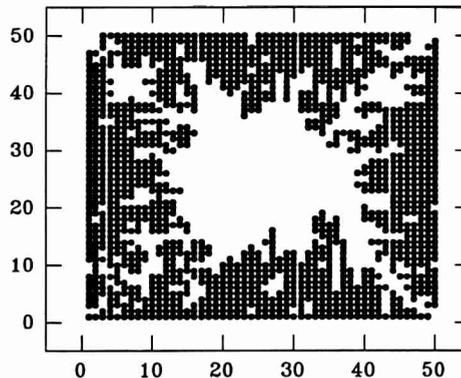
$$p_c(L) = p_c + KL^{-1/\nu} \quad (2.22)$$

La figura 2.9 muestra un gráfico de  $p_c(L)$  versus  $L^{-1/\nu}$  tomando  $\nu = \frac{4}{3}$ . El valor del umbral de percolación ( $p_c = 0.595 \pm 0.005$ ) obtenido por extrapolación lineal de los datos en la figura 2.9 es cercano al valor  $p_c \cong 0.59275$  del modelo RSA de monómeros. Sin embargo no se han hallado hasta el momento argumentos válidos que permitan afirmar que ambos deban coincidir.



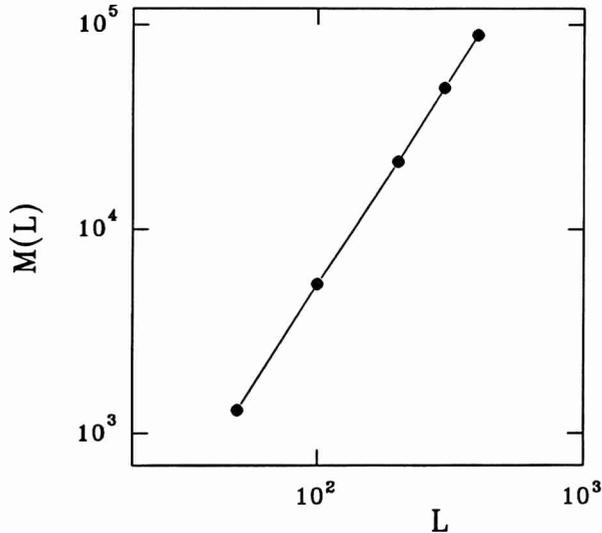
**Figura 2.9** Gráfico de la probabilidad de percolación  $p_c(L)$  versus  $L^{-1/\nu}$ , tomando como valor de  $\nu$  el correspondiente a RSA de monómeros ( $\nu = \frac{4}{3}$ ). Es agregado al gráfico el valor obtenido por extrapolación [ $p_c(L = \infty) \cong 0.595$ ].

Además, como se observa en la figura 2.9, la estructura del cluster de percolación generado por deposición de dímeros muy calientes, es completamente diferente a la estructura de un cluster estandar de percolación, como por ejemplo el mostrado en la figura 1.2.



**Figura 2.10** Cluster de percolación a  $p_c = 0.595$ . Los círculos representan sitios que pertenecen al cluster mientras que los que no pertenecen son dejados en blanco.

Las partículas del cluster están distribuidas preferentemente alrededor del perímetro de la muestra mientras que un gran hueco de sitios desocupados se localiza en el centro de la red. Se observa además, la presencia de profundos "canales" ubicados preferentemente en las direcciones diagonales de la muestra. Se han observado recientemente estructuras resultantes similares, en estudios de las propiedades magnéticas de la sub-monocapa, en películas delgadas de Fe(110) sobre W(110) [88]. La morfología de estas estructuras es de suma importancia ya que determina las propiedades magnéticas de la película. Dada la singular estructura del cluster de percolación, es interesante realizar un cálculo de la dimensión fractal de este objeto. La figura 2.11 muestra un gráfico de la masa  $M$  del cluster versus el tamaño de la red  $L$  en escala logarítmica. La dimensión fractal del objeto obtenida de la pendiente de la recta es  $d_f = 2.02 \pm 0.02$ , indicando que el cluster formado por deposición de dímeros muy calientes es homogéneo.



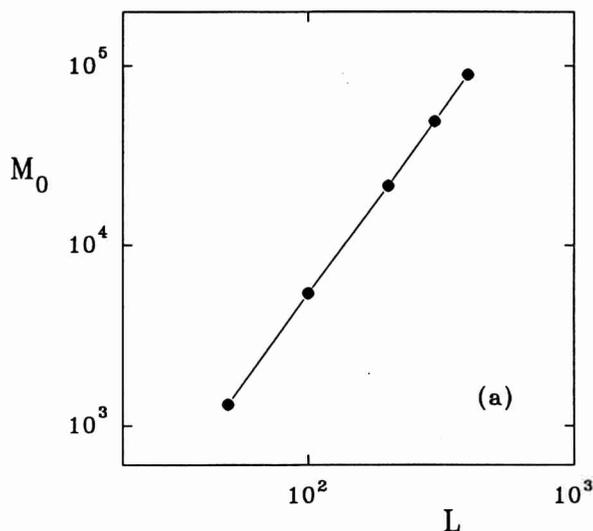
**Figura 2.11.** Gráfico de la masa del cluster formado a  $p_c$  versus el tamaño de la red  $L$ . La recta trazada tiene pendiente 2.

Ya que el cluster de percolación es formado durante un proceso de crecimiento a partir de la deposición de dímeros muy calientes, es interesante analizar las propiedades de los sitios de crecimiento. Para tal fin, construimos un cluster de percolación a  $p_c$  y luego depositamos una gran cantidad de dímeros muy calientes, con el propósito de examinar las frecuencias de crecimiento de los sitios del perímetro del cluster. Es interesante notar que un análisis similar para el modelo estandar de percolación no tendría sentido, ya que todos los sitios del perímetro tienen igual probabilidad de crecer. Los dímeros muy calientes utilizados para tal examen no son agregados al cluster de percolación. Cabe acotar que, en contraste con el modelo estandar de percolación, los sitios de crecimiento del cluster de dímeros muy calientes no coinciden con el perímetro externo del cluster de percolación, debido a la presencia de canales unidimensionales donde el crecimiento puede tener lugar sólo en los extremos. En consecuencia, el conjunto de sitios de crecimiento es discontinuo. Para efectuar un análisis cuantitativo de los sitios de crecimiento, es conveniente evaluar la distribución de sitios de crecimiento  $P(f)$ , es decir, el número de

sitios de crecimiento con frecuencia  $f$ . Además se evalúan los momentos de la distribución

$$M_q = \sum f^q P(f) \quad q = 0, \pm 1, \dots \quad (2.23)$$

Notar que  $M_0$  es exactamente el número total de sitios de crecimiento y consecuentemente a la concentración crítica, se espera un comportamiento en función del tamaño del sistema  $L$  de acuerdo a la expresión  $M_0 \sim L^{d_h}$ , donde  $d_h$  es la dimensión del perímetro (*hull dimension*). La figura 2.12a muestra un gráfico de  $M_0$  versus  $L$  en escala logarítmica. El valor de la pendiente de la recta obtenida es  $d_h = 1.75 \pm 0.01$ , en excelente acuerdo con el valor  $d_h = \frac{7}{4}$  de la dimensión del perímetro de un cluster de percolación estandar a la probabilidad crítica [23]. El comportamiento de los momentos  $M_q$  con el tamaño del sistema  $L$  sigue conforme a la ley  $M_q \sim L^{x_q}$ . La figura 2.12b muestra un gráfico de  $M_q$  versus  $L$  ( $1 < q < 5$ ) en escala logarítmica. El análisis de los momentos conduce a la conclusión que la distribución  $P(f)$  puede ser descripta por un sólo exponente. En consecuencia, la distribución  $P(f)$  no exhibe multifractalidad.



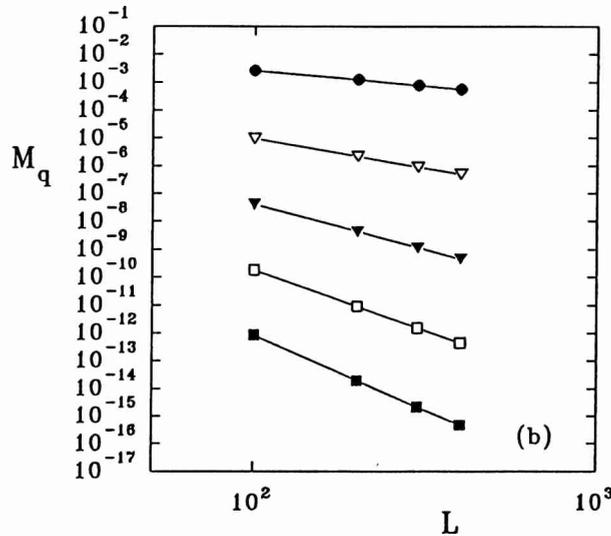


Figura 2.12. a) Gráfico de  $M_0$  versus  $L$  en escala logarímic. b) Gráfico de  $M_q$  versus  $L$  en escala logarímic.  $\bullet$ ,  $q = 1$ ;  $\nabla$ ,  $q = 2$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $q = 3$ ;  $\square$ ,  $q = 4$ ;  $\blacksquare$ ,  $q = 5$ ). Los promedios fueron realizados sobre  $10^3$  configuraciones diferentes.

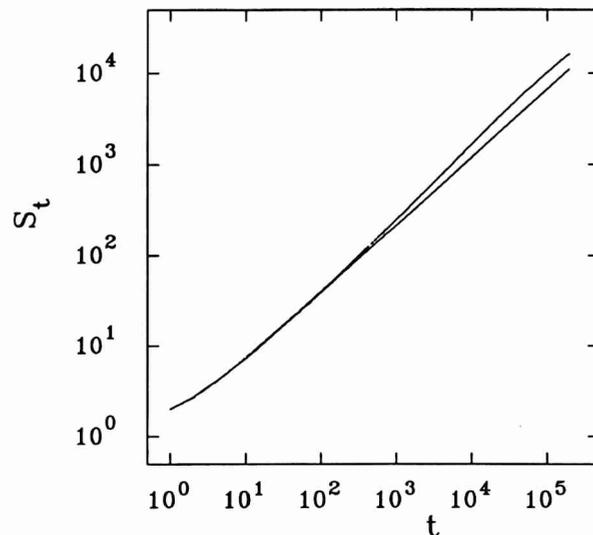
Los exponentes evaluados para  $100 < L < 400$  son:  $x_1 = -1.11 \pm 1 \times 10^{-2}$ ,  $x_2 = -2.17 \pm 2 \times 10^{-2}$ ,  $x_3 = -3.25 \pm 2 \times 10^{-2}$ ,  $x_4 = -4.33 \pm 2 \times 10^{-2}$  y  $x_5 = -5.43 \pm 3 \times 10^{-2}$ . Considerando los errores estadísticos se observa que sólo el exponente  $x_1$  caracterizara completamente la distribución  $P(f)$ , y los momentos de orden superior se pueden expresar en función del valor  $x_1$  mediante

$$x_n = nx_1 \quad (2.24)$$

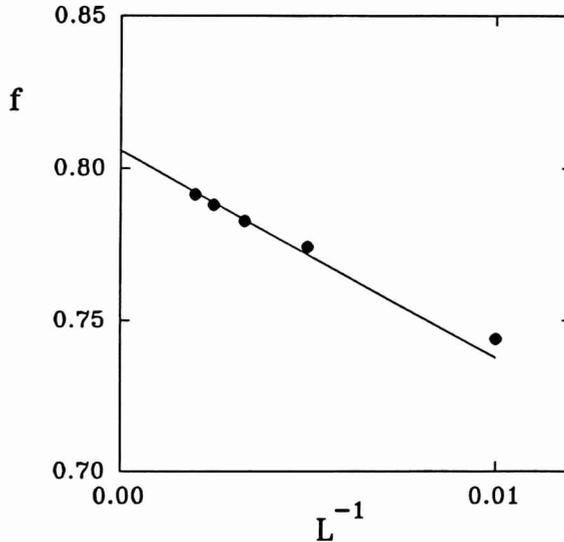
donde  $n$  es el orden del momento considerado.

Cabe mencionar que la distribución de sitios de crecimiento para un cluster generado con la dinámica DLA, exhibe un comportamiento de escala multifractal, es decir que los exponentes que caracterizan los momentos de la distribución son todos independientes.

En vista de estos resultados, es interesante determinar si las propiedades de transporte sobre estos clusters son anómalas o estandard. El estudio se basa en el método Monte Carlo aplicado a los caminantes aleatorios sobre redes cuadradas bidimensionales finitas de tamaño  $L$ . Con el propósito de obtener los exponentes  $d_w$  y  $f$ , se utilizan las técnicas de un caminante y de la reacción de caminantes limitada por difusión las cuales han sido ya explicadas en la sección anterior. Se presentan a continuación los resultados obtenidos mediante la técnica de un caminante. Debido a la estructura del cluster de percolación (ver figura 2.10) el caminante es depositado a  $t = 0$  sobre un sitio localizado sobre la fila  $i_o = L/2$  y en una columna escogido aleatoriamente  $j_o$  con  $1 < j_o < L/2$ . Se analiza el número de sitios diferentes  $S_t$  visitados por el caminante, el desplazamiento cuadrático medio  $\langle r_t^2 \rangle$ , el desplazamiento horizontal medio  $\langle |x_t| \rangle = \langle |j - j_o| \rangle$  y el desplazamiento vertical medio  $\langle |y_t| \rangle = \langle |i - i_o| \rangle$ , donde  $j$  ( $i$ ) corresponde a la  $j$ -ésima columna (fila) respectivamente, en función del número de pasos  $t$  del caminante.



**Figura 2.13.** Gráfico de  $S_t$  versus  $t$  en escala logarítmica para redes de diferentes tamaños. La curva superior (curva inferior) corresponde a  $L = 600$  ( $L = 100$ ).



**Figura 2.14.** Gráfico del exponente  $f$  versus  $L^{-1}$  correspondiente a los resultados de las simulaciones con el método de un caminante. El valor de  $f$  en el límite termodinámico es obtenido por extrapolación. La recta corresponde al ajuste por cuadrados mínimos de los datos.

La figura 2.13 muestra un gráfico de  $\log(S_t)$  versus  $\log t$  para dos redes de diferente tamaño ( $L = 100$  y  $L = 600$ ). Debido a que las pendientes asintóticas son diferentes para cada tamaño de red, hay presente un efecto de tamaño finito. Es claro de la ecuación (2.8), que el valor de la pendiente asintótica es el exponente  $f$ . Luego, con el propósito de analizar tal efecto de tamaño finito, la figura 2.14 muestra un gráfico del exponente  $f$  versus  $L^{-1}$  para redes de diferentes tamaños ( $100 \leq L \leq 600$ ). El valor estimado de  $f$  en el límite termodinámico ( $L \rightarrow \infty$ ) es  $f = 0.81 \pm 0.01$  el cual es considerablemente mayor que el valor aceptado ( $f = 0.65 \pm 0.01$ ) para percolación estandar [81]. Este resultado conduce a la conclusión que la difusión es anómala sobre el cluster de percolación formado por deposición de dímeros muy calientes, a pesar del hecho que su dimensión fractal es dos. A causa de la estructura del cluster (ver figura 2.10), el caminante pasa la mayor parte del tiempo en un sector del

cluster limitado aproximadamente por las diagonales  $i = j$  y  $i = L - j$ . Esto es una consecuencia de dos tipos de efectos de borde: el originado por el borde de la muestra, en este caso el borde izquierdo de la red con condiciones de contorno abiertas, y los angostos cuellos de botella originados por las ramificaciones del hueco central (ver figura 2.10). En muchos casos el caminante resulta atrapado en este sector, y le toma un tiempo muy largo abandonarlo. En consecuencia, este sector del cluster es explorado intensivamente. La figura 2.15 muestra un gráfico de  $\langle |y_t| \rangle$  versus  $\langle |x_t| \rangle$  para redes de diferentes tamaños. Se observa que, para pequeños valores de  $x$ , la velocidad de crecimiento de ambas coordenadas es la misma, ya que la pendiente calculada en esta región es igual a uno. Este comportamiento es mantenido hasta que el caminante alcanza al borde de este sector.

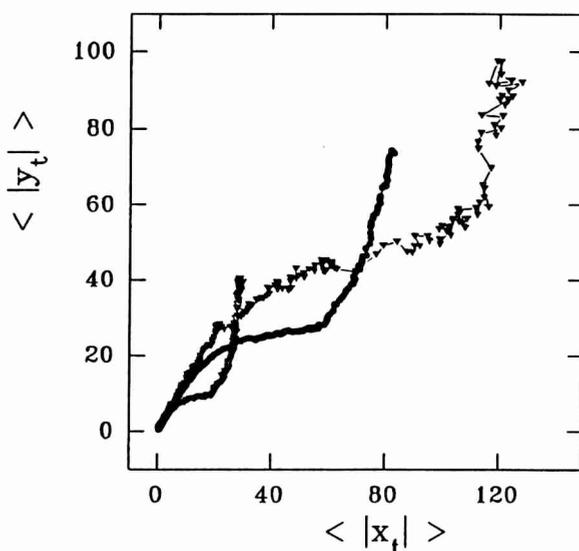
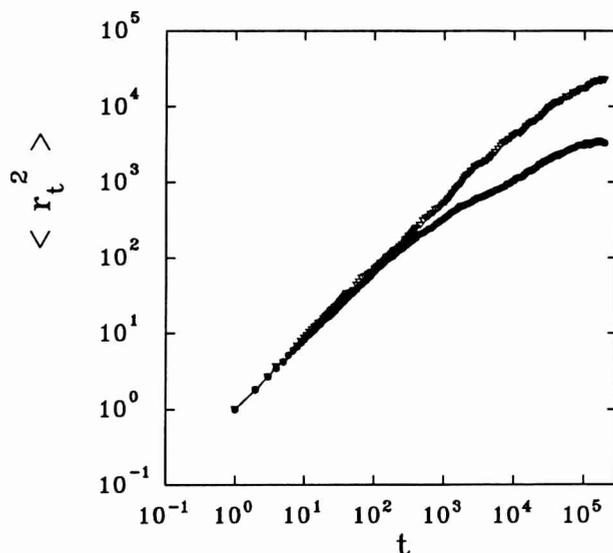


Figura 2.15. Gráfico de  $\langle |y_t| \rangle$  versus  $\langle |x_t| \rangle$  para redes de diferentes tamaños  $L$ :  $\nabla$   $L = 100$ ;  $\bullet$   $L = 300$ ;  $\blacktriangledown$   $L = 500$ .

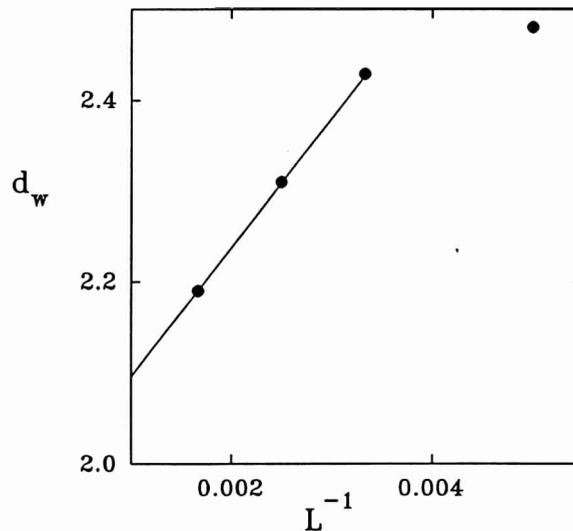
En la mayoría de los casos, el caminante no puede ir más allá y comienza entonces a visitar este sector nuevamente. La porción horizontal de las curvas es la huella de este comportamiento y su comienzo da una estimación pobre del tamaño de este sector. Uno podría también obtener una estimación del tiempo que el caminante visita este sector, pero las grandes fluctuaciones imposibilitan esta medida.



**Figura 2.16.** Gráfico en escala logarítmica de  $\langle r_t^2 \rangle$  versus  $t$  para redes de diferentes tamaños  $L$ : •  $L = 100$ ; ∇  $L = 600$ .

Un efecto de tamaño finito análogo al discutido, se presenta en el análisis del desplazamiento cuadrático medio  $\langle r_t^2 \rangle$ . La figura 2.16 muestra un gráfico de  $\log(\langle r_t^2 \rangle)$  versus  $\log t$  para dos redes de diferentes tamaños ( $L = 100$  y  $L = 600$ ). Se observa que el comportamiento asintótico de  $\langle r_t^2 \rangle$  se modifica como consecuencia de los efectos de borde, y así en el cálculo de exponente  $d_w$  sólo intervalos de tiempo intermedios fueron considerados. Estos intervalos de tiempo dependen del tamaño de la red de manera tal que cuanto más grande es la red, más largo es el intervalo de tiempo. Luego, con el propósito de estudiar este efecto de tamaño finito, la figura 2.17 muestra un gráfico de  $d_w$  versus

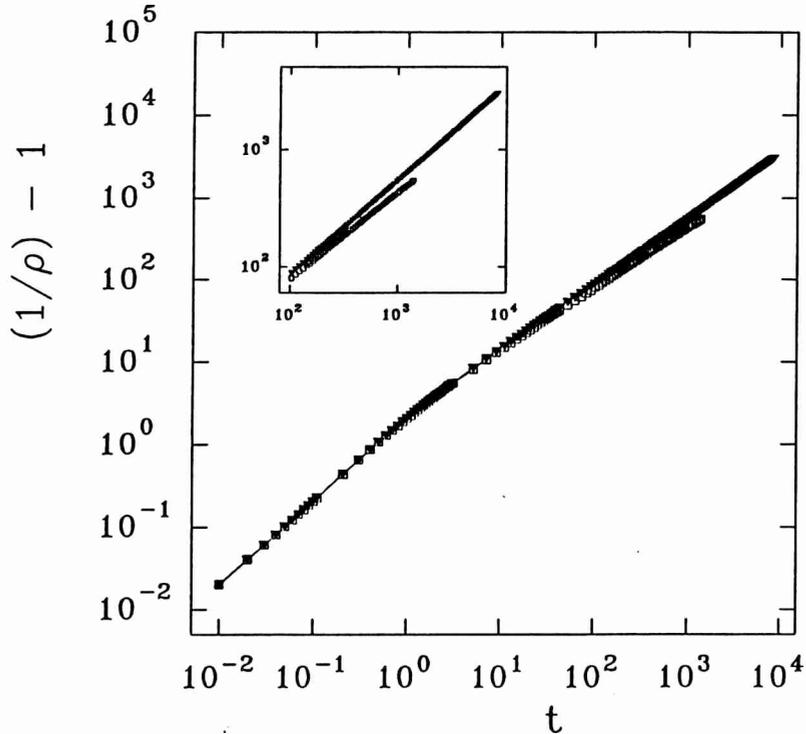
$L^{-1}$  para redes de diferentes tamaños.



**Figura 2.17.** Gráfico del exponente  $d_w$  versus  $L^{-1}$ . El valor de  $d_w$  en el límite termodinámico ( $L \rightarrow \infty$ ) es obtenido por extrapolación. Sólo los primeros tres puntos son considerados en el cálculo. La recta corresponde al ajuste por cuadrados mínimos de los datos.

El valor estimado por extrapolación de  $d_w$  en el límite termodinámico ( $L \rightarrow \infty$ ) es  $d_w = 2.10 \pm 0.1$ . El error estadístico no permite distinguir este valor del correspondiente a un espacio Euclídeo  $d$ -dimensional ( $d_w = 2$ ). Este hecho no contradice los resultados previos con respecto a la dimensión espectral, ya que se conoce que objetos fractales con dimensión fractal  $d_f = 2$  pueden exhibir una dimensión espectral distinta de 2 [90].

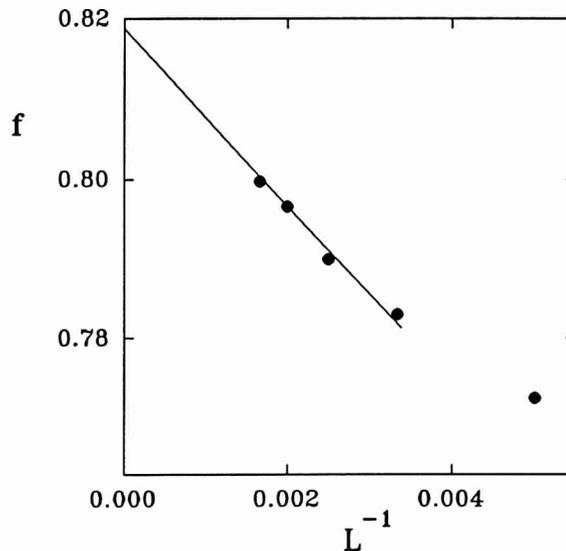
Se presentan ahora los resultados obtenidos utilizando la técnica de la reacción de caminantes limitada por difusión.



**Figura 2.18.** Gráfico en escala logarítmica de  $((1/\rho) - 1)$  (la densidad inicial de caminantes es 1) versus  $t$  para redes de diferentes tamaños  $L$ :  $\blacktriangledown$   $L = 100$ ;  $\square$   $L = 600$ . La figura insertada muestra las últimas tres décadas a fin de observar las distintas pendientes.

La figura 2.18 muestra un gráfico de  $\log((1/\rho) - 1)$  versus  $\log t$  para redes de distintos tamaños ( $L = 100$ ,  $L = 600$ ). Se observa que el comportamiento a tiempos cortos es el mismo sobre ambas redes. Durante las primeras tres décadas, la simulación es gobernada por las reacciones. En consecuencia los caminantes no alcanzan a "sentir" la estructura del cluster de percolación ya que son removidos rápidamente del sistema y la pendiente resultante, medida sobre las primeras tres décadas, es igual a 1. Se aprecia claramente un crossover, indicando que el comportamiento comienza a estar dominado

por difusión. El gráfico interno de la figura 2.18 muestra una ampliación de la últimas tres décadas (región asintótica) . Se puede observar que las pendientes asintóticas correspondientes a ambas redes son diferentes. Esto es nuevamente una consecuencia de un efecto de tamaño finito.



**Figura 2.19.** Gráfico del exponente  $f$  versus  $L^{-1}$  correspondiente a los resultados de las simulaciones por el método de la reacción de caminantes. El valor de  $f$  en el límite termodinámico ( $L \rightarrow \infty$ ) es obtenido por extrapolación. Sólo los primeros cuatro puntos son considerados en el cálculo. La recta corresponde al ajuste por cuadrados mínimos de los datos.

Los valores de  $f$  obtenidos por este método son idénticos a los obtenidos por el método de un caminante dentro del error estadístico. Con el propósito de mostrar este punto, se realiza un gráfico de  $f$  versus  $L^{-1}$  para redes de distintos tamaños. El valor de  $f$  en el límite termodinámico ( $L \rightarrow \infty$ ) es obtenido por extrapolación considerando solamente los primeros cuatro puntos en la figura 2.19. Mediante este procedimiento se obtiene  $f = 0.82 \pm 0.02$  en excelente acuerdo con el resultado obtenido por el método de un caminante.

Es conveniente en este instante aclarar un punto. Es sabido que en dos di-

mensionales la ecuación (2.8) está afectada por una corrección logarítmica de la forma  $1/\ln t$  [91]. Esta corrección se propaga a la ecuación (2.14). Para asegurarse que los distintos valores de  $f$  obtenidos para las diferentes redes no son simplemente el resultado de esta corrección, se efectuaron gráficos de los datos teniéndola en cuenta. Se corrobora que para redes bidimensionales la corrección es válida, mientras que para los cluster de percolación los valores asintóticos de  $f$  para las distintas redes son todos menores que  $f = 1$ . En consecuencia el exponente obtenido es característico del cluster de percolación y no es producto de dicha corrección.

## 2.4 Conclusiones

Se estudió el comportamiento crítico del modelo de adsorción de dímeros calientes. Se halla que las probabilidades críticas dependen del parámetro  $R$  del modelo (ver tabla 2.1). Como consecuencia del mecanismo de adsorción, es introducida una longitud característica adicional  $r_c = 2R + 1$ , la cual enriquece la estructura microscópica del modelo. Se analizó el parámetro de orden  $P_\infty$  y la función de correlación  $G(r)$ . Usando argumentos de escala, se logra un excelente colapso de los datos correspondientes al parámetro de orden  $P_\infty$ , obtenidos utilizando redes de diferentes tamaños, distintos valores de  $R$  y tomando como valor del exponente  $\beta$  el correspondiente a RSA de monómeros ( $\beta = 5/36$ ).

La función de correlación fue estudiada para distintos valores del parámetro  $R$  del modelo. Esta cantidad es muy sensible a la estructura microscópica del cluster de percolación ya que se observan claramente picos para  $r = r_c = 2R + 1$ . El comportamiento asintótico ( $r \gg r_c$ ) puede ser observado solamente para valores de  $R$  pequeños debido a limitaciones de cálculo. Dicho comportamiento asintótico se corresponde con el del modelo de RSA de monómeros. Luego, existe suficiente evidencia como para situar al modelo de adsorción de dímeros calientes dentro de la clase de universalidad del modelo de RSA de monómeros.

Se estudió además los efectos de borde característicos del mecanismo de de-

posición de dímeros calientes. Con tal propósito se calcularon los perfiles de saturación  $\Theta(i, R)$  y los perfiles de percolación  $F(i, R)$ . Se encuentra que el efecto de borde para los perfiles de saturación desaparece después de unas pocas unidades de red mientras que, en contraste, este efecto se propaga hasta el centro de la terraza cuando se consideran los perfiles de percolación.

Finalmente se analizaron algunos aspectos del comportamiento crítico y las propiedades de transporte en el modelo de deposición de dímeros muy calientes. Como consecuencia del proceso de deposición, la estructura resultante del cluster de percolación, es completamente distinta a la de un cluster de percolación generado con el mecanismo de RSA de monómeros. Mediante técnicas standard, se calcula la probabilidad crítica del modelo, resultando su valor  $p_c = 0.595 \pm 0.05$  muy cercano al de RSA de monómeros, aunque la dimensión fractal calculada del cluster de percolación  $d_f = 2.02 \pm 0.02$  coincide con la del sustrato.

Se analizó también la función de distribución de sitios de crecimiento a  $p_c$ . Con el propósito de caracterizar el comportamiento de esta distribución, se estudiaron sus momentos como función del tamaño  $L$  de la red. El momento cero de la distribución  $M_0$ , que es el número total de sitios de crecimiento, se comporta como  $M_0 \sim L^{d_h}$ , con  $d_h = 1.75 \pm 0.01$  en excelente acuerdo con el valor  $d_h = 7/4$  de la dimensión del perímetro del cluster infinito a  $p_c$  en percolación standard. Un análisis de los momentos de orden superior, conduce a la conclusión que la función de distribución de sitios de crecimiento no exhibe comportamiento multifractal.

Se estudiaron las propiedades de transporte a  $p_c$  en el modelo de deposición de dímeros muy calientes utilizando las técnicas del caminante aleatorio y de la reacción de caminantes controlada por difusión. Se calculó el exponente  $f$ , que está relacionado con la dimensión espectral del cluster de percolación mediante  $f = d_s/2$ , y la dimensión del caminante  $d_w$ . Ambos exponentes resultan alterados por efectos de tamaño finito consecuencia del borde mismo de la muestra y de la estructura del cluster de percolación. Los valores asintóticos ( $L \rightarrow \infty$ ) calculados son  $f = 0.81 \pm 0.01$  y  $d_w = 2.1 \pm 0.1$ . Es de interés notar que la conjetura de Alexander y Orbach  $f d_w = d_f$  [78], que ciertamente es una excelente aproximación en gran parte

de los problemas prácticos concernientes a caminantes sobre clusters de percolación, es violada para este modelo particular.

## Capítulo 3

# Transiciones de fase en sistemas dinámicos

### 3.1 Introducción

La segunda ley de la termodinámica implica que sistemas físicos aislados y microscópicamente reversibles evolucionan hacia estados de máxima entropía (máximo desorden). Sin embargo, algunos sistemas disipativos que involucran irreversibilidad microscópica, o aquellos que interactúan con sus alrededores, pueden evolucionar desde un estado desordenado hacia uno más ordenado. Los autómatas celulares, que se definirán posteriormente, son una clase de modelos matemáticos que exhiben tal comportamiento. Una gran variedad de sistemas físicos, químicos y biológicos, pueden ser modelados mediante el uso de autómatas celulares [92-119].

Los autómatas celulares son idealizaciones de sistemas físicos en los cuales el espacio y el tiempo son discretos, y cualquier cantidad física toma un conjunto finito de valores discretos. Un autómata celular consiste en una red regular con una variable discreta por sitio. El estado del autómata está completamente determinado por los valores de las variables en cada sitio y evoluciona en el tiempo a pasos discretos de forma tal que, el valor de la variable en cada sitio resulta afectada por los valores en el paso previo de las variables en su vecindad. Se considera como vecindad de un sitio al sitio mismo y a todos los sitios inmediatamente adyacentes.

Las variables en cada sitio son puestas al día simultáneamente, basados en los valores de las variables en su vecindad en el paso previo y acorde a un conjunto definido de reglas locales.

Los autómatas celulares fueron introducidos originalmente por von Neumann y Ulam como una posible idealización de sistemas biológicos (von Neumann, 1963, 1966), con el propósito particular de modelar auto-reproducción biológica.

Ciertos sistemas físicos que contienen muchos elementos discretos con interacciones locales, son a menudo modelados convenientemente utilizando autómatas celulares. Se obtienen autómatas celulares no triviales cuando la dependencia de los valores de las variables es no lineal, como así también, cuando alguna forma de inhibición al crecimiento está presente. A nivel microscópico, los sitios pueden representar puntos en una red cristalina con sus valores dados por algún observable cuantificado como por ejemplo una componente de spin.

El uso de modelos autómatas ha sido de gran importancia en el análisis del comportamiento de una amplia variedad sistemas físicos. Dentro de las aplicaciones cabe mencionar su uso como modelos discretos de sistemas químicos no-lineales que involucran un conjunto de reacciones acopladas con difusión espacial [92-94], estudio de la evolución de galaxias espiral [95, 96], análisis de ciertos aspectos cinéticos de las transiciones de fase [97], descripción del crecimiento de cristales dendríticos [93, 98], etc. Un gran número de sistemas biológicos han sido modelados mediante autómatas celulares [99-104]. El desarrollo de estructuras y patrones en el crecimiento de organismos, parece a menudo estar gobernado por reglas locales simples, y en consecuencia, un modelo autómatas celular sería aplicable para su descripción. Los autómatas celulares pueden describir también poblaciones de organismos inmóviles (tales como plantas), con los valores de los sitios de red correspondiendo a la presencia o ausencia de individuos (quizás de varios tipos) en los mismos y con interacciones locales.

Uno de los autómatas celulares más estudiados es probablemente la aproximación Q2R para el modelo de Ising [105, 106]. El modelo puede ser explicado de la siguiente manera. Cada sitio de una red cuadrada bidimensional, representa un spin el cual

tiene una energía proporcional al número de sus vecinos antiparalelos. El modelo de Ising tradicional es simulado a temperatura fija  $T$  con probabilidades térmicas proporcionales a  $\exp(-E/k_B T)$ . Por el contrario, en el conjunto microcanónico, uno simula el modelo de Ising a energía fija. Luego, un spin puede ser invertido si y sólo si tiene el mismo número de vecinos "up" que "down". Esto es exactamente lo que realiza el autómata Q2R. Aunque este algoritmo no representa una simulación exacta del modelo de Ising, la magnetización espontánea obtenida se aproxima bastante bien a la solución exacta.

Un tipo particular de autómata celular cuya evolución ha sido estudiada intensivamente es el llamado "Juego de la Vida" (JV) [107-114]. Este autómata celular es simulado sobre una red cuadrada bidimensional donde cada sitio de la red interactúa con sus primeros y próximos vecinos, de manera tal que para cada instante de tiempo existen sitios "vivos" (con valor = 1) y sitios muertos (con valor = 0). Las reglas locales son las siguientes:

i) Un sitio desocupado (con valor = 0) al tiempo  $t$  resulta ocupado a  $t + 1$  sólo si exactamente tres de sus ocho vecinos estaban ocupados al tiempo  $t$ .

ii) Un sitio ocupado (con valor = 1) al tiempo  $t$  que posee cuatro o más de sus ocho vecinos ocupados resultará desocupado a tiempo  $t + 1$ .

iii) Un sitio ocupado que tiene sólo un vecino ocupado, o ninguno, al tiempo  $t$ , resultará desocupado a tiempo  $t + 1$ .

iv) Un sitio ocupado al tiempo  $t$  permanecerá ocupado al tiempo  $t + 1$  si y sólo si posee dos o tres vecinos ocupados al tiempo  $t$ .

Utilizando el lenguaje "vida" "muerte", las reglas anteriores pueden ser resumidas en las siguientes:

Nace con 3 vecinos vivos.

Sobrevive con 2 o 3 vecinos vivos.

Existe también una versión cualitativamente muy similar del JV pero definida en una dimensión [115]. La "vida en una dimensión" está definida sobre una línea de  $L$  sitios con valores como en el JV (0 ó 1). El "destino" de cualquier sitio está

de  $L$  sitios con valores como en el JV (0 ó 1). El "destino" de cualquier sitio está determinado por el valor de sus cuatro primeros vecinos mediante las siguientes reglas:

i) Un sitio vivo con 2 ó 4 vecinos vivos, sobrevive en la siguiente generación, de otra forma muere. ii) Un sitio desocupado con 2 ó 3 vecinos vivos estará ocupado (nacimiento) en la siguiente generación, de otra manera, continúa desocupado.

Al igual que en el modelo de Conway (bidimensional) todos los sitios son puestos al día simultaneamente. De aquí en más, nos referiremos al modelo de Conway como 2JV y al modelo unidimensional de la vida como 1JV.

Aunque tanto el 2JV como el 1JV no están relacionados de forma obvia con algún sistema físico o biológico, existen varias consideraciones las cuales han llevado a analizar sus propiedades. Desde el punto de vista físico, es de interés analizar la conexión entre la dinámica fuera del equilibrio del 1JV y del 2JV con otras dinámicas fuera del equilibrio en procesos disipativos [116-121]. En particular se buscan leyes de escala dinámicas. Investigaciones teóricas y experimentales han demostrado que algunos sistemas fuera del equilibrio extendidos espacialmente evolucionan naturalmente hacia un estado crítico caracterizado por leyes de potencias espaciales y temporales [116-119, 121]. La aparición de dichos estados críticos en estos sistemas fuera del equilibrio es espontánea, es decir, que no requieren del ajuste de algún parámetro para alcanzar el estado crítico. Se ha mostrado que diversos modelos autómatas celulares exhiben leyes de potencia [116-119, 121]. La caracterización y entendimiento de estas leyes de escala se ha transformado en un problema de gran interés y sorprendente dificultad. Cabe mencionar como ejemplos los agregados limitados por difusión [116] y la auto-organización crítica [117-119, 121] los cuales son basados en modelos físicos simples, pero cuya predicción detallada de las leyes de escala ha resultado confusa.

En los últimos años, un nuevo punto de vista en la aplicación del método Monte Carlo ha conducido al concepto de "damage spreading" (propagación del daño). La idea surgió a partir de trabajos realizados con modelos autómatas celulares y ultimamente también de la teoría de sistemas dinámicos.

cio de las fases, es decir, partiendo de una determinada configuración inicial, uno sigue una trayectoria en el espacio de las fases bajo la aplicación del procedimiento Monte Carlo. Esta trayectoria dependerá por supuesto del tipo de procedimiento Monte Carlo utilizado (baño caliente, dinámica de Glauber, Metrópolis, Kawasaki, etc.) pero también de la secuencia de números aleatorios. Las trayectorias siempre tenderán al equilibrio lo cual significa que las configuraciones serán visitadas por la trayectoria con una probabilidad proporcional a los factores de Boltzmann. Una vez que se alcanza el equilibrio, las trayectorias permanecerán allí como lo asegura la condición de balance detallado.

Una cuestión interesante la cual es el tema central de la teoría de sistemas dinámicos es en qué medida dependerá una trayectoria de la condición inicial. Más precisamente, si se efectúa una pequeña perturbación al estado inicial de un sistema dinámico, será la nueva trayectoria muy cercana o completamente diferente de la trayectoria original. El caso en el cual dos trayectorias inicialmente muy cercanas resultan muy diferentes a gran velocidad, se denomina caos. La definición detallada de caos puede incluir también en algunos casos la velocidad con la cual las trayectorias se separan, pero dentro de este contexto, no se hace tal distinción.

## 3.2 Introducción Teórica

El estudio de sistemas dinámicos irreversibles es relevante para el entendimiento de una amplia variedad de fenómenos físicos, químicos, biofísicos, ecológicos, etc. Algunos de estos sistemas exhiben transiciones de fase irreversibles, donde las propiedades macroscópicas del estado estacionario se comportan de manera singular cuando un parámetro externo es debidamente ajustado. Una técnica adecuada para el estudio de tales sistemas es la denominada *análisis epidémico*. La técnica será formulada tomando como punto de partida un modelo simple, el cual retiene sólo aquellas características esenciales del comportamiento crítico en una transición de fase de segundo orden [122]. Una característica esencial es que existen reacciones que impiden que la densidad de partículas  $\rho_{act}$  sea muy grande. Esto se simula demandando

den que la densidad de partículas  $\rho_{act}$  sea muy grande. Esto se simula demandando que en cada punto de red existe a lo sumo una partícula. Cuando cualesquiera dos partículas se encuentran en un mismo punto como consecuencia de otras reacciones, se las reemplaza por una. Esas otras reacciones son (1) cada partícula puede desaparecer con probabilidad  $p_s$  (absorción); (2) cada partícula puede producir una partícula en cualquiera de sus sitios vecinos con probabilidad  $p_r$  (reproducción).

Cuando la probabilidad de absorción  $p_s$  está por encima de un cierto valor crítico  $p_s^c$  (el cual depende por supuesto de  $p_r$ ), el estado donde todas las partículas han sido absorbidas es el único estado estacionario. Cuando  $p_s < p_s^c$ , existe otro estado estacionario llamado "estado activo" con densidad distinta de cero. Se denominará el caso  $p_s > p_s^c$  como "subcrítico" y el caso  $p_s < p_s^c$  como "supercrítico". Se considerarán ahora algunas distribuciones asintóticas cuando se comienza a tiempo  $t = 0$  con una partícula en el origen  $\vec{R} = 0$  y en la vecindad del punto crítico. Acordemente con las hipótesis de escala se espera para la densidad de partículas

$$\rho[\vec{R}, H(\Delta_1, \Delta_2), t] \approx t^{\eta-Dz/2} F[R^2/t^z, H(\Delta_1, \Delta_2)t^{1/\nu_t}] \quad (3.1)$$

donde  $\eta$ ,  $z$  y  $\nu_t$  son exponentes críticos,  $D$  es la dimensión del espacio,  $\Delta_1 = |p_s - p_s^c|$ ,  $\Delta_2 = |p_r - p_r^c|$ ,  $H(\Delta_1, \Delta_2)$  es la distancia entre el punto de coordenadas  $(p_s, p_r)$  y el punto crítico  $(p_s^c, p_r^c)$ , la cual podría diferir de la distancia euclídea  $(\Delta_1^2 + \Delta_2^2)^{1/2}$ , y  $F$  es una función de escala adecuada. De la ecuación (3.1) se identifica a la cantidad  $\xi_t = [H(\Delta_1, \Delta_2)]^{-\nu_t}$  como la longitud de correlación en la dirección temporal cerca de  $p_s^c$  y  $p_r^c$  y, en consecuencia, al exponente  $\nu_t$  como el asociado a esta longitud de correlación. Luego, el comportamiento de la función  $H$  debe ser tal que  $\lim_{\Delta_1, \Delta_2 \rightarrow 0} H(\Delta_1, \Delta_2) = 0$

La probabilidad que la distribución no haya colapsado al estado absortivo pasado un tiempo  $t$  se escribe

$$P[t, H(\Delta_1, \Delta_2)] \approx t^{-\delta} \phi[H(\Delta_1, \Delta_2)t^{1/\nu_t}] \quad (3.2)$$

donde  $\delta$  es otro exponente crítico y  $\phi$  es otra función de escala.

A partir de la ecuación (3.1) se obtiene para el número medio de partículas y para la posición cuadrática media

$$N(t) = \int d^D R \rho[\vec{R}, H(\Delta_1, \Delta_2), t] \approx t^\eta f[H(\Delta_1, \Delta_2) t^{1/\nu_t}] \quad (3.3)$$

y

$$\begin{aligned} \langle R^2(t) \rangle &= \left\{ \frac{1}{N(t)} \int d^D R R^2 \rho[\vec{R}, H(\Delta_1, \Delta_2), t] \right\}^{1/2} \\ &\approx t^{z/2} g[H(\Delta_1, \Delta_2) t^{1/\nu_t}] \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde  $f$  y  $g$  son funciones de escala adecuadas. En el estado absortivo las correlaciones son de corto rango y en consecuencia se espera para  $N(t)$  y  $P(t)$  un decaimiento exponencial. Esto sólo puede suceder si  $f(x, y, t) \propto \{H(x, y)t\}^{-\eta\nu_t} \exp\{H(x, y)t\}^{\nu_t}$  para  $x > 0$ ,  $y > 0$  y  $t \rightarrow \infty$ . Luego, a partir de la ecuación (3.3), se tiene

$$N(t) \propto \{H(\Delta_1, \Delta_2)\}^{-\eta\nu_t} \exp\{-[H(\Delta_1, \Delta_2)]^{\nu_t} t\} \quad t \rightarrow \infty \quad (3.5)$$

En un punto crítico se espera que gráficos log-log de  $N(t)$ ,  $P(t)$  y  $R^2(t)$  versus  $t$  presenten rectas, mientras que desviaciones hacia arriba y hacia abajo ocurran en la vecindad del mismo. Este comportamiento permitiría la determinación precisa de los puntos críticos y de los exponentes críticos  $\eta$ ,  $\delta$  y  $z$ . También, mediante la ecuación (3.5), debería ser posible el cálculo de  $\nu_t$ .

Cabe mencionar que para sistemas finitos, el estado estacionario activo es meta-estable ya que, debido a las fluctuaciones del sistema estacástico, existe siempre una probabilidad finita de transicionar irreversiblemente hacia el estado absortivo. Esta probabilidad se incrementa al aproximarse al punto crítico, y consecuentemente, resulta muy difícil obtener exponentes críticos confiables mediante simulaciones numéricas. Además, en los casos en que la transición entre el régimen estacionario y el absortivo es continua ( $2^{\text{do}}$  orden), un tratamiento de campo medio no es adecuado. Estas limitaciones pueden ser evitadas evaluando los exponentes críticos relacionados con el comportamiento dinámico del sistema mediante el análisis epidémico ya expuesto.

Como en cualquier transición de fase de segundo orden, se supone que la transición dinámica entre el estado activo y el absortivo posee correlaciones espaciales caracterizadas por una longitud de escala típica  $\xi_s$ , la cual diverge en el punto crítico de acuerdo con

$$\xi_s \propto [\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)]^{-\nu_s} \quad \Delta_1, \Delta_2 \rightarrow 0 \quad (3.6)$$

donde  $\nu_s$  es el exponente relacionado con la longitud de correlación en la dirección espacial y  $\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)$  es una función tal que  $\lim_{\Delta_1, \Delta_2 \rightarrow 0} \Gamma(\Delta_1, \Delta_2) = 0$ .

La hipótesis de escala establece que las cantidades de interés dependen del tamaño del sistema a través de la variable  $\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)L^{1/\nu_s}$ . Por ejemplo, el parámetro de orden natural del modelo es la densidad media de partículas  $\rho_{act}$  la cual, en la vecindad del punto crítico, depende del tamaño del sistema y de la distancia al punto crítico como

$$\rho_{act}(p_s, p_r, L) = L^{-\beta/\nu_s} h[\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)L^{1/\nu_s}] \quad (3.7)$$

donde  $h$  es una adecuada función de escala y  $\beta$  es el exponente crítico asociado con el parámetro de orden. En el punto crítico se tiene

$$\rho_{act}(p_s^c, p_r^c, L) \propto L^{-\beta/\nu_s} \quad (3.8)$$

y

$$h(x) \propto x^\beta \quad x \rightarrow \infty \quad (3.9)$$

Utilizando las ecuaciones (3.7-9) se recupera la dependencia clásica del parámetro de orden en el límite termodinámico.

$$\rho_{act}(p_s, p_r, L = \infty) \propto [\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)]^\beta \quad (3.10)$$

El conjunto de exponentes críticos definido anteriormente no es independiente ya que existen relaciones de escala entre ellos. En efecto, dentro del régimen supercrítico la ecuación (3.2) puede ser escrita

$$P(t) \propto [\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)]^{\delta\nu_t} \psi[\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)t^{1/\nu_t}] \quad (3.11)$$

con

$$\psi(x) = x^{-\delta\nu_t} \phi(x) \quad (3.12)$$

Dado que  $\lim_{t \rightarrow \infty} P(t)$  es finito,  $\lim_{x \rightarrow \infty} \phi(x)$  es también finito, y se obtiene  $P(t = \infty) \propto [\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)]^{\delta\nu_t}$ . Además  $P(t = \infty)$  y  $\rho_{act}$  dada por la ecuación (3.10) deben tener el mismo exponente crítico [122], luego

$$\beta = \delta\nu_t \quad (3.13)$$

Por otro lado, se supone que para los eventos de sobrevida en el régimen supercrítico la densidad de partículas es constante en el interior de una esfera  $D$ -dimensional la cual se expande a velocidad constante  $v$ . Luego

$$[\langle R^2(t) \rangle]^{1/2} \propto vt \quad (3.14)$$

para  $\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)$  fijo y  $t \rightarrow \infty$ . Combinando ahora con la ecuación (3.4), se encuentra

$$v \propto [\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)]^{(1-z/2)\nu_t} \quad (3.15)$$

y

$$g(x) \propto \text{constante } x^{(1-z/2)\nu_t} \quad x \rightarrow \infty \quad (3.16)$$

Utilizando las ecuaciones (3.10), (3.14), (3.15) y la relación (3.13), el comportamiento asintótico del número medio de partículas  $N(t \rightarrow \infty)$  puede ser escrito

$$\begin{aligned} N(t \rightarrow \infty) &\propto \text{constante } \rho_{act} P(t \rightarrow \infty) [\langle R^2(t) \rangle]^{1/2} \\ &\propto [\Gamma(\Delta_1, \Delta_2)]^{2\beta(1-z/2)\nu_t D} t^D \end{aligned} \quad (3.17)$$

la cual comparada con la ecuación (3.3) conduce a

$$Dz = 2\eta + 4\delta \quad (3.18)$$

Para finalizar esta sección, se introducirán algunos conceptos necesarios para el estudio de la estabilidad dinámica de un sistema. Cómo se propaga una perturbación a través de un sistema compuesto de subunidades interactuantes es una

cuestión que surge en diferentes campos de la investigación [123-125]. Considérese, por simplicidad, un sistema de variables de Ising. Luego, se estudia cómo una pequeña perturbación denominada daño se propaga en dicho sistema cooperativo [126]. Para hacer esto, se hace evolucionar al sistema hasta alcanzar el equilibrio. Luego, a  $t = 0$ , se hace una réplica de esa configuración de equilibrio y se invierte un sólo spin ("daño inicial") en el centro de la réplica. Tanto el sistema original como su réplica dañada, evolucionan con la misma dinámica, es decir, los mismos números aleatorios son utilizados para ambos. Pasado un cierto tiempo, el pequeño daño inicial resulta generalmente en una región del sistema cooperativo en la cual los spins  $\rho_i(t)$  del sistema réplica difieren en la orientación con los correspondientes en el sistema original  $\sigma_i(t)$ . Se denomina a esta región "región dañada", y una medida cuantitativa de este daño es contar el número de spins en el sistema perturbado que difieren de sus correspondientes en el sistema original, es decir

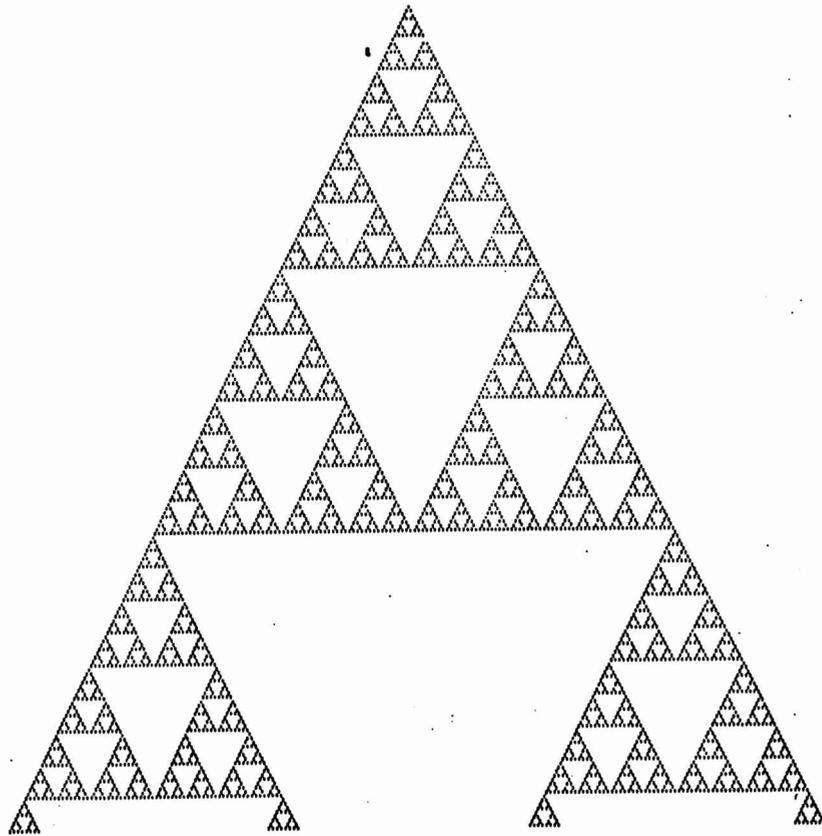
$$D(t) = \frac{1}{2N} \sum_i | \sigma_i(t) - \rho_i(t) | \quad (3.19)$$

donde  $N$  es el número total de sitios.

En consecuencia, uno podría llamar al comportamiento dinámico caótico, cuando en el límite termodinámico  $D(t)$  tiende a un valor finito para tiempos grandes si  $D(0) \rightarrow 0$ . El comportamiento opuesto al caótico es llamado "frozen", es decir, cuando  $D(\infty) = 0$  si  $D(0) \rightarrow 0$ .

Como ejemplo consideremos una sistema unidimensional de spins, como podría ser un conjunto de átomos magnéticos, los cuales pueden tener su momento dipolar magnético en el estado "up" o "down". Inicialmente los spins son orientados aleatoriamente. Luego, para cada tiempo  $t = 1, 2, 3, \dots$ , cada spin depende de la orientación de sus dos primeros vecinos, el de la izquierda y el de la derecha. Utilizando como regla de actualización el OR-exclusivo (también abreviado como XOR), el estado de un determinado spin será up si sus dos vecinos tienen diferentes orientaciones y down si son paralelos. Notemos que esta regla define un autómata celular. La figura 3.1 representa a dos autómatas diferentes los cuales siguen la

misma regla XOR pero que poseen configuraciones iniciales que difieren solamente en el valor del estado de una variable de spin. Concretamente, la figura 3.1 muestra el daño, es decir, el conjunto de spins que difieren en una comparación de las dos configuraciones en cada instante de tiempo. Cada nueva fila del gráfico representa el daño al siguiente tiempo. En consecuencia vemos que "orden y belleza" pueden surgir del desorden: Las condiciones iniciales eran completamente aleatorias y sin embargo surgió una regularidad.



**Figura 3.1.** Propagación del daño para la regla XOR unidimensional. Para una configuración inicial de spins completamente aleatoria, se analiza de qué manera la inversión del spin central afecta la evolución del sistema. La primer fila corresponde a  $t = 0$ , la segunda a  $t = 1$ , y así sucesivamente.

### 3.3 Resultados y su Discusión

**Modelos propuestos:** Dentro de este contexto, se estudiarán dos sistemas dinámicos irreversibles, uno de ellos basado en el 2JV y el otro en el 1JV, donde se incluyen en ambos componentes estocásticas en las reglas microscópicas. En este sentido nuestros modelos son generalizaciones del 2JV y del 1JV.

El 2JV, tal y como fue establecido por John Conway, exhibe diversas configuraciones aisladas con propiedades interesantes [107, 108]. La configuración aislada más simple invariante ante la evolución temporal es el "block", que consiste de un cuadrado con un sitio vivo en cada vértice. Existen también configuraciones aisladas oscilatorias, entre las que se puede mencionar el "blinker" que consiste de una línea de tres sitios vivos y cuyo período es dos (la configuración se repite cada dos puestas al día de la red). Otro tipo de configuración también invariante ante la evolución temporal es el llamado "glider", el cual consiste de cinco sitios vivos. Esta configuración tiene la propiedad de moverse uniformemente a través de la red realizando una oscilación de período dos.

Por lo tanto, como consecuencia de las reglas microscópicas que rigen el 2JV, éste presenta un sólo estado estacionario activo cuya densidad asintótica es  $\rho_\infty \approx 0.03$  [114]. Se debe acotar que  $\rho_\infty$  es una función de la densidad inicial  $\rho(t = 0)$  [109, 112], pero para  $0.15 \leq \rho(t = 0) < 0.75$ ,  $\rho_\infty$  toma el valor mencionado.

Del gran número de maneras en que se pueden incorporar componentes estocásticas en las reglas microscópicas, sólo algunas de ellas conducen a un comportamiento dinámico singular. Las reglas microscópicas propuestas para este modelo son las siguientes:

- i) Un sitio desocupado (con valor = 0) al tiempo  $t$  resulta ocupado a  $t + 1$  sólo si exactamente tres de sus ocho vecinos estaban ocupados al tiempo  $t$ .
- ii) Un sitio ocupado (con valor = 1) al tiempo  $t$  que posee cuatro o más de sus ocho vecinos ocupados resultará desocupado a tiempo  $t + 1$ .
- iii) Un sitio ocupado que tiene sólo un vecino ocupado, o ninguno, al tiempo  $t$ , resultará desocupado al tiempo  $t + 1$ .

- iv) Un sitio ocupado al tiempo  $t$  permanecerá ocupado con probabilidad  $p_s$  ( $0 \leq p_s \leq 1$ ) al tiempo  $t + 1$  si y sólo si posee dos o tres vecinos ocupados al tiempo  $t$ .
- v) Un sitio desocupado al tiempo  $t$  resultará ocupado con probabilidad  $p_r$  al tiempo  $t + 1$ , si y sólo si posee dos vecinos ocupados al tiempo  $t$ .

Debe notarse que para  $p_s = 1$  y  $p_r = 0$  se recobra el modelo original de Conway. De aquí en más llamaremos a éste modelo, el modelo "2JV estocástico".

El 1JV exhibe un comportamiento local esencialmente similar al 2JV, tal como la existencia de estructuras que se propagan y auto-reproducen [115]. La configuración aislada más simple que sobrevive, es un par de sitios ocupados primeros vecinos. Dicha colonia, es una configuración oscilatoria de período dos (se repite cada dos puestas al día de la red). Un estudio de la densidad asintótica  $\rho_\infty$  [127], revela la existencia de dos regímenes diferentes: para  $0 \leq \rho(0) < 0.30$ ,  $\rho_\infty$  crece rápidamente mientras que para  $0.30 \leq \rho(0) < 1.00$ ,  $\rho_\infty$  permanece constante (dentro del error estadístico) alrededor del valor 0.162. Al igual que en el modelo 2JV, existen diversas maneras de incorporar las componentes estocásticas a las reglas microscópicas del 1JV, conduciendo sólo algunas de ellas a un comportamiento dinámico singular. Las reglas microscópicas propuestas para este modelo son las siguientes:

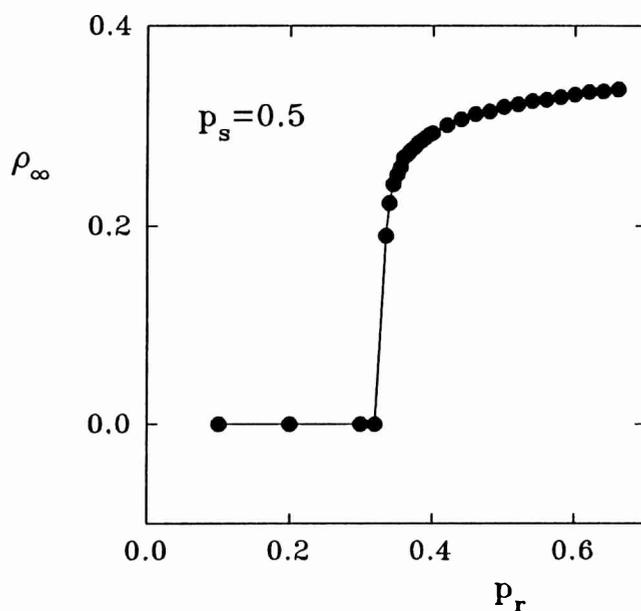
- i) Un sitio desocupado (con valor = 0) al tiempo  $t$  resulta ocupado a  $t + 1$  si exactamente tres de sus cuatro vecinos estaban ocupados al tiempo  $t$ .
- ii) Un sitio desocupado (con valor = 0) al tiempo  $t$  permanecerá desocupado a  $t + 1$  si posee o bien cero, uno o cuatro vecinos ocupados al tiempo  $t$ .
- iii) Un sitio desocupado (con valor = 0) al tiempo  $t$  resultará ocupado con probabilidad  $p_r$  a  $t + 1$  si exactamente dos de sus cuatro vecinos estaban ocupados al tiempo  $t$ .
- iv) Un sitio ocupado (con valor = 1) al tiempo  $t$  permanecerá ocupado al tiempo  $t + 1$  si sus cuatro vecinos estaban ocupados al tiempo  $t$ .
- v) Un sitio ocupado (con valor = 1) al tiempo  $t$  permanecerá ocupado con probabilidad  $p_r$  al tiempo  $t + 1$  si dos de sus cuatro vecinos estaban ocupados al tiempo  $t$ .
- vi) Un sitio ocupado (con valor = 1) al tiempo  $t$  permanecerá ocupado con probabilidad  $p_s$  al tiempo  $t + 1$  si uno o tres de sus cuatro vecinos estaban ocupados al

tiempo  $t$ .

Debe notarse que para  $p_r = 1$  y  $p_s = 0$  se recobra el modelo original 1JV. En lo siguiente, el modelo propuesto será referido como el modelo "1JV estocástico".

• **I. Análisis epidémico y estudio de la estabilidad dinámica en el modelo 2JV estocástico.**

Como consecuencia de la manera en que se han incluido las componentes estocásticas, el sistema presenta ahora una variedad de estados estacionarios activos ( $\rho_\infty \neq 0$ ) para un conjunto de valores de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$ . Sin embargo, para otro conjunto de valores  $(p_s, p_r)$  diferente del anterior, el sistema evoluciona desde cualquier configuración inicial hacia un estado, al que llamaremos estado absorbivo, que está caracterizado por una densidad asintótica nula ( $\rho_\infty = 0$ ).



**Figura 3.2.** Gráfico de de la densidad asintótica  $\rho_\infty$  versus el parámetro  $p_r$  manteniendo  $p_s = 0.5$  constante. Los valores de la densidad son tomados para  $t \sim 300$  (régimen asintótico) y se utilizó una red de tamaño  $L = 200$ .

Luego se observa que variando de forma adecuada los parámetros es posible transitar desde la fase activa a la absorbente. El estudio del sistema se realizará en base al análisis epidémico explicado en la sección anterior. Se debe notar que las reglas microscópicas del modelo, involucran procesos de absorción y reproducción necesarios para que esta técnica sea aplicable. Es oportuno en este momento, describir brevemente el comportamiento de este modelo. Si se analiza el plano  $\{p_s, p_r\}$ , se tiene que fijando un valor arbitrario de la probabilidad  $p_s < 1$  y comenzando con un valor de  $p_r = 1$ , disminuciones sucesivas de  $p_r$  causan que la densidad de partículas del estado estacionario decrezca hasta anularse de manera irreversible en algún punto crítico de coordenadas  $\{p_s^c, p_r^c\}$ . Debido a las fluctuaciones del proceso estocástico estudiado en un sistema finito, las cuales pueden causar la transición irreversible del sistema hacia el estado absorbente ( $\rho_\infty = 0$ ) aún para  $p_r > p_r^c$ , es difícil calcular con suficiente precisión el punto crítico. Este inconveniente puede ser evitado mediante el análisis epidémico.

La figura 3.2 muestra un gráfico de la densidad media  $\rho_\infty$  versus  $p_r$  para un valor de  $p_s = 0.5$  constante. Se observa que incrementando  $p_r$ , la densidad media crece de forma abrupta desde  $\rho_\infty = 0$  hasta  $\rho_\infty \approx 0.19$  para  $p_r = 0.335$ , y luego sigue aumentando lentamente. Dado que la densidad es el parámetro de orden natural del sistema, esto indica que la transición de fase "vida-muerte" es posiblemente de primer orden. Se debe notar que, aunque el análisis epidémico fue introducido en el marco de las transiciones irreversibles de segundo orden, su aplicación puede generalizarse, dado que dicha técnica caracteriza el orden mismo de la transición (primero o segundo) [128]. Sin embargo, al tratar transiciones irreversibles de primer orden, resultan sin sentido las consideraciones acerca de universalidad, ya que en un punto crítico de primer orden, las correlaciones espaciales son todas de rango finito [129]. En este caso, el análisis epidémico es aún muy útil para determinar con suficiente exactitud los puntos críticos y el conjunto de exponentes críticos que caracterizan a cada uno de ellos.

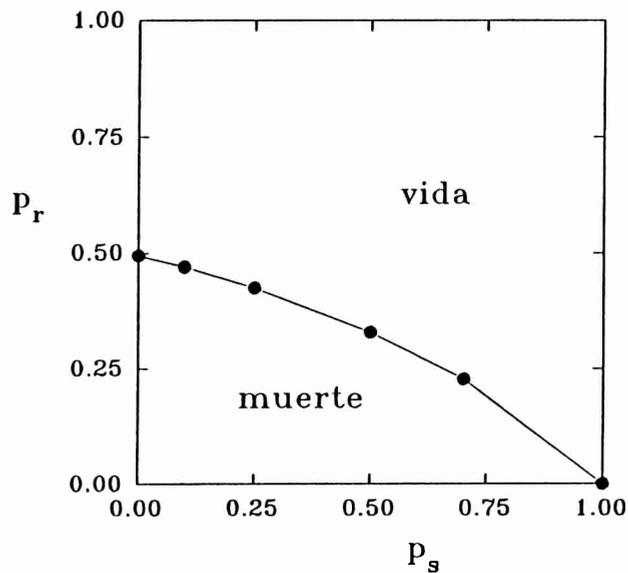


Figura 3.3. Gráfico de los puntos críticos  $p_r^c$  versus  $p_s$ . Los puntos son los valores críticos determinados con suficiente exactitud. La porción del gráfico que está debajo de la curva corresponde al estado absorbivo ( $\rho_\infty = 0$ ), mientras que la porción superior, corresponde a los diversos estados estacionarios activos ( $\rho_\infty \neq 0$ ).

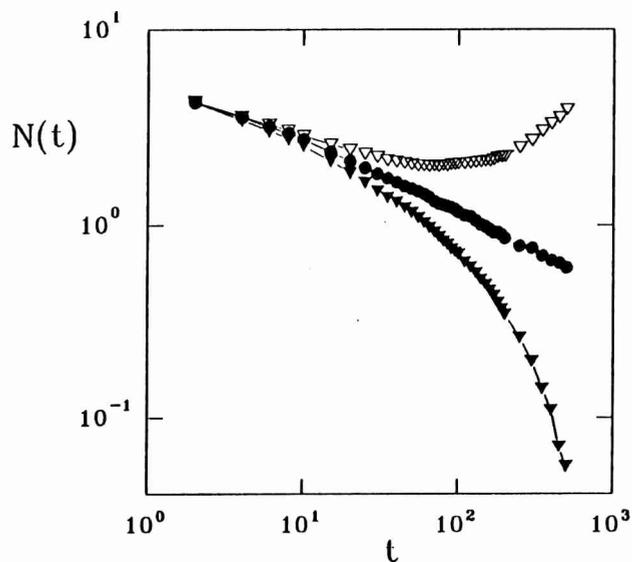
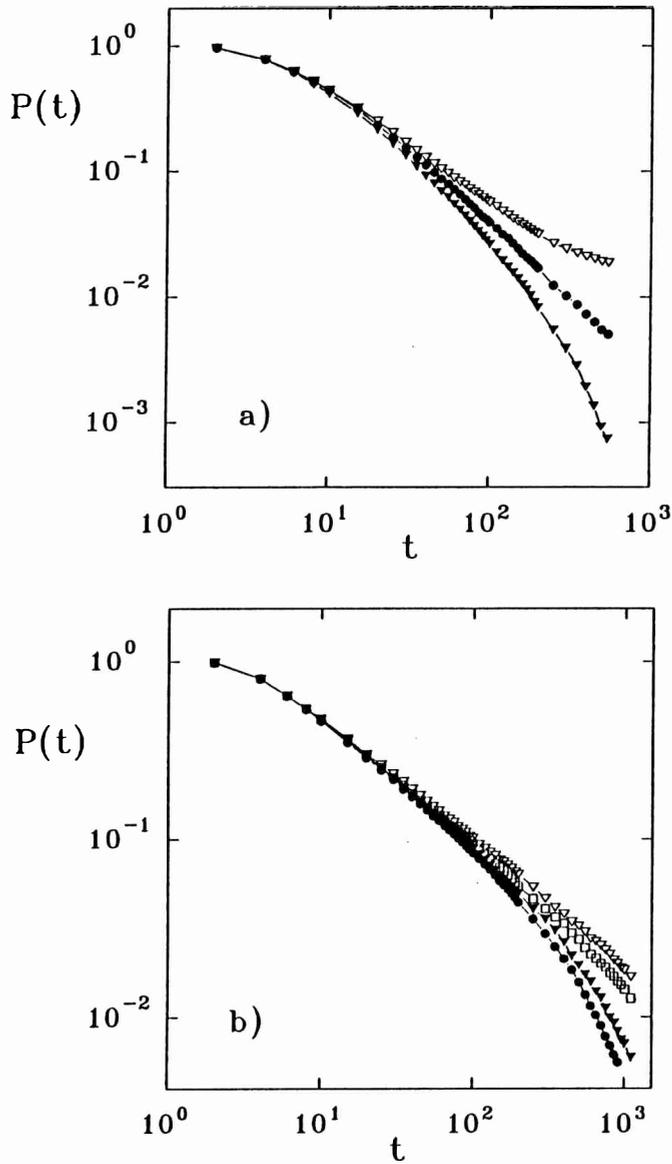


Figura 3.4. Gráfico log-log de  $N(t)$  versus  $t$  para  $p_s = 0.1$ . ●,  $p_r = 0.47$  (régimen crítico); ▼,  $p_r = 0.475$  (régimen supercrítico); ▲,  $p_r = 0.465$  (régimen subcrítico).

Cabe mencionar que, comenzando con diferentes valores de  $p_s$ , se obtiene un conjunto de puntos críticos los cuales definen una curva crítica  $p_r^c(p_s)$ , como se muestra en la figura 3.3. La curva crítica divide el plano  $\{p_s, p_r\}$  en dos regiones: i)  $p_r > p_r^c$  llamada región supercrítica, donde la densidad de partículas del estado estacionario  $\rho_\infty$  es mayor que cero y ii)  $p_r \leq p_r^c$  llamada región subcrítica, donde existe un sólo estado estacionario absorbente de densidad nula de partículas ( $\rho_\infty = 0$ ). Los puntos en la figura 3.2 son los valores críticos determinados con gran exactitud.

Se efectúa ahora un análisis epidémico para la evolución de una pequeña colonia de sitios vivos embebida en un "mar" de sitios muertos a  $t = 0$ . Los promedios son realizados sobre aproximadamente  $1 \times 10^4$  muestras, y la evolución del sistema es monitoreada hasta tiempo  $t = 1100$ . El tamaño de la red es tomado lo suficientemente grande ( $L = 200$ ), con el propósito de evitar que la colonia se propague hasta los extremos del sistema. Utilizando este procedimiento, se puede asegurar que los datos están libres de efectos de tamaño finito provocados por los extremos del sistema. En un punto crítico, y de acuerdo con las ecuaciones (3.2) y (3.3), gráficos en escala logarítmica de  $N(t)$  y  $P(t)$  resultarán en líneas rectas, mientras que ocurrirán desviaciones aún dentro de una vecindad del punto crítico. Este comportamiento resulta evidente en la figura 3.4 la cual muestra un gráfico log-log de  $N(t)$  versus  $t$  obtenido sintonizando cuidadosamente el parámetro  $p_r$  alrededor de  $p_r^c$  y comenzando la epidemia con un "glider" (colonia de cinco sitios vivos). También se observa un comportamiento análogo en las figuras 3.5a y 3.5b, que muestran gráficos log-log de  $P(t)$  vs  $t$  para la misma colonia inicial. Los exponentes críticos  $\eta$  y  $\delta$  son obtenidos mediante un ajuste por cuadrados mínimos de los datos.

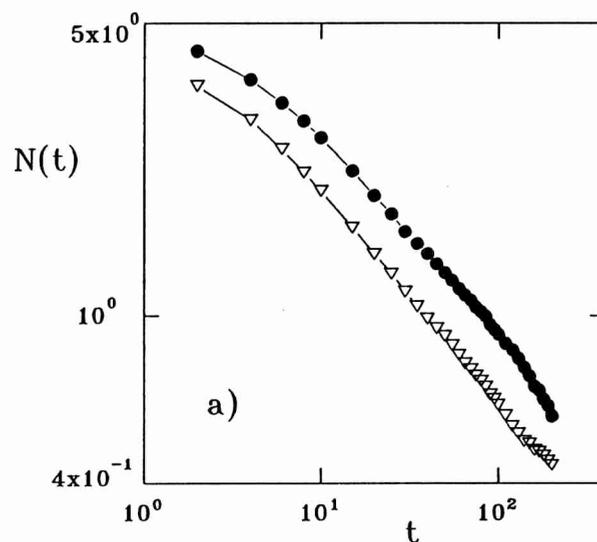


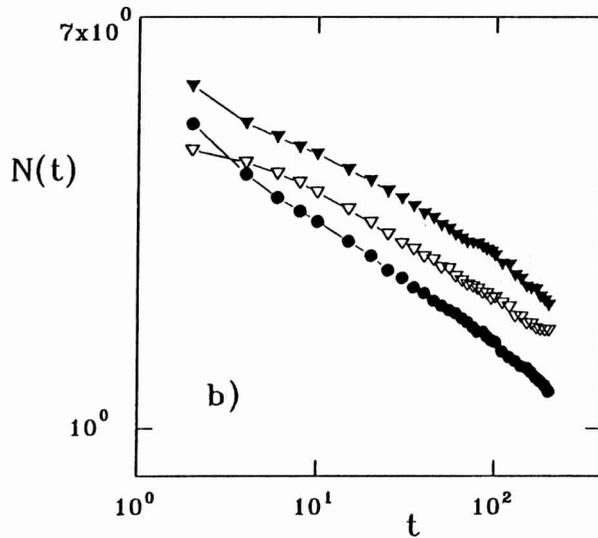
**Figura 3.5.** Gráfico log-log de  $P(t)$  versus  $t$ . a)  $p_s = 0.1$  y  $\bullet$ ,  $p_r = 0.47$  (régimen crítico);  $\nabla$ ,  $p_r = 0.475$  (régimen supercrítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_r = 0.465$  (régimen subcrítico). b)  $p_s = 0.7$  y  $\bullet$ ,  $p_r = 0.224$  (régimen subcrítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_r = 0.2255$  (régimen subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_r = 0.228$  (régimen supercrítico);  $\square$ ,  $p_r = 0.2268$  (régimen crítico).

Tabla 3.1 Puntos críticos y exponentes críticos correspondientes al modelo 2JV estocástico.

$p_s$	$p_r$	$\eta$	$\delta$
0.0	$0.493 \pm 2 \times 10^{-3}$	$-0.264 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1.024 \pm 7 \times 10^{-3}$
0.1	$0.470 \pm 2 \times 10^{-3}$	$-0.392 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1.180 \pm 5 \times 10^{-3}$
0.25	$0.425 \pm 2 \times 10^{-3}$	$-0.507 \pm 2 \times 10^{-3}$	$1.306 \pm 4 \times 10^{-3}$
0.5	$0.329 \pm 2 \times 10^{-3}$	$-0.268 \pm 2 \times 10^{-3}$	$1.000 \pm 5 \times 10^{-3}$
0.7	$0.227 \pm 2 \times 10^{-3}$	$-0.070 \pm 4 \times 10^{-3}$	$0.790 \pm 5 \times 10^{-3}$

Como se aprecia en la tabla (3.1), los valores de los exponentes para los diferentes puntos críticos no coinciden. Esto es debido a que en una transición discontinua, no existen correlaciones de largo alcance que sean capaces de "borrar" la dependencia con los detalles del modelo, es decir, estos exponentes dependerán de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$  y en consecuencia no hay universalidad. Por otro parte, los exponentes críticos caracterizan el comportamiento asintótico del sistema en un punto de transición. Luego, se espera que los valores de dichos exponentes sean independientes del tipo de colonia inicial usada para comenzar la epidemia.





**Figura 3.6.** Gráfico log-log de  $N(t)$  versus  $t$  obtenido para diferentes colonias iniciales en el punto crítico. a)  $p_s = 0.25$ ,  $p_r = 0.425$ ; ●, glider; ▽, blinker. b)  $p_s = 0.0$ ,  $p_r = 0.4935$ ; ●, glider; ▽, blinker; ▼, pond (colonia de ocho sitios).

Esto se observa en las figuras 3.6a y 3.6b que muestran gráficos logarítmicos de  $N(t)$  vs  $t$  en un punto crítico, utilizando como colonias iniciales a blinkers (tres sitios vivos) gliders (cinco sitios vivos) y ponds (ocho sitios vivos). Se aprecia claramente que las pendientes asintóticas de las rectas correspondientes a las distintas colonias son iguales. La figura 3.7a (3.7b) muestra un gráfico log-log de  $N(t)$  ( $P(t)$ ) vs  $t$  en los puntos críticos. Se observa que a medida que el modelo se aproxima al modelo de Conway ( $p_s \rightarrow 1$  y  $p_r \rightarrow 0$ ) las pendientes de las rectas en las figuras 3.7a y 3.7b se aproximan a cero. Este comportamiento era previsible, ya que en el 2JV, un glider embebido en un mar de sitios muertos es una colonia estable, es decir, no se reproduce ni se extingue.

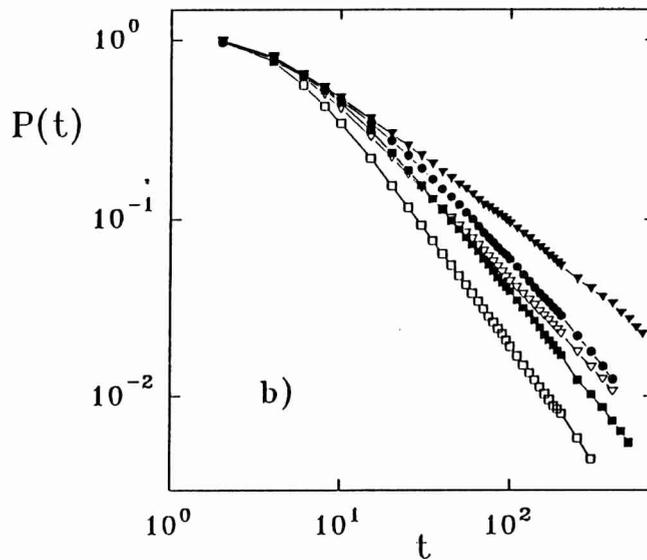
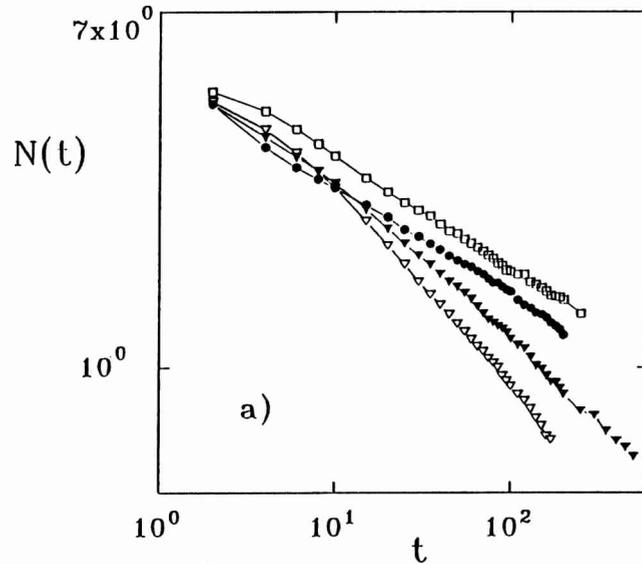
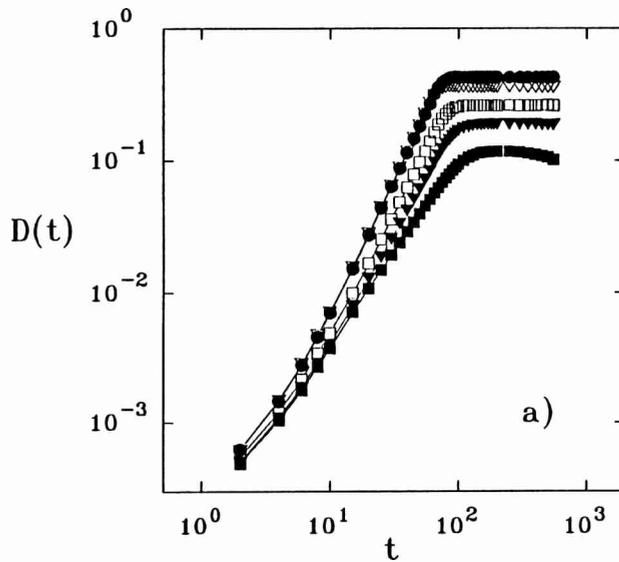


Figura 3.7. a) Gráfico log-log de  $N(t)$  versus  $t$  para diferentes puntos críticos.  $\square$ ,  $p_s = 0.5$ ,  $p_r = 0.329$ ;  $\bullet$ ,  $p_s = 0.0$ ,  $p_r = 0.4935$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.25$ ,  $p_r = 0.425$ ;  $\nabla$ ,  $p_s = 0.1$ ,  $p_r = 0.47$ . b) Gráfico log-log de  $P(t)$  versus  $t$  para diferentes puntos críticos.  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.7$ ,  $p_r = 0.227$ ;  $\bullet$ ,  $p_s = 0.0$ ,  $p_r = 0.4935$ ;  $\nabla$ ,  $p_s = 0.5$ ,  $p_r = 0.329$ ;  $\blacksquare$ ,  $p_s = 0.25$ ,  $p_r = 0.425$ ;  $\square$ ,  $p_s = 0.1$ ,  $p_r = 0.47$ .

Se estudia a continuación la estabilidad dinámica en el modelo 2JV estocástico mediante la técnica de propagación del daño. La forma de generar y de analizar la propagación del daño es análoga a la ya explicada en la introducción teórica para el modelo de Ising. Una red cuadrada bidimensional de tamaño  $L$  es ocupada aleatoriamente con probabilidad  $p = 0.50$ . Luego, se hace evolucionar el sistema hasta que se alcanza el estado estacionario. La configuración estacionaria es entonces replicada. Sólo si el sitio central de la réplica, de coordenadas  $(L/2, L/2)$ , tiene dos o tres vecinos vivos, se lo daña (si su valor es cero lo cambio por uno o viceversa), ya que en cualquier otro caso esto sería irrelevante. Dado que en la región subcrítica el sistema evoluciona desde cualquier configuración inicial hacia el estado absortivo, se cumple en dicha región que  $D(\infty) = 0$  independientemente del valor del daño inicial. En consecuencia, la región subcrítica exhibe un comportamiento "frozen".



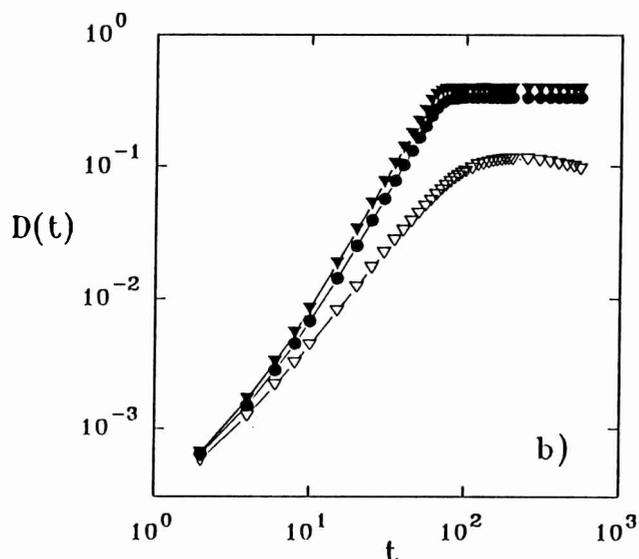


Figura 3.8. Gráfico log-log de  $D(t)$  versus  $t$  para diferentes valores de  $p_r$  y manteniendo  $p_s$  constante. a)  $p_s = 0.0$ ;  $\bullet$ ,  $p_r = 1.0$ ;  $\nabla$ ,  $p_r = 0.6$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $p_r = 0.496$ ;  $\square$ ,  $p_r = 0.5$ ;  $\blacksquare$ ,  $p_r = 0.494$ . b)  $p_s = 0.5$ ;  $\bullet$ ,  $p_r = 0.35$ ;  $\nabla$ ,  $p_r = 0.33$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $p_r = 0.7$ .

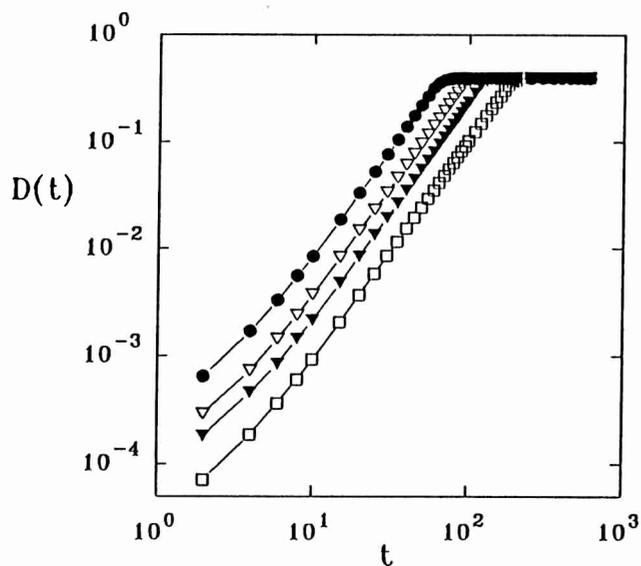


Figura 3.9. Gráfico log-log de  $D(t)$  versus  $t$  para diferentes valores del tamaño de la red  $L$  y manteniendo  $p_s = 0.5$  y  $p_r = 0.7$  constante.  $\bullet$ ,  $L = 100$ ;  $\nabla$ ,  $L = 150$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $L = 200$ ;  $\square$ ,  $L = 300$ .

Las figuras 3.8a y 3.8b muestran gráficos log-log de  $D(t)$  versus  $t$  para valores de  $p_s$  fijos y distintos valores de  $p_r$  siempre dentro de la región supercrítica. Se observa en ambos gráficos un crecimiento lineal del daño hasta alcanzar un valor de saturación. Dicho valor de saturación depende del parámetro  $p_r$  (recordar que  $p_s$  es constante en ambos gráficos) y es menor a medida que  $p_r \rightarrow p_r^c$ . Es claro también de las figuras, que las pendientes de las rectas antes de la saturación son menores a medida que  $p_r \rightarrow p_r^c$ . La figura 3.9 muestra un gráfico de  $D(t)$  versus  $t$  para el mismo par de valores  $p_s$  y  $p_r$  y redes de diferentes tamaños. Se aprecia claramente que las pendientes correspondientes a las distintas redes en la región algebraica son idénticas y además los valores de saturación del daño son iguales. Entonces, para cada par de valores  $p_s, p_r$  en la región supercrítica, se tiene

$$D(t) \propto \begin{cases} t^\alpha & t \leq \tau \\ \text{constante} & t > \tau \end{cases} \quad (3.20)$$

donde  $\tau$  es el tiempo de saturación y  $\alpha$  un exponente a determinar. Se puede notar en la figura 3.9 que el valor de  $\tau$  es función de  $L$ . Esto se debe a que la velocidad de propagación del daño es independiente del tamaño  $L$  de la red, y consecuentemente, el tiempo necesario para que el daño alcance su valor de saturación crece con  $L$ . Esto sugiere que un colapso de los datos sería posible, si los valores del tiempo son normalizados al tiempo de saturación  $\tau(L)$ .

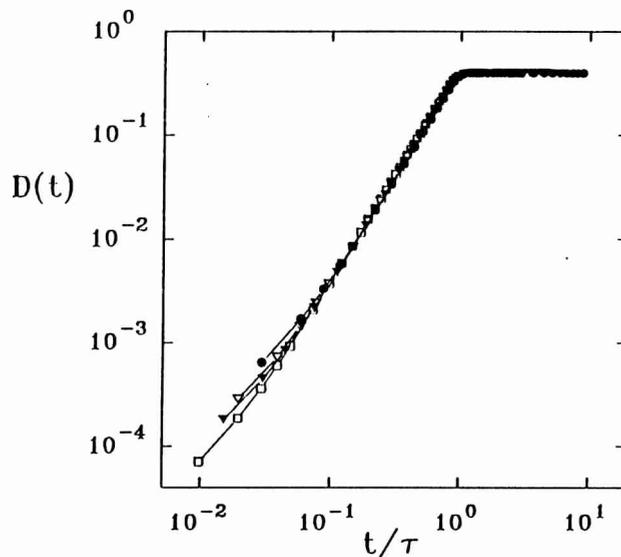
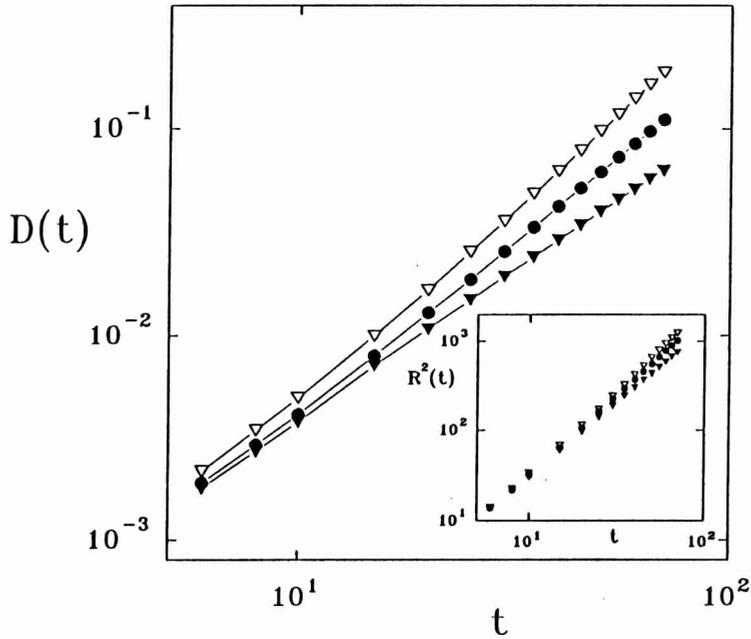


Figura 3.10. Gráfico log-log de  $D(t)$  versus  $t/\tau(L)$  para diferentes valores del tamaño de la red  $L$  y manteniendo  $p_s = 0.5$  y  $p_r = 0.7$  constante.  $\bullet$ ,  $L = 100$ ;  $\nabla$ ,  $L = 150$ ;  $\blacktriangledown$ ,  $L = 200$ ;  $\square$ ,  $L = 300$ .

En la figura 3.10 se muestran de esta manera colapsados los datos correspondientes a la distintas redes de la figura 3.9. Luego la ecuación (3.20) toma la siguiente forma de escala

$$D(x) \propto \begin{cases} x^\alpha & x \leq 1 \\ \text{constante} & x > 1 \end{cases} \quad (3.21)$$

donde  $x = t/\tau(L)$ . En la tabla 3.2 se muestran los valores calculados de  $\alpha$  y  $\tau(L = 100)$ . Puede apreciarse en la tabla que la mayor parte de los valores de  $\alpha$  están cercanos a dos y que valores del exponente menores que dos son obtenidos cuando los valores de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$  son muy cercanos a los críticos.



**Figura 3.11.** Gráfico log-log de  $D(t)$  versus  $t$  en la región algebraica para diferentes valores de  $p_r$  y manteniendo  $p_s = 0.0$  constante. El gráfico interno muestra a  $R^2(t)$  versus  $t$  para los mismos valores de  $p_s$  y  $p_r$ .  $\blacktriangledown$ ,  $p_r = 0.494$ ;  $\bullet$ ,  $p_r = 0.496$ ;  $\nabla$ ,  $p_r = 0.5$ .

Este efecto de reducción del exponente puede ser apreciado más claramente en la figura 3.11 donde se grafica  $D(t)$  versus  $t$  para valores diferentes de  $p_r$  y manteniendo  $p_s$  constante. Por claridad, sólo se ha graficado la región algebraica. El gráfico interno de esta figura muestra un efecto análogo que se presenta para la distancia cuadrática media de propagación del daño  $R^2(t)$ . De forma similar que para  $D(t)$  se escribe

$$R^2(t) \propto \begin{cases} t^\beta & t \leq \tau \\ \text{constante} & t > \tau \end{cases} \quad (3.22)$$

donde  $\beta$  es otro exponente a determinar. Si se supone que se cumple que

$$D(t) \propto R^{d_f}(t) \quad (3.23)$$

donde el exponente  $d_f$  caracteriza el crecimiento del número de sitios dañados con la distancia al sitio central de la red, y combinando con las ecuaciones (3.20) y (3.21) se tiene la siguiente relación

$$2\alpha = \beta d_f \quad (3.24)$$

Se observa en la tabla 3.2 que a menos que los valores de  $p_s$  y  $p_r$  estén muy cercanos a los críticos, el valor de  $d_f$  que se deduce de la ecuación (3.23) es dos. Esto implica que para estos casos la región dañada es compacta. Sin embargo, muy cerca de un punto crítico, se obtienen valores de  $d_f$  menores que dos, con lo cual la región dañada sería de característica fractal.

**Tabla 3.2** Valores de los exponentes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $d_f$  y del tiempo de saturación  $\tau(L)$  para diferentes valores de  $p_s$  y  $p_r$ .

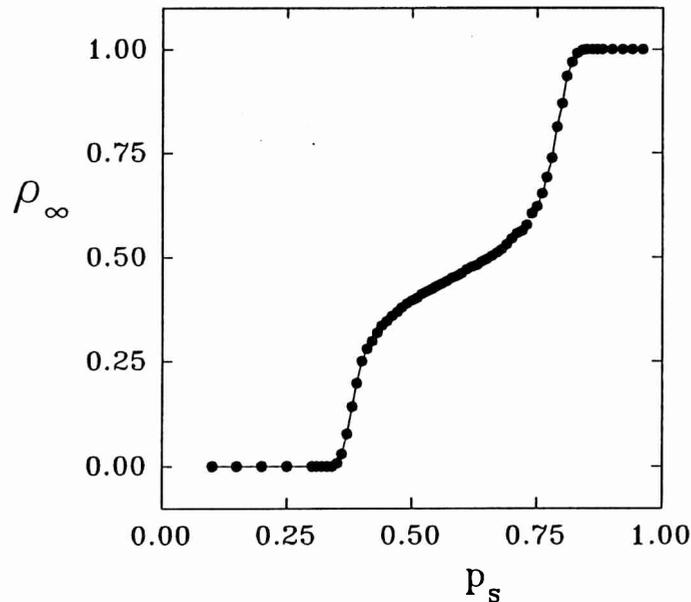
$p_s$	$p_r$	$\alpha$	$\beta$
0.0	0.494	$1.456 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1.631 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.0	0.496	$1.672 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1.765 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.0	0.50	$1.839 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1.841 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.0	0.6	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.0	0.8	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.0	1.0	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.25	0.6	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.25	0.8	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.25	0.9	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.25	1.0	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.5	0.35	$1.977 \pm 3 \times 10^{-3}$	$1.985 \pm 3 \times 10^{-3}$
0.5	0.7	$2.000 \pm 3 \times 10^{-3}$	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$

Tabla 3.2 Continuación.

$p_s$	$p_r$	$d_f$	$\tau(L = 100)$
0.0	0.494	$1.785 \pm 5 \times 10^{-3}$	$109.0 \pm 2.0$
0.0	0.496	$1.895 \pm 5 \times 10^{-3}$	$95.0 \pm 2.0$
0.0	0.50	$1.998 \pm 5 \times 10^{-3}$	$82.0 \pm 2.0$
0.0	0.6	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$70.0 \pm 2.0$
0.0	0.8	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$73.0 \pm 2.0$
0.0	1.0	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$78.0 \pm 2.0$
0.25	0.6	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$69.0 \pm 2.0$
0.25	0.8	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$72.0 \pm 2.0$
0.25	0.9	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$73.0 \pm 2.0$
0.25	1.0	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$75.0 \pm 2.0$
0.5	0.35	$1.992 \pm 5 \times 10^{-3}$	$70.0 \pm 2.0$
0.5	0.7	$2.000 \pm 5 \times 10^{-3}$	$68.0 \pm 2.0$

• II. Análisis epidémico y estudio de la estabilidad dinámica en el modelo 1JV estocástico.

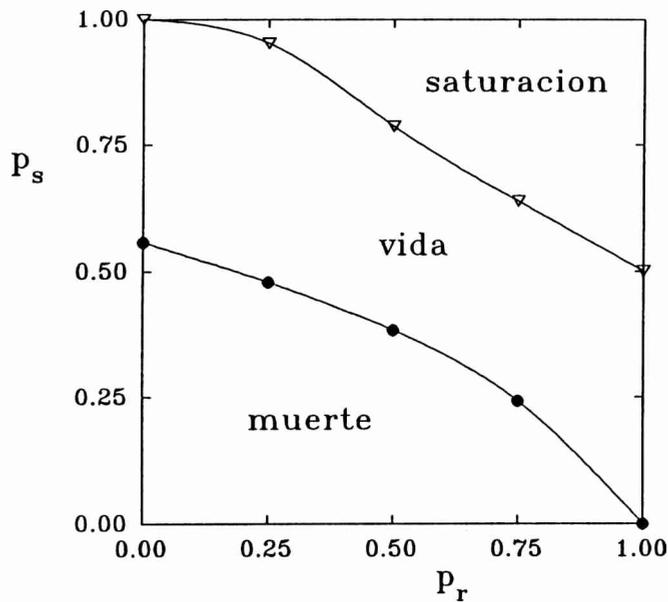
El estudio del siguiente sistema seguirá los lineamientos generales realizados en el análisis del sistema anterior, aunque conclusiones completamente distintas son obtenidas. Debido a la forma en que se han incluido las componentes estocásticas, el sistema presenta ahora una variedad de estados estacionarios activos ( $\rho_\infty \neq 0$ ) para un conjunto de valores de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$ . Sin embargo el modelo 1JV estocástico, a diferencia del modelo 2JV estocástico, presenta dos estados absorbivos diferentes, caracterizados uno de ellos por una densidad asintótica nula y el otro por una densidad asintótica unidad (estado de saturación). Luego, para algún conjunto de valores  $(p_s, p_r)$ , el sistema puede evolucionar, desde cualquier configuración inicial, hacia alguno de los estados absorbivos. Luego se observa que variando de forma adecuada los parámetros es posible transitar desde la fase activa hacia cualquiera de las fases absorbivas. Consecuentemente se aprecia ya, que el sistema presenta en principio dos transiciones de fase. Con el propósito de caracterizar y analizar tales transiciones, se efectuará un análisis epidémico.



**Figura 3.12.** Gráfico de de la densidad asintótica  $\rho_\infty$  versus el parámetro  $p_s$ , manteniendo  $p_r = 0.5$  constante. Los valores de la densidad son tomados para  $t \sim 400$  (régimen asintótico) y se utilizó una red de tamaño  $L = 5000$ .

Se describe brevemente ahora el comportamiento de este modelo. La figura 4.12 muestra un gráfico de la densidad de sitios vivos del estado estacionario  $\rho_\infty$  versus  $p_s$ , manteniendo  $p_r = 0.5$  constante. Se observa que comenzando con un valor intermedio de  $p_s$ , como por ejemplo  $p_s = 0.55$ , incrementos sucesivos de  $p_s$  causan que  $\rho_\infty$  aumente suavemente, hasta que en algún punto crítico de coordenadas  $\{p_r^p, p_s^p\}$  toma de manera irreversible el valor unidad. De forma análoga, si se comienza del mismo punto ( $p_r = 0.5, p_s = 0.55$ ), disminuciones sucesivas de  $p_s$  causan que la densidad de partículas del estado estacionario decrezca suavemente hasta anularse de manera irreversible en otro punto crítico de coordenadas  $\{p_r^c, p_s^c\}$ . La variaciones suaves de  $\rho_\infty$  cerca de ambos puntos críticos, indican que las transiciones irreversibles hacia los dos estados absorbivos son de segundo orden. Además, tomando diferentes valores de  $p_r$ , se obtienen dos conjuntos de puntos críticos distintos los cuales definen

dos curvas críticas  $p_s^p(p_r)$  y  $p_s^c(p_r)$ , como se muestra en la figura 3.13. Las curvas críticas dividen el plano  $\{p_r, p_s\}$  en tres regiones: i) un estado absortivo con todos los sitios ocupados para  $p_s \geq p_s^p(p_r)$  (región subcrítica I); ii) estados estacionarios con  $\rho_\infty < 1$  para  $p_s^c(p_r) < p_s < p_s^p(p_r)$  (región supercrítica) y iii) un estado absortivo de densidad nula para  $p_s \leq p_s^c(p_r)$  (región subcrítica II).

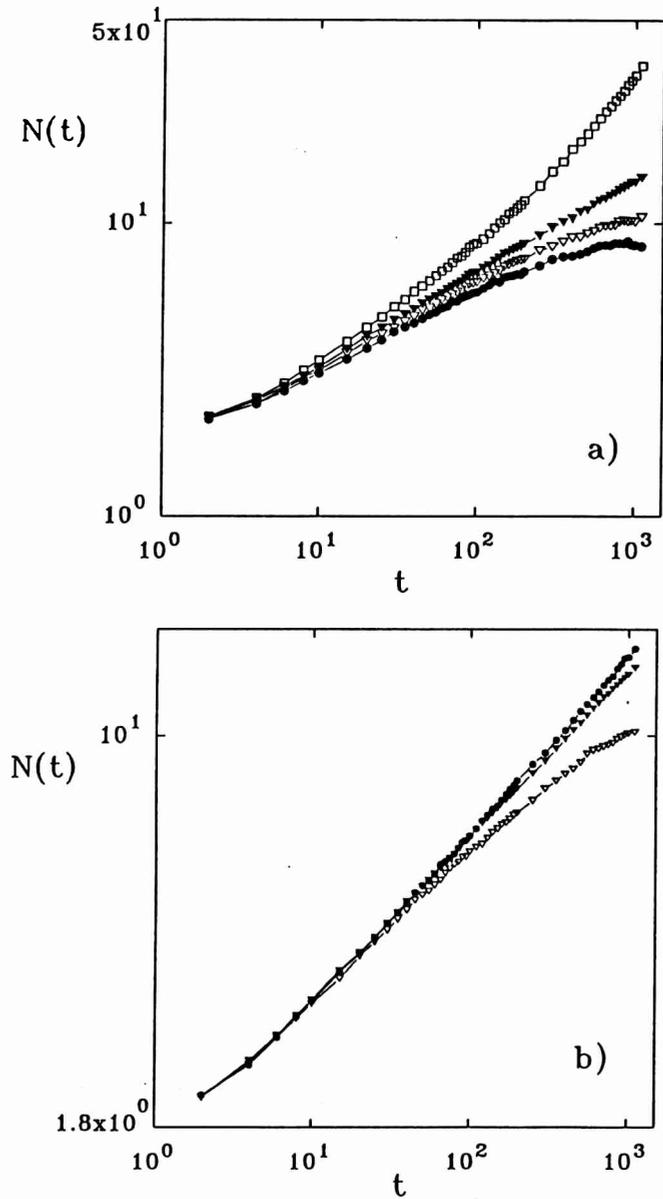


**Figura 3.13.** Gráfico de los puntos críticos  $p_s^p$  y  $p_s^c$  versus  $p_r$ . Los puntos son los valores críticos determinados con suficiente exactitud. La porción del gráfico que está sobre la curva superior corresponde al estado absortivo de saturación ( $\rho_\infty = 1$ ), la porción que está por debajo de la curva inferior corresponde al estado absortivo de  $\rho_\infty = 0$ , mientras que la porción intermedia corresponde a los diversos estados estacionarios activos ( $\rho_\infty \neq 0$ ).

Se debe notar que para un sistema de tamaño  $L$  finito, los estados estacionarios son metaestables ya que, como consecuencia de las fluctuaciones del proceso estocástico, existe siempre una probabilidad finita de que ocurra una transición irreversible del sistema hacia cualquiera de los estados absortivos, aún desde la región supercrítica. Esta probabilidad se incrementa al aproximarse a cualquiera de las curvas críticas, y consecuentemente, es muy difícil calcular

con suficiente precisión los puntos críticos y los exponentes críticos, mediante simulaciones numéricas. Además, las transiciones continuas entre la región supercrítica y los estados absortivos son de segundo orden, es decir, dominadas por fluctuaciones, de manera que un tratamiento de campo medio no es adecuado. Tales inconvenientes, pueden ser evitados evaluando los exponentes críticos relacionados con el comportamiento dinámico del sistema, mediante el análisis epidémico. Los puntos críticos en la la figura 3.13., se han calculado con esta técnica.

Se comenzará calculando los puntos críticos y los exponentes críticos de la transición entre las región supercrítica y el estado absortivo de densidad asintótica nula. En este caso, la aplicación de la técnica resulta ser idéntica a la efectuada en el caso del modelo 2JV. Se comienza a  $t = 0$  con una pequeña colonia (dos sitios vivos primeros vecinos) embebida en el "mar unidimensional" de sitios desocupados, es decir, con una configuración muy cercana a este estado absortivo. Luego se sigue la evolución de dicha colonia mediante el calculo de las siguientes cantidades: i) el número medio de sitios vivos  $N(t)$ ; ii) la probabilidad de sobrevivida  $P(t)$ , es decir, la probabilidad de que la colonia no haya desaparecido al tiempo  $t$ ; y iii) la distancia cuadrática media promedio  $R^2(t)$  sobre la cual la colonia se ha propagado. Se debe acotar que  $N(t)$  es promediado sobre todas las muestras, inclusive aquellas en las cuales la colonia ya se ha extinguido, mientras que  $R^2(t)$  es promediado solamente sobre las muestras que aun poseen sitios ocupados. Los promedios son realizados sobre aproximadamente  $1 \times 10^4$  muestras, y la evolución del sistema es monitoreada hasta tiempo  $t = 1100$ . El tamaño de la red es tomado lo suficientemente grande ( $L = 5000$ ), con el propósito de evitar que la colonia se propague hasta los extremos del sistema.



**Figura 3.14.** Gráfico log-log de  $N(t)$  versus  $t$  para distintos valores de  $p_s$  y manteniendo  $p_r$  constante, para la transición vida-muerte. a)  $p_r = 0.75$  y  $\bullet$ ,  $p_s = 0.239$  (régimen subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.24$  (régimen subcrítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.243$  (régimen crítico);  $\square$ ,  $p_s = 0.25$ , (régimen supercrítico). b)  $p_r = 0.25$  y  $\bullet$ ,  $p_s = 0.48$  (régimen supercrítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.479$  (régimen crítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.478$  (régimen subcrítico).

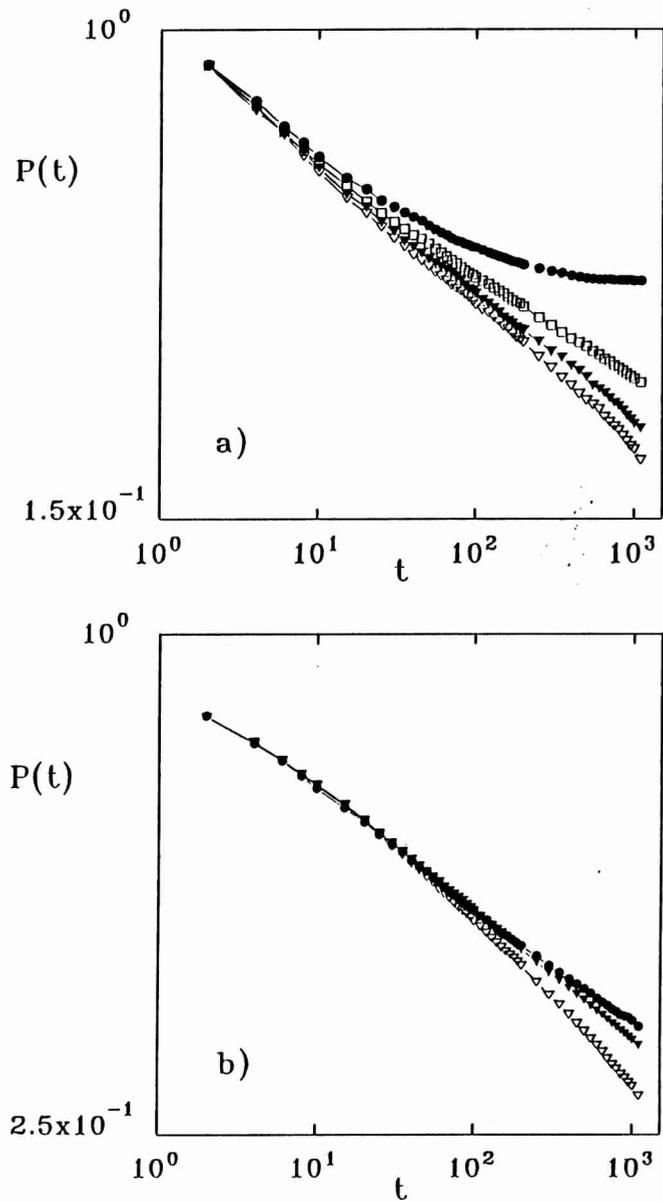
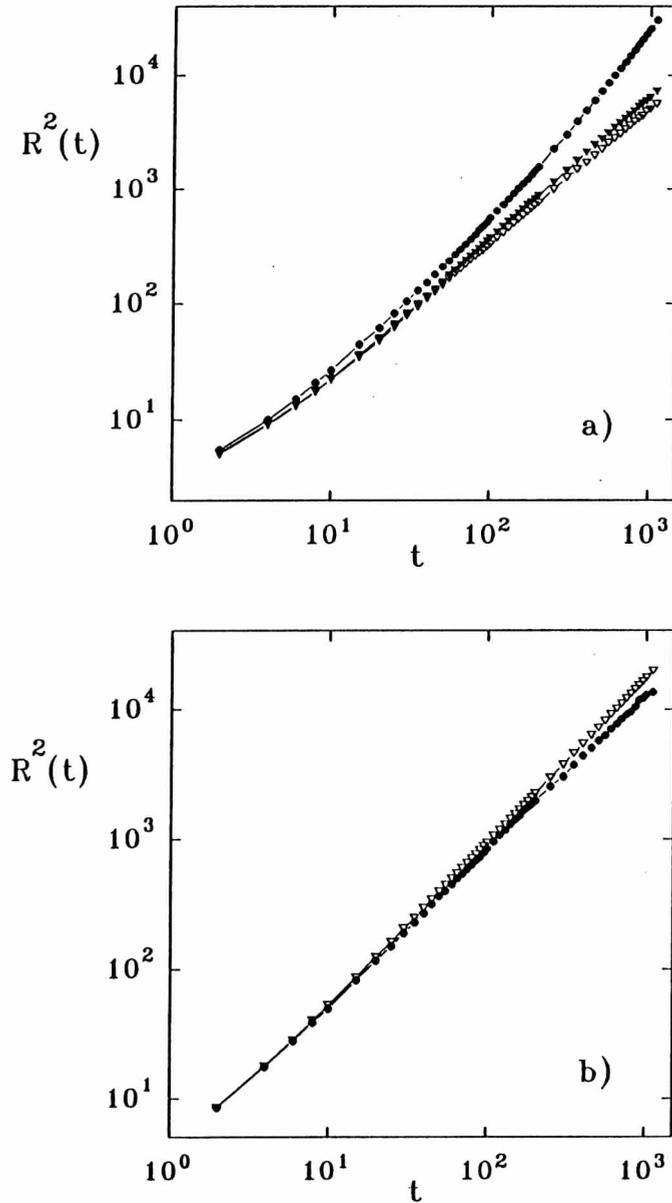


Figura 3.15. Gráfico log-log de  $P(t)$  versus  $t$  para distintos valores de  $p_s$  y manteniendo  $p_r$  constante, para la transición vida-muerte. a)  $p_r = 0.75$  y •,  $p_s = 0.25$  (régimen supercrítico); □,  $p_s = 0.243$  (régimen crítico); ▼,  $p_s = 0.24$  (régimen subcrítico); ∇,  $p_s = 0.239$  (régimen subcrítico). b)  $p_r = 0.25$  y •  $p_s = 0.48$  (régimen supercrítico); ▼,  $p_s = 0.479$  (régimen crítico); ∇,  $p_s = 0.478$  (régimen subcrítico).



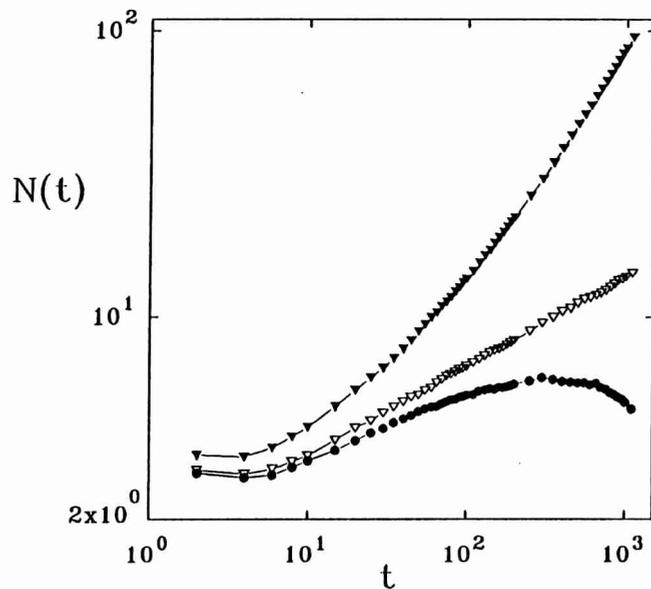
**Figura 3.16.** Gráfico log-log de  $R^2(t)$  versus  $t$  para diferentes valores de  $p_s$  y manteniendo  $p_r$  constante, para la transición vida-muerte. a)  $p_r = 0.75$  y  $\bullet$ ,  $p_s = 0.275$  (régimen supercrítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.243$  (régimen crítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.235$  (régimen subcrítico). b)  $p_r = 0.25$  y  $\bullet$ ,  $p_s = 0.465$  (régimen subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.479$  (régimen crítico).

Utilizando este procedimiento, se puede asegurar que los datos están libres de efectos de tamaño finito provocados por los extremos.

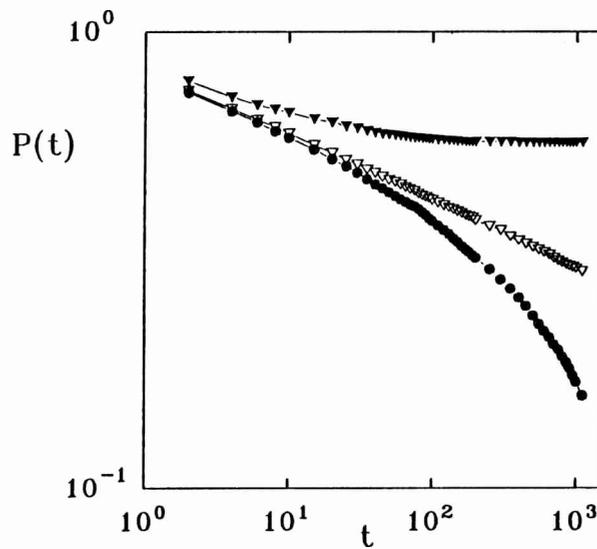
Las figuras 3.14a y 3.14b muestran gráficos log-log de  $N(t)$  versus  $t$  obtenidos sintonizando cuidadosamente el parámetro  $p_s$  alrededor de  $p_s^c$  para  $p_r = 0.25$  y  $p_r = 0.50$  respectivamente. Este procedimiento permite la determinación precisa de los puntos críticos y del exponente  $\eta$ , los cuales son listados en la tabla 3.3. Las figuras 3.15a y 3.15b muestran gráficos log-log de  $P(t)$  versus  $t$  y las figuras 3.16a y 3.16b muestran gráficos log-log de  $R^2(t)$  versus  $t$  para los mismos valores de  $p_r$ . Un análisis del comportamiento asintótico en las figuras 3.15 y 3.16 permite el cálculo de los exponentes  $\delta$  y  $z$  respectivamente. Todos los valores obtenidos son listados en la tabla 3.3 la cual también incluye exponentes determinados en dos puntos críticos adicionales.

Se efectúa ahora el cálculo de los puntos críticos y los exponentes críticos de la transición entre la región supercrítica y el estado de saturación (densidad asintótica unidad). En este caso se procede de la siguiente manera. En una red de tamaño  $L$  completamente ocupada, se coloca una pequeña colonia de sitios muertos (dos sitios desocupados primeros vecinos) en el centro de la red a  $t = 0$ . Luego, esta configuración es muy cercana al estado de saturación. Se sigue la evolución temporal de esta colonia calculando: i) el número promedio de sitios desocupados  $N(t)$ ; ii) la probabilidad de supervivencia de la colonia  $P(t)$ ; y iii) la distancia cuadrática media promedio  $R^2(t)$  sobre la cual la colonia se ha propagado.

En las figuras 3.17, 3.18 y 3.19 se muestran gráficos log-log de  $N(t)$ ,  $P(t)$  y  $R^2(t)$  versus  $t$  respectivamente, obtenidos sintonizando cuidadosamente el parámetro  $p_s$  alrededor de  $p_s^p$  y tomando  $p_r = 0.75$ . Se observa en las figuras que ocurren desviaciones hacia arriba y hacia abajo cuando el parámetro  $p_s$  se aparta levemente de  $p_s^p$ . Los exponentes críticos  $\eta_p$ ,  $\delta_p$  y  $z_p$  son obtenidos de las figuras 3.17, 3.18 y 3.19 respectivamente y listados en la tabla 3.4, en la cual también se incluyen los exponentes correspondientes a otros tres puntos críticos.



**Figura 3.17.** Gráfico log-log de  $N(t)$  vs  $t$  para distintos valores de  $p_s$ , y con  $p_r = 1.0$  constante, para la transición vida-saturación.  $\bullet$ ,  $p_s = 0.51$  (subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.502$  (crítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.47$  (supercrítico).



**Figura 3.18.** Gráfico log-log de  $P(t)$  vs  $t$  para distintos valores de  $p_s$ , y con  $p_r = 1.0$  constante, para la transición vida-saturación.  $\bullet$ ,  $p_s = 0.51$  (subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.502$  (crítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.47$  (supercrítico).

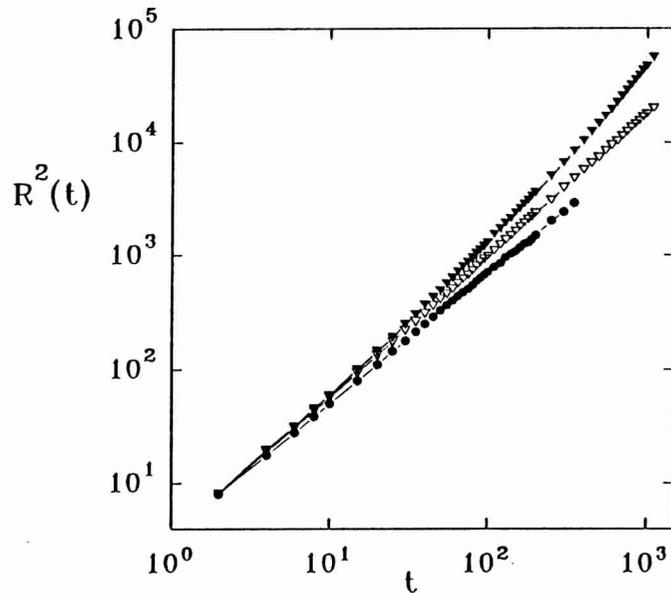


Figura 3.19. Gráfico log-log de  $R^2(t)$  vs  $t$  para distintos valores de  $p_s$  y con  $p_r = 1.0$  constante, para la transición vida-saturación.  $\bullet$ ,  $p_s = 0.56$  (subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.502$  (crítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.47$  (supercrítico).

Tabla 3.3 Puntos críticos y exponentes críticos correspondientes a la transición vida-muerte. Se indican además los exponentes correspondientes a DP en dimensión  $1 + 1$  [23]. El error estadístico se halla en el último decimal y es indicado entre paréntesis.

$p_r^c$	$p_s^c$	$\eta$	$\delta$	$z$
0.0	0.555 (2)	0.303 (5)	0.158 (3)	1.265 (5)
0.25	0.479 (1)	0.313 (2)	0.156 (2)	1.268 (5)
0.50	0.384 (2)	0.316 (2)	0.165 (2)	1.266 (5)
0.75	0.243 (2)	0.312 (2)	0.171 (2)	1.246 (5)
DP	$1 + 1$	0.317 (2)	0.162 (4)	1.282 (5)

Es muy interesante notar que los exponentes  $\eta$  y  $\eta_p$  obtenidos para todos los puntos críticos son prácticamente idénticos. Lo mismo ocurre para los exponentes  $\delta$  y  $\delta_p$ , y  $z$  y  $z_p$ . Este comportamiento contrasta completamente con el observado en el modelo anterior, en donde los exponentes correspondientes a diferentes puntos críticos eran distintos. La causa de esta diferencia reside

en el orden mismo de la transición (1<sup>ro</sup> o 2<sup>do</sup>). En un punto crítico de segundo orden las correlaciones espaciales divergen. Luego, estas correlaciones de largo alcance son capaces de borrar la dependencia con los detalles del modelo de las cantidades de interés, es decir, estos exponentes no dependerán de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$ .

**Tabla 3.4** Puntos críticos y exponentes críticos correspondientes a la transición vida-saturación. El error estadístico se halla en el último decimal y es indicado entre paréntesis.

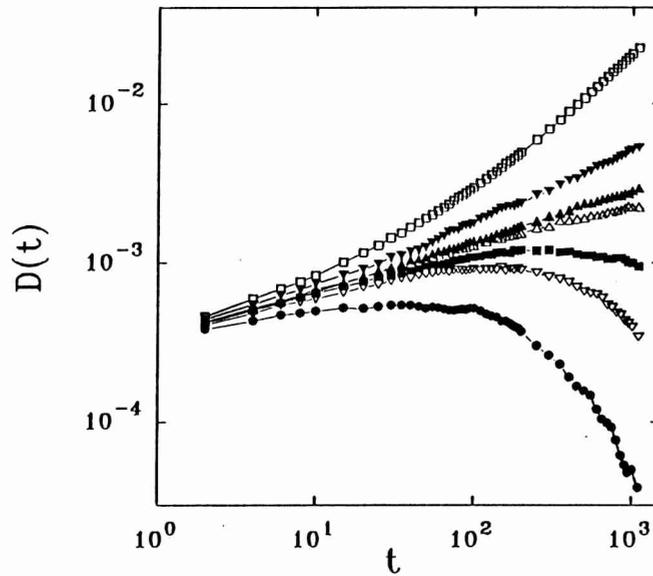
$p_r^p$	$p_s^p$	$\eta_p$	$\delta_p$	$z_p$
0.25	0.952 (2)	0.310 (3)	0.182 (3)	1.235 (5)
0.5	0.787 (2)	0.315 (2)	0.166 (2)	1.244 (5)
0.75	0.639 (2)	0.319 (2)	0.155 (2)	1.260 (5)
1.0	0.502 (2)	0.310 (3)	0.150 (3)	1.250 (5)

Se aprecia además que, mientras los exponentes calculados para el modelo 1JV estocástico son pequeños y positivos ( $\eta \approx 0.32$ ,  $\delta \approx 0.16$ ), los exponentes correspondientes al modelo 2JV estocástico son ambos de mayor módulo, siendo  $\eta$  siempre negativo. Esto revela que en el modelo 2JV estocástico la probabilidad de sobrevivir de una epidemia se halla enormemente reducida [128]. De esta manera se ha observado claramente cómo la técnica epidémica nos permite identificar el orden de una transición de fase irreversible.

Los exponentes obtenidos para las transiciones vida-muerte y vida-saturación están en excelente acuerdo con los correspondientes a percolación dirigida (DP) en dimensión 1+1, como se muestra en la tabla 3.3. Luego, la relación de escala expresada en la ecuación (3.18) es satisfecha con suficiente aproximación. Estos resultados corroboran la conjetura de Janssen [130], la cual establece que una transición continua a un estado absorbivo caracterizada por un parámetro de orden escalar, puede pertenecer a la clase de universalidad de la "Reggeon Field Theory" o equivalentemente de la DP.

Con el propósito de tener un entendimiento más profundo del comportamiento

del modelo 1JV estocástico, se analiza la estabilidad dinámica del mismo mediante la técnica del "Damage Spreading" [126]. A fin de ser claro, se repite aquí nuevamente la técnica.



**Figura 3.20.** Gráfico log-log de  $D(t)$  vs  $t$  para distintos valores de  $p_s$  y con  $p_r = 0.25$  constante, para la transición vida frozen - vida caótica.  $\bullet$ ,  $p_s = 0.50$  (subcrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.53$  (subcrítico);  $\blacksquare$ ,  $p_s = 0.54$  (subcrítico);  $\triangle$ ,  $p_s = 0.55$  (subcrítico);  $\blacktriangle$ ,  $p_s = 0.553$  (crítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.56$  (supercrítico);  $\square$ ,  $p_s = 0.60$  (supercrítico).

Una red unidimensional de tamaño  $L$  es ocupada aleatoriamente con probabilidad  $p = 0.50$ . Luego, se hace evolucionar el sistema hasta que se alcanza el estado estacionario. La configuración estacionaria es entonces replicada. Si el sitio central de la réplica situado en  $L/2$ , tiene algún vecino vivo, se lo daña (si su valor es uno lo cambio por cero o viceversa), y si no tiene ningún vecino ocupado, genero una nueva configuración estacionaria para repetir el procedimiento. Dado que para las regiones subcríticas el sistema evoluciona desde cualquier configuración inicial hacia los correspondientes estados absortivos, se cumple en dichas regiones que  $D(\infty) = 0$  independientemente del valor del

daño inicial. En consecuencia, las regiones subcríticas exhiben un comportamiento "frozen".

La figura 3.20 muestra un gráfico log-log del daño  $D(t)$  versus el tiempo  $t$  para diferentes valores de  $p_s$  y manteniendo  $p_r = 0.25$  constante. Se puede apreciar que para algunos valores de  $p_s$ , el número de sitios dañados tiende asintóticamente a cero  $D(t \rightarrow \infty) = 0$  (curvas decrecientes) y para otros valores  $p_s$ , el número de sitios dañados crece asintóticamente ( $D(t \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ , curvas crecientes). Luego, existe para algún valor particular  $p_s^d$  del parámetro  $p_s$  (recordemos que se está manteniendo  $p_r$  constante), una curva límite entre estos dos comportamientos, para la cual  $D(t)$  crece como  $t^{\eta_d}$ , donde  $\eta_d$  es un exponente a determinar. Es claro entonces que la recta observada en la figura 3.20 separa la región supercrítica en dos regiones de características diferentes: i)  $p_s \geq p_s^d$ , donde el comportamiento supercrítico es caótico ("vida caótica") y ii)  $p_s < p_s^d$ , donde el comportamiento supercrítico es frozen ("vida frozen"). Se concluye entonces que el este modelo presenta una transición de fase "vida caótica - vida frozen" siendo el exponente  $\eta_d$  uno de los que caracteriza esta transición. En la tabla 3.5 se listan los valores de  $\eta_d$  obtenidos en varios puntos críticos. Se observa que los valores de  $\eta_d$  en los diferentes puntos críticos son muy cercanos entre si y con los valores obtenidos para los exponentes  $\eta$  y  $\eta_p$ . Por lo tanto, la transición vida caótica - vida frozen es también una transición irreversible de segundo orden que pertenece a la clase de universalidad de la DP.

Con el propósito de corroborar tal afirmación, la figura 3.21 (figura 3.22) muestra un gráfico log-log de la probabilidad de sobrevida del daño  $P_d(t)$  (distancia cuadrática media  $R_d^2(t)$  de propagación del daño) versus  $t$  obtenido ajustando cuidadosamente el parámetro  $p_s$  alrededor de  $p_s^d$  y manteniendo  $p_r = 0.25$  constante. En ambas figuras se aprecia claramente un comportamiento supercrítico para  $p_s \geq p_s^d$  y un comportamiento subcrítico para  $p_s < p_s^d$ . Se calculan los exponentes críticos  $\delta_d$  y  $z_d$  a partir del comportamiento asintótico de  $P_d(t)$  y  $R_d^2(t)$  respectivamente, y sus valores son listados en la tabla 3.5.

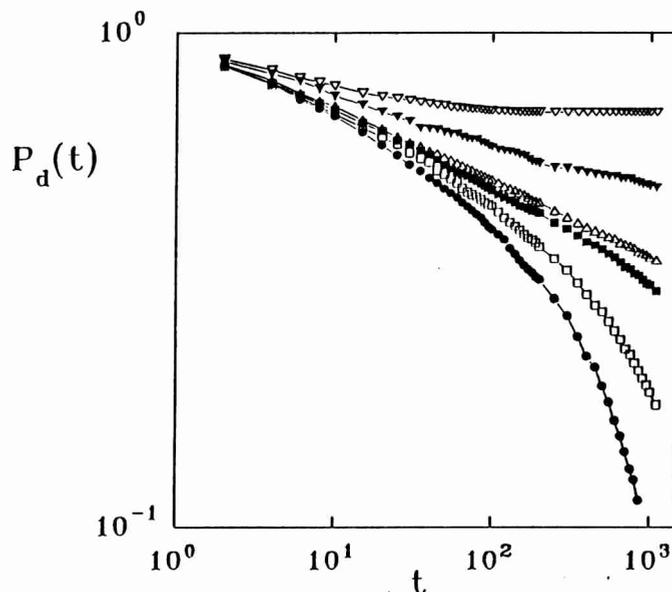


Figura 3.21. Gráfico log-log de  $P_d(t)$  vs  $t$  para distintos valores de  $p_s$  y con  $p_r = 0.25$  constante, para la transición vida frozen - vida caótica.  $\bullet$ ,  $p_s = 0.53$  (subcrítico);  $\square$ ,  $p_s = 0.54$  (subcrítico);  $\blacksquare$ ,  $p_s = 0.55$  (subcrítico);  $\triangle$ ,  $p_s = 0.553$  (crítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.56$  (supercrítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.60$  (supercrítico).

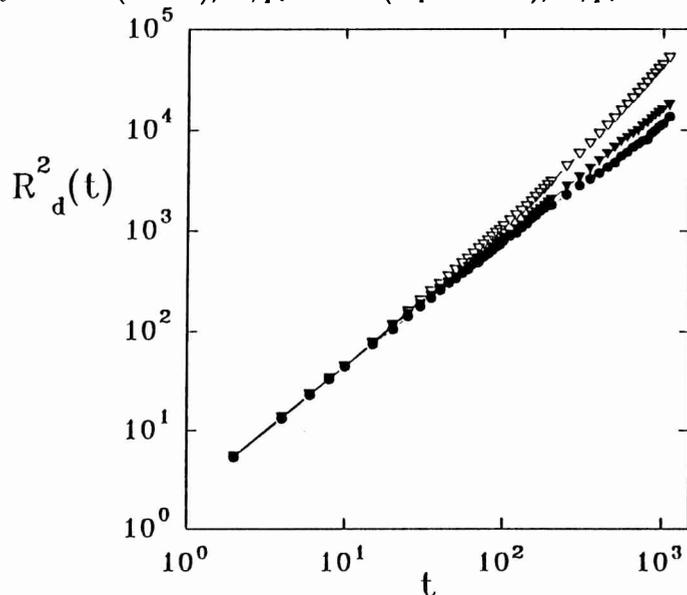
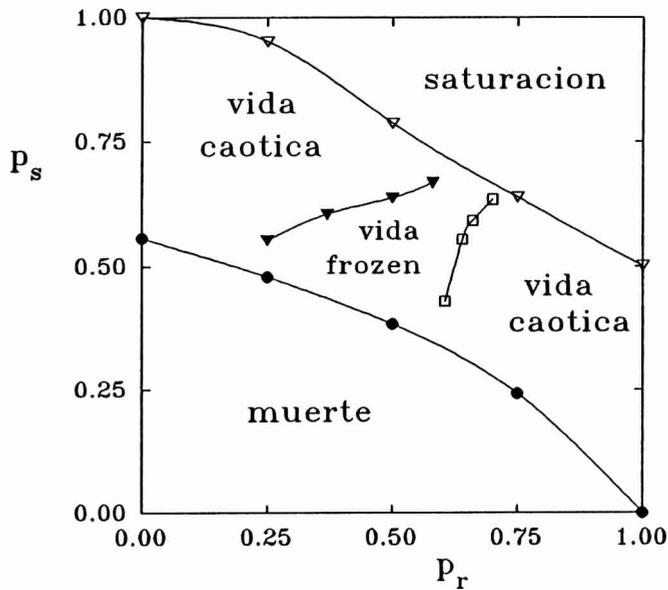


Figura 3.22. Gráfico log-log de  $R_d^2(t)$  vs  $t$  para distintos valores de  $p_s$  y con  $p_r = 0.25$  constante, para la transición vida frozen - vida caótica.  $\bullet$ ,  $p_s = 0.53$  (subcrítico);  $\blacktriangledown$ ,  $p_s = 0.553$  (crítico);  $\nabla$ ,  $p_s = 0.60$  (supercrítico).

**Tabla 3.5** Puntos críticos y exponentes críticos correspondientes a la transición vida frozen - vida caótica. El error estadístico se halla en el último decimal y es indicado entre paréntesis.

$p_r^d$	$p_s^d$	$\eta_d$	$\delta_d$	$z_d$
0.25	0.553 (2)	0.318 (2)	0.154 (2)	1.274 (5)
0.37	0.605 (2)	0.321 (3)	0.152 (3)	1.276 (5)
0.5	0.637 (2)	0.310 (2)	0.161 (2)	1.268 (5)
0.58	0.668 (2)	0.321 (3)	0.150 (3)	1.266 (5)
0.605 (2)	0.43	0.316 (2)	0.155 (2)	1.261 (5)
0.64	0.555 (2)	0.322 (3)	0.148 (3)	1.279 (5)
0.66	0.590 (2)	0.326 (5)	0.143 (5)	1.271 (5)
0.70	0.633 (2)	0.306 (5)	0.166 (3)	1.270 (5)



**Figura 3.23.** Gráfico de los puntos críticos  $p_r^d$ ,  $p_s^c$  y  $p_s^d$  versus  $p_r$ . Los puntos son los valores críticos determinados con suficiente exactitud. En este gráfico se aprecia cómo la región "viva" resulta dividida en tres fases.

Nuevamente se observa que los exponentes  $\delta_d$  y  $z_d$  son muy cercanos con  $\delta$ ,  $\delta_p$  y  $z$ ,  $z_p$  respectivamente.

Finalmente se debe notar que comenzando con diferentes valores de  $p_s$  se obtienen un conjunto de puntos críticos. Pero a diferencia de los casos anteriores, este conjunto de puntos críticos define dos curvas críticas,  $p_{r_1}^d(p_s)$  y  $p_{r_2}^d(p_s)$ . En la figura 3.23 se muestra el diagrama de fases completo. Además de las tres regiones originales en las que estaba dividido el plano  $\{p_r, p_s\}$  (saturación, vida y muerte), la vida está a su vez dividida en tres fases: i) una fase caótica (vida caótica) para  $p_r \geq p_{r_1}^d(p_s)$ ; ii) una fase frozen para  $p_{r_1}^d(p_s) < p_r < p_{r_2}^d(p_s)$ ; y iii) una nueva fase caótica (vida caótica) para  $p_r \geq p_{r_2}^d(p_s)$ .

### 3.4 Conclusiones

En el marco del estudio de las transiciones de fase irreversibles en sistemas dinámicos, se han estudiado dos modelos derivados de modelos autómatas celulares ("Juego de la Vida de J. Conway y el modelo de la vida unidimensional) en los que se han incorporado componentes estocásticas. En ambos modelos las componentes estocásticas son incorporadas adecuadamente mediante dos parámetros  $p_s$  y  $p_r$ , con  $0 \leq p_s, p_r \leq 1$ . Desde el punto de vista físico el estudio de estos modelos es de interés ya que contribuye a un entendimiento más profundo de los procesos dinámicos fuera del equilibrio.

En principio se analizó el comportamiento de un modelo bidimensional derivado del modelo de J. Conway. Este modelo presenta un estado absorbente de densidad asintótica nula ( $\rho_\infty = 0$ ) y diversos estados estacionarios con  $\rho_\infty \neq 0$ . Variando de manera adecuada los parámetros  $p_s$  y  $p_r$  es posible transitar desde la fase absorbente a la fase estacionaria. El salto abrupto que experimenta la densidad asintótica en la vecindad de un punto crítico indica que la transición vida-muerte es de primer orden. La caracterización completa de la transición es realizada mediante un análisis epidémico. Utilizando esta técnica es obtenido un conjunto de puntos críticos  $\{p_s^c, p_r^c\}$ , los cuales definen una curva crítica  $p_r^c(p_s)$  que separa ambas fases, como así también los exponentes críticos correspondientes a cada punto crítico. Los exponentes críticos hallados son diferentes en cada punto crítico. Esto es debido a

que en una transición de fase de primer orden, las correlaciones espaciales son siempre finitas, de manera que no existen fluctuaciones suficientemente extendidas que sean capaces de "borrar" la dependencia de las cantidades de interés con los detalles del modelo, es decir, que los exponentes críticos dependerán de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$ .

Un estudio de la estabilidad dinámica del modelo revela que la fase vida es caótica. El número de sitios dañados  $D(t)$  crece como  $t^\alpha$  hasta que alcanza un valor de saturación. Tanto el exponente  $\alpha$  como el valor de saturación del daño dependen solamente del valor de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$  y no del tamaño  $L$  de la red. Sin embargo el valor del exponente  $\alpha$  es poco sensible al cambio en los valores de los parámetros, mientras que éstos no tomen valores cercanos a los críticos. La distancia cuadrática media de propagación del daño  $R^2(t)$  presenta un comportamiento análogo a  $D(t)$  ya que crece como  $t^\beta$ , siendo  $\beta \approx 1$  a menos que los valores de  $p_s$  y  $p_r$  sean cercanos a los críticos. Finalmente, un análisis de las características estructurales de la región dañada, conduce a la conclusión que la región es compacta a menos que los valores de  $p_s$  y  $p_r$  sean cercanos a los críticos, para los cuales esta región sería de característica fractal.

Se estudió por último un modelo unidimensional derivado del modelo 1JV. Este modelo, a diferencia del anterior, presenta dos estados absortivos; un estado muerto con densidad asintótica nula ( $\rho_\infty = 0$ ) y un estado de saturación con densidad asintótica unidad ( $\rho_\infty = 1$ ), además de diversos estados estacionarios con  $0 < \rho_\infty < 1$ . Es posible entonces transitar desde la fase activa hacia cualquiera de los estados absortivos. Luego el modelo presenta en principio dos transiciones de fase irreversibles: vida-muerte y vida-saturación. La variación suave del parámetro del orden del modelo ( $\rho$ ) en la vecindad de los puntos críticos, indica que las transiciones irreversibles son de segundo orden. Un análisis epidémico permite determinar tanto los puntos críticos como los exponentes críticos correspondientes a ambas transiciones. Todos los exponentes críticos hallados están en excelente acuerdo con los correspondientes a la DP en dimensión  $1 + 1$ .

Se investigó además la estabilidad dinámica de este sistema mediante la técnica

de la propagación del daño. Este modelo, a pesar de su baja dimensionalidad, presenta un comportamiento dinámico mucho más complejo que el sistema anterior. Se determinaron dos curvas críticas de manera tal que la fase "vida" resulta dividida en tres regiones, dos caóticas y una frozen, de manera tal que variando de forma adecuada los parámetros  $p_r$  y  $p_s$ , es posible transitar desde la vida frozen hacia cualquiera de las regiones caóticas. Los puntos críticos hallados son todos puntos críticos de segundo orden, y los valores de los exponentes críticos están en muy buen acuerdo con los correspondientes a la DP en dimensión  $1 + 1$ . Estos resultados corroboran la conjetura de Jannsen [130], la cual establece que una transición continua a un estado absortivo caracterizada por un parámetro de orden escalar, puede pertenecer a la clase de universalidad de la "Reggeon Field Theory" o equivalentemente de la DP.



## Capítulo 4

### Conclusiones Generales

El estudio de estructuras desordenadas generadas por procesos aleatorios que son autosimilares sobre ciertas escalas de longitud, ha atraído la atención de la comunidad científica en los últimos años. Este tipo de estructuras son muy comunes en la naturaleza y pueden ser encontradas desde las más grandes a las más pequeñas escalas de longitud: en galaxias y paisajes, terremotos y fracturas, superficies rugosas e interfaces, etc.

Uno de los modelos prototipo de sistema desordenado, es el modelo de percolación. Con el propósito de estudiar el efecto de los defectos de tipo escalón sobre las propiedades adsorptivas de una superficie, se estudió el modelo de percolación en una geometría rectangular  $L \times M$ . El análisis de diversas cantidades de interés, como la función de distribución de largos de clusters a  $p_c$ , los perfiles de densidad y la función de correlación, ha permitido un entendimiento más profundo de este modelo. En particular, un excelente colapso de los datos para las redes de diferentes tamaños, se obtuvo en la función de distribución de largos a  $p_c$ , la cual fue ajustada mediante una función del tipo exponencial-exponencial. Un buen colapso de los datos es también logrado para los perfiles de densidad a  $p_c$  y a  $p > p_c$ . Sin embargo, no es obtenido un buen colapso para la función de correlación debido a la reducción en la conectividad causada cuando un clusters es seccionado por la superficie de la muestra. Un análisis más profundo de este efecto condujo al interesante

resultado que cada fila del cluster de percolación en la dirección  $M$  posee su propia dimensión fractal, y el "crossover" entre el comportamiento superficial y del masivo, es entendido en términos de una nueva hipótesis de escala muy general denominada "multiscaling".

Se estudió también el modelo de adsorción de dímeros calientes. Este modelo se fundamenta en recientes observaciones efectuadas con un microscopio de efecto túnel [70], que han mostrado que moléculas de  $O_2$  se quimisorben disociativamente sobre la superficie del Al(111), y que al menos parte de su exceso de energía, aparece como grados de libertad paralelos a la superficie, dando lugar a un movimiento traslacional durante el cual esta energía es disipada. Se calcula la dependencia del umbral de percolación con la distancia de vuelo de los monómeros  $R$ . La curva obtenida presenta un pico para  $R = 1$  en concordancia con el mínimo que se observa para el cubrimiento de saturación reportado para el mismo valor del parámetro  $R$  [82]. El mecanismo de adsorción de dímeros calientes introduce una longitud característica adicional ( $r_c = 2R + 1$ ) al modelo, la cual es reflejada en la estructura microscópica de los clusters de percolación para  $r < r_c$ . El estudio de la estructura macroscópica ( $r \gg r_c$ ), sitúa al modelo dentro de la misma clase de universalidad que la percolación standard. Se realizó un estudio de los efectos de borde característicos del mecanismo de deposición de dímeros calientes a partir del análisis de los perfiles de saturación y percolación. El estudio de los efectos de borde para los perfiles de saturación reveló que son bastante locales, ya que se propagan unas pocas unidades de red hacia el masivo. Sin embargo, los efectos de borde en los perfiles de percolación se propagan para todos los valores del parámetro  $R$  hasta el centro de la terraza. Esto es debido a que en el umbral de percolación cualquier perturbación se propaga en todo el sistema, ya que la longitud de correlación, que es la única longitud relevante, diverge en el punto crítico.

Se analizó luego el modelo de deposición de dímeros muy calientes. Este modelo se diferencia del modelo anterior en que los monómeros resultantes de la disociación sólo pueden ser detenidos por otro monómero ya depositado o por los bordes del sistema. El estudio de ciertas propiedades estructurales de los clusters de percolación

así generados, presentan algunas propiedades de interés tales como: la dimensión fractal del cluster de percolación es  $d_f = 2.00 \pm 0.01$  y la dimensión de su perímetro es  $d_h = 1.75 \pm 0.01$ . Estas características indican que el cluster de percolación es homogéneo aunque la dimensión de su perímetro coincide con la de un cluster de percolación estándar a  $p_c$ . Se investigaron las propiedades de transporte sobre los clusters de percolación generados con este mecanismo de deposición, mediante el método de un caminante aleatorio y con la técnica de la reacción de caminantes controlada por difusión. El exponente de difusión  $d_w$  y la dimensión espectral  $d_s$ , exhiben efectos de tamaño finito, y sus valores asintóticos en el límite termodinámico difieren tanto de los de percolación estándar como de los correspondientes a redes homogéneas. Se debe notar además que la conjetura de Alexander y Orbach [78]  $d_s d_w = 2d_f$ , la cual relaciona exponentes estáticos con exponentes dinámicos y es una excelente aproximación para muchos problemas concernientes a caminantes aleatorios, no se satisface en este modelo.

En el marco del estudio de las transiciones de fase irreversibles en sistemas dinámicos fueron propuestos y estudiados dos modelos. Estos modelos fueron derivados de dos modelos automátas celulares, el "Juego de la Vida" de J. Conway [107, 108] y el "Juego de la Vida" unidimensional [115], en los cuales se han introducido componentes estocásticas. Por esta razón, los modelos fueron denominados modelo "2JV estocástico" y modelo "1JV estocástico".

Un análisis del 2JV estocástico en función de sus parámetros  $p_s$  y  $p_r$ , revela la existencia de dos fases: una "fase viva" (activa) de densidad asintótica  $0 < \rho_\infty < 1$  y una "fase muerta" (absortiva) con densidad asintótica  $\rho_\infty = 0$  (ver figura 3.3). La variación abrupta de  $\rho_\infty$  en la vecindad de un punto crítico, indica que la transición irreversible es de primer orden. Debido a las fluctuaciones características presentes en el proceso estocástico cuando es estudiado sobre un sistema finito, resulta complicado efectuar una buena estimación de los puntos y exponentes críticos. Este inconveniente es evitado mediante un análisis epidémico. Los exponentes críticos hallados correspondientes a los diferentes puntos críticos son distintos. Esto es debido a que en un punto crítico de primer orden las correlaciones espaciales son todas

de rango finito, y en consecuencia, los exponentes críticos dependerán de los detalles del modelo, es decir, dependerán de sus parámetros. Luego se concluye que en una transición de fase de primer orden no existe universalidad. Un estudio de la estabilidad dinámica del sistema, reveló que la fase activa es caótica. La evolución temporal del daño presenta dos regiones: una región algebraica para  $t < \tau$  y una región de saturación para  $t > \tau$ , donde  $\tau$  es el tiempo de saturación. El comportamiento del daño en la región algebraica está dado por  $D(t) \propto t^\alpha$ , donde  $\alpha \approx 2$  a menos que los valores de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$  sean muy cercanos a los valores críticos, caso en el cual  $1.4 < \alpha < 2$ . Un excelente colapso de los datos obtenidos para el daño, correspondientes a distintas redes y para el mismo par de valores de los parámetros  $p_s$  y  $p_r$ , es logrado. Mediante el uso de argumentos de escala se concluye que el cluster de sitios dañados es homogéneo a menos que los valores de los parámetros sean muy cercanos a los críticos, caso en el cual dicho cluster sería de característica fractal.

Finalmente se estudió el modelo 1JV estocástico, el cual a pesar de su baja dimensionalidad presenta un comportamiento más complejo que el modelo 2JV estocástico. Un análisis del plano  $\{p_r, p_s\}$  reveló la existencia de tres fases: una fase viva (activa) de densidad asintótica  $0 < \rho_\infty < 1$ , una fase muerta (absortiva) de densidad asintótica  $\rho_\infty = 0$  y una fase saturada (absortiva) de densidad asintótica  $\rho_\infty = 1$ . Variando de forma adecuada los parámetros  $p_r$  y  $p_s$  es posible transitar desde la fase viva hacia la fase muerta o hacia la fase saturada (ver figura 3.13). Dada la suave variación del parámetro de orden en la vecindad de los puntos críticos, se concluye que ambas transiciones irreversibles, vida-muerte y vida-saturación, son de segundo orden. Con el propósito de calcular con suficiente exactitud los puntos y exponentes críticos de ambas transiciones, se efectuó un análisis epidémico. Los exponentes hallados en los distintos puntos críticos calculados para ambas transiciones, son iguales dentro del error producto de la simulación. Esta coincidencia en los exponentes críticos es debida a que en un punto de transición de fase de segundo orden las correlaciones espaciales divergen, de manera que los exponentes críticos resultan independientes de los detalles del modelo. Los valores hallados están en

excelente acuerdo con los valores  $\eta \approx 0.317$ ,  $\delta \approx 0.162$  y  $z \approx 1.282$  correspondientes a la percolación dirigida en dimensión  $1 + 1$ . Este comportamiento corrobora la conjetura de Janssen [130], la cual establece que una transición continua a un estado absortivo caracterizada por un parámetro de orden escalar, puede pertenecer a la clase de universalidad de la "Reggeon Field Theory" o equivalentemente de la DP. Con el propósito de analizar la estabilidad diámica del sistema, se efectuó un estudio de la propagación del daño. A partir de este análisis se concluyó que la fase viva está dividida en tres regiones, dos de las cuales son caóticas y una frozen, de forma tal que variando adecuadamente los parámetros  $p_r$  y  $p_s$ , es posible transitar desde la "vida frozen" hacia cualquiera de las regiones con "vida caótica" (ver figura 3.23). Estas transiciones vida frozen - vida caótica presentan nuevamente exponentes críticos idénticos a los correspondiente a la DP en dimensión  $1 + 1$  corroborandose así también en este caso la conjetura de Janssen [130]. Los resultados obtenidos muestran la equivalencia formal entre el modelo 1JV estocástico y otros problemas que surgen en diferentes disciplinas, como por ejemplo física de partículas [131, 132], percolación dirigida [122, 132], sistemas catalíticos irreversibles [133, 134], procesos por contacto de pares ("pair contact processes") [135], simulaciones de fuego en un bosque ("forest fire models") [136, 137], simulación de caminantes aleatorios que se reproducen y aniquilan ("branching annihilating random walkers") [138], etc.

En base a lo expuesto en este trabajo de tesis, se han publicado los siguientes artículos en revistas internacionales con referee:

- **Percolation on the square lattice in a  $L \times M$  geometry. Analysis of the percolation cluster properties.**

Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.

Z. Phys. B, **90**, 351, 1993.

- **Percolating cluster growth on stepped surfaces.**

Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.

J. of Phys.: Cond. Matt., **5**, A115, 1993.

- **Density profiles and correlation function of percolating clusters in finite strips.**  
Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.  
J. of Phys. A: Math. Gen., **26**, 3955, 1993.
- **Percolating properties of the random sequential adsorption of hot dimers.**  
Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.  
Physica A, **206**, 289, 1994.
- **Multiscaling behavior in the crossover between surface and bulk critical exponents for percolation in two dimensions.**  
Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.  
Phys. Rev. E, **49**, 199, 1994.
- **Edge effects on the random sequential adsorption of hot dimers.**  
Autores: R. A. Monetti, E. V. Albano and V. D. Pereyra.  
J. Chem Phys., **100**, 5378, 1994.
- **Deposition of very hot dimers. Study of a growth model at the percolation threshold.**  
Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.  
Chaos Solitons and Fractals (1995) at press.
- **Study of transport properties on percolating cluster growth upon very hot dimer deposition.**  
Autores: R. A. Monetti and E. V. Albano.  
Physica A (1995), at press.

## Referencias

1. B. B. Mandelbrot: *Fractals: Form, Chance and Dimension*, (Freeman, San Francisco, 1977); *The Fractal Geometry of Nature*, (Freeman, San Francisco, 1982).
2. Proc. Sixth Trieste Int. Symp. on Fractal Physics: ed. por L. Pietronero, E. Tosatti, (North Holland, Amsterdam, 1986).
3. *On Growth and Form*: ed. por H. E. Stanley, N. Ostrowsky (M. Nijhoff, Dordrecht, 1986).
4. *Fractals and Disordered Systems*: ed. por A. Bunde, S. Havlin, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1991).
5. R. M. Brady, R. C. Ball: *Nature* **309**, 225, (1984).
6. E. Ben-Jacob, R. Godbey, N. D. Goldenfeld, J. Koplik, H. Levine, T. Mueller, L. M. Sander: *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1315, (1985); E. Ben-Jacob, P. Garik: *Nature* **343**, 523, (1990); J. S. Langer: *Science* **243**, 1150, (1989); A. Buka, J. Kertesz, T. Vicsek: *Nature* **323**, 424, (1986).
7. J. Nittmann, H. E. Stanley: *Nature* **321**, 663, (1986).
8. J. Nittmann, H. E. Stanley: *J. Phys. A* **20**, L981, (1987).
9. J. Nittmann, H. E. Stanley: *J. Phys. A* **20**, L1185, (1987); ver también F. Family, D. Platt, T. Vicsek: *J. Phys. A* **20**, L1177, (1987).
10. L. Niemeyer, L. Pietronero, H. J. Weismann: *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1033, (1984).
11. M. Matsushita, H. Fujikawa: *Physica A* **168**, 498, (1990).
12. G. Daccord: *Phys. Rev. Lett.* **58**, 479, (1987); G. Daccord, L. Lenormand: *Nature* **325**, 41, (1987).
13. A. D. Fowler, H. E. Stanley, G. Daccord: *Nature* **341**, 134, (1989).

14. H. E. Stanley: *Bull. Am. Phys. Soc.* **34**, 716, (1989); F. Caserta, H. E. Stanley, W. Eldred, G. Daccord, R. E. Hausman, J. Nittmann: *Phys. Rev. Lett.* **64**, 95, (1990).
15. D. Kleinfeld, F. Raccuia-Behling, G. E. Blonder: *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3064, (1990).
16. P. J. Flory: *Principles of Polymer Chemistry*, (Cornell University, New York 1971); P. J. Flory: *J. Am. Chem. Soc.* **63**, 3083, 3091, 3096, (1941); W. H. Stockmayer: *J. Chem. Phys.* **11**, 45, (1943).
17. S. R. Broadbent, J. M. Hammersley: *Proc. Cam. Phil. Soc.* **53**, 629, (1957).
18. C. Domb in: *Percolation Structures and Processes*, ed. por G. Deutscher, R. Zallen, J. Adler, (Adam Hilger, Bristol 1983); C. Domb, E. Stoll, T. Schneider: *Contemp. Phys.* **21**, 577, (1980).
19. S. K. Ma: *Modern Theory of Critical Phenomena*, (Benjamin, Reading 1976).
20. G. Jones, M. Goldsmith: *Programming in OCCAM 2*, ed. por C. A. R. Hoare, (Prentice Hall, New York 1988).
21. D. Stauffer: *Phys. Rep.* **54**, 1, (1979).
22. D. Stauffer, A. Coniglio, A. Adam: *Adv. Polymer Sci.* **44**, 103, (1982).
23. D. Stauffer, A. Aharony: *Introduction to Percolation Theory*, (Taylor & Francis, London 1992).
24. H. J. Herrmann: *Phys. Rep.* **136**, 143, (1986).
25. A. Aharony in: *Percolation*, ed. por G. Grinstein, G. Mazenko, (World Scientific, Singapore 1986).
26. J. Feders in: *Fractals*, (Plenum Press, New York 1988).
27. B. Derrida, J. Vannimenus: *J. Phys. (Paris)* **41**, L473, (1980).

28. B. Derrida, L. De Seze: *J. Phys. (Paris)* **43**, 475, (1982).
29. P. Nightingale: *J. Appl. Phys.* **53**, 7927, (1982).
30. J. M. Normand, H. J. Heermann, M. Hajjar: *J. Stat. Phys.* **52**, 441, (1988).
31. P. M. Lam: *J. Stat. Phys.* **54**, 1081, (1989).
32. E. V. Albano, K. Binder, D. W. Heermann, W. Paul: *Z. Phys. B* **77**, 445, (1989).
33. E. V. Albano, K. Binder, D. W. Heermann, W. Paul: *Surf. Sci.* **223**, 151, (1989).
34. E. V. Albano, K. Binder, D. W. Heermann, W. Paul: *J. Chem. Phys.* **91**, 3700, (1989).
35. R. A. Monetti, E. V. Albano: *Z. Phys. B* **82**, 129, (1991).
36. H. Wagner in: *Physical and Chemical Properties of the stepped surfaces*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 85, ed. por G. Höhler, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 1979).
37. M. P. M. den Nijs: *J. Phys. A* **12**, 1857, (1979).
38. B. Nienhuis: *J. Phys. A* **15**, 199, (1982).
39. P. N. Strensky, R. M. Bradley, J. M. Debierre: *Phys Rev. Lett.* **66**, 133, (1991).
40. J. W. Essam: *Rep. Prog. Phys.* **43**, 843, (1980).
41. S. Kirkpatrick in: *Le Houches Summer School on Condensed Matter*, ed. por R. Maynard, G. Toulouse, (North Holland, Amsterdam 1979).
42. H. E. Stanley: *J. Phys. A* **10**, L211, (1977).
43. R. J. Harrison, G. H. Bishop, G. D. Quinn: *J. Stat. Phys.* **19**, 53, (1978).
44. A. U. Neumann, S. Havlin: *J. Stat. Phys.* **52**, 203, (1988).

45. R. de Arcangelis, S Redner, A. Coniglio: Phys. Rev. B **31**, 4725, (1986); **34**, 4656, (1986).
46. T. L. Halsey, P. Meakin, I. Procaccia: Phys. Rev. Lett. **56**, 854, (1986).
47. C. Amitrano, A. Coniglio, F. di Liberto: Phys. Rev. Lett. **57**, 1016, (1986).
48. S. Havlin, J. Kiefer, F. Leyvraz, G. H. Weiss: J. Stat. Phys. **47**, 173, (1987).
49. P. Meakin, S. Havlin: Phys. Rev. A **36**, 4428, (1987).
50. K. Binder in: *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems*, ed. por V. Privman, (World Scientific, Singapore 1990).
51. R. A. Monetti, E. V. Albano: Z. Phys. B **90**, 351, (1993).
52. J. L. Cardy: J. Phys. A (Math. Gen.) **17**, L385, (1984); in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. por C. Domb, J. L. Lebowitz, (Academic, New York 1987).
53. B. P. Watson: Phys. Rev. B **33**, 6446, (1986).
54. K. De'Bell: J. Phys. C **13**, 3809, (1980).
55. K. De'Bell, J. W. Essam: J. Phys. C **13**, 4811, (1980).
56. A. Christou, R. B. Stinchcombe: J. Phys. A **19**, 757, (1986).
57. K. De'Bell, T. Lookman: Phys. Rev. B **34**, 4812, (1986).
58. K. Binder in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, Pag. 1, ed. por C. Domb, J. L. Lebowitz, (Academic, New York 1983).
59. A. Coniglio, M. Zanetti: Physica D **38**, 37, (1989).
60. H. J. Heermann: Physica A **168**, 516, (1990).
61. M. Plischke, Z. Racz: Phys. Rev. Lett. **53**, 415, (1984).
62. J. Evans: Rev. Mod. Phys. **65** (4), 1281, (1993).

63. A. Bunde, H. Harder, W. Dietrich: *Solid State Ionics* **18/19**, 156, (1986).
64. J. W. Evans, D. E. Sanders: *Phys. Rev B* **39**, 1587, (1989), ref. [27].
65. D. A. King, M. G. Wells: *Proc. Roy. Soc. (London) A* **339**, 245, (1974).
66. N. P. Wolf, D. R. Burgess, D. K. Hoffman: *Surf. Sci.* **100**, 453, (1980).
67. J. Harris, B. Kasemo: *Surf. Sci.* **105**, L281, (1981); J. Harris, E. Törnqvist: *Surf. Sci.* **105**, L288, (1981).
68. S. L. Chang, P. A. Thiel: *Phys. Rev. Lett.* **59**, 296, (1987).
69. S. L. Chang, D. E. Sanders, J. W. Evans, P. A. Thiel in: *Structure of Surfaces II*, ed. por J. F. van der Veen, M. A. van Hove, (Springer-Verlag, Berlin 1988).
70. H. Brune, J. Winterlin, R. J. Behm, G. Ertl: *Phys Rev. Lett.* **68**, 624, (1992).
71. V. Privman, P. Nielaba: *Europhys. Lett.* **18**, 673, (1992).
72. P. Nielaba, V. Privman: *Mod. Phys. Lett.* **6**, 533, (1992).
73. V. Privman, M. Barma: *J. Chem. Phys.* **97**, 6714, (1992).
74. P. Zeppenfeld, S. Horch, G. Comsa: *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1259, (1994).
75. P. Weiss, D. M. Eigler: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2240, (1992); J. Tully: *Surf. Sci.* **111**, 461, (1981); *Farad. Discuss. Chem. Soc.* **80**, 300, (1985).
76. H. Brune, J. Winterlin, J. Trost, G. Ertl, J. Wieckers, R. J. Behm: *J. Chem. Phys.* **99**, 2128, (1993).
77. Y. Gefen, A. Aharony, S. Alexander: *Phys Rev. Lett.* **50**, 77, (1983); C. Amitrano, A. Bunde, H. E. Stanley: *J. Phys. A (Math. Gen.)* **18**, L923, (1985).
78. S. Alexander, R. Orbach: *J. Phys. Lett. (France)* **43**, L625, (1982).
79. R. Rammal, G. Toulouse: *J. Phys. Lett. (France)* **44**, L13, (1983).

80. D. Ben-Avraham, S. Havlin: *J. Phys. A* **15**, L691, (1982); S. Havlin, D. Ben-Avraham, H. Sompolinsky: *Phys. Rev. A* **27**, 1730, (1983).
81. E. V. Albano, H. Martin: *Appl. Phys. A* **47**, 399, (1988).
82. E. V. Albano, V. Pereyra: *J. Chem. Phys.* **98**, 1044, (1993).
83. H. Martin, E. V. Albano, A. Maltz: *J. Phys. A* **20**, 1531, (1987).
84. R. Ziff: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2670, (1992).
85. K. Wandelt, J. Hulse, J. Küpers: *Surf. Sci.* **104**, 212, (1981).
86. R. Miranda, S. Daiser, K. Wandelt, G. Ertl: *Surf. Sci.* **131**, 61, (1983).
87. H. Saddiqi, X. Guo, I. Chorkendorff, J. Yates Jr.: *Surf. Sci.* **191**, L813, (1987).
88. J. Terrel, R. S. Nord: *Phys. Rev. A* **46**, 5620, (1992).
89. H. J. Elmers, J. Hauschild, H. Höche, U. Gradman: *Phys. Rev. Lett.* **73**, 898, (1994).
90. D. Dhar: *J. Math. Phys.* **18**, 577, (1977).
91. H. Larralde, P. Trunfio, S. Havlin, H. E. Stanley, G. H. Weiss: *Phys. Rev. A* **45**, 7128, (1992).
92. B. Chopard, P. Luthi, M. Droz: *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1384, (1994).
93. B. Chopard, H. J. Herrmann, T. Vicsek: *Nature* **353**, (1991).
94. R. Ziff, K. Fichtorn, E. Gulari: *J. Phys. A (Math. & Gen.)* **24**, 3227, (1991); J. Mai, W. von Niessen: *J. Chem. Phys.* **98**, 2032, (1993); *Chem. Phys.* **165**, 57, (1992).
95. H. Gerola, P. Seiden: *Astrophys. J.* **223**, 129, (1978).
96. P. F. Schewe: *Galaxies, the Game of Life and Percolation*, in *Physics News*, Amer. Inst. Phys. Pub. R-302, 61, (1981).
97. G. Ódor, G. Szabó: *Phys. Rev. E* **49**, R3555, (1994).

98. J. S. Langer: *Rev. Mod. Phys.* **52**, 1, (1980).
99. B. Derrida, L. Peletti: *Bull. Math. Biol.* **53**, 355, (1991).
100. S. Franz, L. Peletti, M. Sellitto: *J. Phys. A (Math. & Gen.)* **26**, L1195, (1993).
101. M. Kaufman, D. Stauffer: *J. Stat. Phys.* **73**, 843, (1993).
102. L. Peletti in: *Disordered Systems and Biological Models*. Proceedings Bogotá 1987. (World Scientific, Singapore 1989).
103. L. Peletti in: *Towards a Statistical Mechanics of Biological Evolution*. Physics World, pag. 24, Marzo 1994.
104. N. Boccara, O. Roblin, M. Roger: *Phys Rev. E* **50**, 4531, (1994).
105. G. Y. Vichmac: *Physica D* **10**, 96, (1984).
106. H. J. Herrmann: *J. Stat. Phys.* **45**, 145, (1986); J. G. Zabolitzky, H. J. Herrmann: *J. Comp. Phys.* **76**, 426, (1988).
107. E. R. Berlekamp, J. H. Conway, R. K. Guy in: *Winning Ways for your Mathematical Plays*. Cap. 25, Vol 2, (Academic, New York 1982)
108. M. Gardner in: *Mathematical Games*. *Sci. Amer.* **223** (4), 120, (1970).
109. L. S. Schulman, P. E. Seiden: *J. Stat. Phys.* **19**, 293, (1978).
110. P. Bak, K. Chen, M. Creutz: *Nature* **342**, 780, (1989).
111. C. Bennet, M. Bourzutschky: *Nature* **350**, 468, (1991).
112. J. B. C. García, M. A. I. Gomez, T. I. Jyh, T. I. Ren, T. R. M. Sales: *Phys. Rev. E* **48**, 3345, (1993).
113. J. Hemmingsson: Consistent results on Life, 1993, preprint.
114. P. Alstrøm, J. Leão *Phys. Rev. E* **49**, R2507, (1994).
115. J. K. Millen: *BYTE* **3** (12), 68, (1978); P. Macaluso: *BYTE* **6** (7), 326, (1981).

116. T. Witten, L. M. Sander: *Phys. Rev. Lett.* **47**, 1400, (1981).
117. P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld: *Phys. Rev. Lett.* **59**, 382, (1987).
118. R. Burridge, L. Knopoff: *Bull. Seismol. Soc. Am.* **57**, 341, (1967); P. Bak, C. Tang: *J. Geophys. Res.* **94**, 15 365, (1989); Z. Olami, H. J. S. Feder, K. Christensen: *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1244, (1992).
119. P. Bak, K. Sneppen: *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4083, (1993).
120. R. L. Leheny, S. R. Nagel: *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1470, (1993).
121. K. Sneppen: *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3539, (1992).
122. P. Grassberger, A. De La Torre: *Ann. Phys. (N. Y.)* **122**, 373, (1979).
123. S. A. Kauffman: *J. Theor. Biol.* **22**, 437, (1969); B. Derrida, Y. Pomeau: *Europhys. Lett.* **1**, 45, (1986); B. Derrida, G. Weisbuch: *J. Phys. (Paris)* **47**, 1297, (1986), B. Derrida, D. Stauffer: *Europhys. Lett.* **2**, 739, (1986).
124. L. de Arcangelis: *J. Phys. A* **20**, L369, (1987).
125. E. V. Albano: *Phys Rev E* **50**, 1129, (1994).
126. H. Stanley, D. Stauffer, J. Kertész, H. J. Herrmann: *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2326, (1987).
127. T. R. M. Sales: *J. Phys. A (Math. & Gen.)* **26**, 6187, (1993).
128. J. Evans, M. S. Miesch: *Phys. Rev. Lett.* **66**, 833, (1991).
129. J. Evans, T. R. Ray: *Phys. Rev. E* **50**, 4302, (1994).
130. H. K. Jannsen: *Z. Phys. B* **42**, 151, (1981).
131. M. Moshe: *Phys. Rep.* **37 C**, 255, (1978).
132. P. Grassberger: *J. Phys A (Math. & Gen.)* **22**, 3673, (1989).
133. R. Ziff, E. Gulari, Y. Barshad: *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2553, (1986).
134. I. Jensen, H. Fogedby, R. Dickman: *Phys. Rev. A* **41**, R3411, (1990).
135. I. Jensen: *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1465, (1993).

136. E. V. Albano: *J. Phys A (Math. & Gen.)* **27**, L881, (1994).
137. E. V. Albano: *Physica A*, (1995), en prensa.
138. H. Takayasu, A. Yu. Tretyakov: *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3060, (1992).

**Agradecimientos:** Deseo agradecer a la Comisión de Investigaciones Científicas de la Provincia de Buenos Aires (C.I.C.) y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (C.O.N.I.C.E.T.) por las becas otorgadas, sin las cuales la realización de éste trabajo no hubiera sido posible. Además quiero agradecer a la Alexander von Humboldt Foundation, a la Fundación Antorchas y a la Volkswagen Foundation por proveer a nuestro grupo de investigación del valioso equipamiento necesario para efectuar las simulaciones.