



FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA Y FÍSICA

TRABAJO ESPECIAL DE LICENCIATURA EN FÍSICA

---

# Problema de difusión en medios aleatorios: Aproximación de medio efectivo en una red 2-D con desorden

---

*Autor:* Pedro A. Pury

*Director:* Dr. Domingo P. Prato

8 de Agosto de 1986



Problema de difusión en medios aleatorios: aproximación de medio efectivo en una red 2-D con desorden. Por Pedro A. Pury. Se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International

LICENCIATURA EN FISICA

**Título:** PROBLEMA DE DIFUSION EN MEDIOS  
ALEATORIOS. APROXIMACION DE MEDIO  
EFECTIVO EN UNA RED 2-D CON DESORDEN

**Autor:** PEDRO ANGEL PURY

**Director:** Dr. DOMINGO PEDRO PRATO

**Grupo:** TEORIA DE LA MATERIA CONDENSADA

**Año:** 1986

A mis padres

## AGRADECIMIENTOS

Deseo agradecer al Dr. Domingo Pedro Prato la dirección del presente trabajo. Su dedicación y calidad docente contribuyeron en gran medida a su realización.

Además expreso mi gratitud al equipo humano del Grupo de Teoría de la Materia Condensada por su colaboración y estímulo. Y en particular a los Lic. Francisco (Pancho) Tamarit y Pablo Serra que prestaron una paciente ayuda en el mecanografiado e impresión de este trabajo.

## INDICE

Agradecimientos . . . . .	III
CAPITULO:	
I. INTRODUCCION . . . . .	1
II. DIFUSION EN UNA RED UNIDIMENSIONAL . . . . .	5
La Ecuación Maestra . . . . .	5
El Estado Estacionario del Modelo Periódico . . . . .	6
Velocidad y Constante de Difusión . . . . .	15
Red Unidimensional Uniforme y Problema de una Impureza . . . . .	17
Sistema Desordenado y Aproximación de Medio Efectivo . . . . .	18
III. APROXIMACION DE MEDIO EFECTIVO EN UNA RED n-D . . . . .	21
Ecuación Maestra en n-D . . . . .	21
Problema de una Impureza . . . . .	22
Aproximación de Medio Efectivo . . . . .	25
IV. FUNCION DE GREEN Y APROXIMACION DE MEDIO EFECTIVO EN UNA RED BIDIMENSIONAL . . . . .	27
Ecuación Maestra en 2-D . . . . .	27
Densidad de Modos de Relajación . . . . .	29
Función de Green de la Red Uniforme . . . . .	32
Aproximación de Medio Efectivo . . . . .	35
Ilustración Numérica . . . . .	41
V. CONCLUSIONES . . . . .	50
APENDICE . . . . .	51
REFERENCIAS . . . . .	57

## CAPITULO 1

## INTRODUCCION

La existencia de simetría traslacional en muchos sistemas físicos es de crucial importancia para facilitar el cálculo de las cantidades físicas de interés en el problema. A menudo sin embargo interesa estudiar las propiedades de sistemas físicos que no poseen simetría traslacional. Muchos materiales que se encuentran en la naturaleza tienen en algún grado esta clase de desorden. En algunos casos este desorden puede considerarse como una perturbación débil de un sistema perfectamente ordenado. Sin embargo, existen muchos sistemas en los cuales el desorden es una de las propiedades importantes que los caracteriza.

El problema de difusión en sistemas desordenados aparece al tratar de explicar las propiedades de transporte en conductores desordenados usando la teoría clásica de difusión. El transporte de entes físicos como electrones y fonones en medios desordenados es afectado en gran medida por la naturaleza de la aleatoriedad. Si el grado de aleatoriedad es suficientemente grande, las funciones de onda electrónicas se localizan en pequeñas regiones en el sentido descrito por Anderson<sup>1</sup> y el transporte de electrones tiene lugar a través de saltos (hopping) entre los estados localizados con la asistencia de otros grados de libertad. La probabilidad de salto entre dos centros localizados depende de varios parámetros físicos asociados con estos centros, especialmente de la distancia espacial entre los centros y la diferencia de energía entre los estados inicial y final. Estos parámetros fluctúan de un centro a otro debido al desorden del medio. Dado que el salto es asistido por otros grados de libertad también como por las fluctuaciones del medio, las probabilidades de transición entre sitios resultan variables aleatorias.

El modelo que consideraremos será el de una partícula que describe una caminata aleatoria (random walk) en una red o arreglo de sitios fijos. Matemáticamente describimos al sistema por una ecuación maestra:

$$\frac{d}{dt} P(t) = HP(t) \quad (I.1)$$

donde  $P(t)$  es un vector cuyas componentes representan respectivamente la probabilidad de encontrar la partícula en cada sitio de la red en el instante  $t$ , y  $H$  es una matriz cuyos elementos representan la probabilidad de transición entre dos sitios de la red. En nuestro modelo las componentes de  $H$  serán variables aleatorias independientes afectadas por una misma distribución de probabilidad (común a todas ellas), que caracteriza la aleatoriedad del medio. La conexión entre el problema físico de transporte en un medio estocástico y el modelo propuesto se realiza asociando a cada componente de  $P(t)$  con la densidad de portadores (que intervienen en la conducción) en el respectivo sitio de red. En el presente trabajo nos restringiremos a la discusión del caso en el cual el conjunto de sitios forma una red regular, y la probabilidad de transición entre un par de sitios es nula a menos que los dos sitios sean vecinos más cercanos uno del otro en la red.

El conocimiento de  $P(t)$  para una dada condición inicial  $P(0)$  nos permite calcular muchas de las propiedades físicas del sistema. Por ejemplo la posición media y la posición cuadrática media de la partícula son:

$$\bar{X}(t) \equiv \sum_n n (P_n(t) - P_n(0)) \quad (1.2)$$

$$\bar{X}^2(t) \equiv \sum_n n^2 (P_n(t) - P_n(0)) \quad (1.3)$$

donde  $n$  es un índice que identifica cada sitio de red y la suma se lleva a cabo sobre todos los sitios, resultando así que la barra denota un promedio sobre la caminata aleatoria. Con estas cantidades podemos definir la velocidad  $V$  y la constante de difusión  $D$  según<sup>2</sup>:

$$V = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \bar{X}(t) \quad (1.4)$$

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \frac{1}{2} (\bar{X}^2(t) - (\bar{X}(t))^2) \quad (1.5)$$

Sea  $P(s)$  la transformada de Laplace de  $P(t)$ :

$$P(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} P(t) dt \quad (1.6)$$

Transformando (I.1) tenemos:

$$(s - H) P(s) = P^0 \quad (I.7)$$

con  $P^0 = P(t=0)$ . La inversa de la matriz  $(s-H)$  se conoce como la función de Green del problema:

$$G(s) = (s - H)^{-1} \quad (I.8)$$

y resulta entonces que:

$$P(s) = G(s) P^0 \quad (I.9)$$

En particular eligiendo:  $P_a^0 = \delta_{ab}$  resulta:

$$P_a(s) = G_{ab}(s) \quad (I.10)$$

Teniendo entonces que la componente  $G_{ab}$  de la función de Green es la transformada de Laplace de la probabilidad  $P_a(t)$  de encontrar la partícula en el sitio  $a$  de la red en el instante  $t$ , dado que en  $t=0$  se encontraba en el sitio  $b$ .

En el estudio de sistemas desordenados es difícil obtener expresiones analíticas para los promedios y la fluctuación alrededor de los valores medios. Muchas técnicas se han desarrollado para obtener resultados aproximados. Entre ellas consta la teoría de perturbaciones, la "replica trick", una variedad de métodos de renormalización y la aproximación de medio efectivo (EMA), o aproximación de potencial coherente (CPA) como es conocida en la Física del Estado Sólido. Esta última es la técnica de aproximación que emplearemos en el presente trabajo.

La aproximación de medio efectivo consiste en reemplazar el sistema desordenado por un sistema uniforme con una constante de



salto efectiva que depende de  $s$  (parámetro de Laplace). Por sistema uniforme entendemos a una caminata aleatoria con probabilidad de transición no nula sólo entre sitios vecinos más cercanos donde toma el mismo valor  $B^*$ . La constante de salto efectiva  $B^*$  es determinada de manera autoconsistente por la ecuación:

$$\langle G_{ab}^i \rangle = G_{ab}^u \quad (I.11)$$

donde  $a$  y  $b$  denotan dos sitios vecinos más cercanos en la red,  $G^u$  es la función de Green del sistema uniforme de constante  $B^*$ ,  $G^i$  es la función de Green de un sistema uniforme de constante  $B^*$  con una impureza de constante  $b$  ( $b \neq B^*$ ) entre los sitios  $a$  y  $b$ , y  $\langle \dots \rangle$  indica un promedio sobre  $b$  con la distribución de probabilidad que caracteriza la aleatoriedad del medio.

En el capítulo II describimos las generalidades de la ecuación maestra en una dimensión y estudiamos con algún detalle el estado estacionario de un modelo periódico. A manera de revisión rescatamos resultados de Derrida<sup>2</sup> y los correspondientes a una red uniforme y el problema con una impureza. Analizamos finalmente la aproximación de medio efectivo en una dimensión.

En el capítulo III examinamos el problema de una impureza en  $n$ -D y obtenemos una ecuación general para la aproximación de medio efectivo.

En el capítulo IV estudiamos el sistema uniforme bidimensional para el cual encontramos una expresión para la densidad de modos de relajación y expresiones para las componentes de la función de Green. A continuación analizamos la aproximación de medio efectivo en una y dos dimensiones para una distribución de probabilidad (que caracteriza la escocasticidad del medio) constante sobre un intervalo y obtenemos  $B^*$  como función del parámetro de Laplace  $s$ . Haciendo uso del Teorema Tauberiano se puede obtener información sobre el comportamiento asintótico de  $P_0(t)$  y la constante de difusión del sistema.

En el capítulo V, finalmente, resumimos los principales resultados obtenidos en el trabajo.

CAPITULO II  
DIFUSION EN UNA RED UNIDIMENSIONAL

La Ecuación Maestra

La ecuación maestra para un proceso estocástico unidimensional con rango discreto entero y tiempo continuo es:

$$\dot{p}_m(t) = \sum_n (W_{nm} p_n(t) - W_{mn} p_m(t)); m, n \in \mathbb{Z} \quad (\text{II.1})$$

donde  $p_n(t)$  es la probabilidad de hallar la partícula en el sitio  $n$  en el instante  $t$  y  $W_{mn}$  es la probabilidad de salto por unidad de tiempo del sitio  $n$  al  $m$ . Definiendo (Van Kampen pag. 106<sup>3</sup>):

$$H_{mn} = \begin{cases} W_{mn} & \text{si } m \neq n \\ -\sum_n W_{nm} & \text{si } m = n \end{cases} \quad (\text{II.2})$$

resulta:

$$H_{mn} \geq 0 \quad \text{si } m \neq n \quad (\text{II.3a})$$

$$\sum_n H_{mn} = 0 \quad (\text{II.3b})$$

Podemos entonces escribir:

$$\dot{\vec{p}}(t) = \mathbf{H} \vec{p}(t) \quad (\text{II.4a})$$

o bien matricialmente

$$\dot{\hat{P}}(t) = \mathbf{H} \hat{P}(t) \quad (\text{II.4b})$$

Considerando que sólo existe probabilidad de salto entre

sitios adyacentes, es decir:  $W_{mn} \neq 0$  sólo si  $m = n \pm 1$  y empleando la notación:

$$W_{m-1, m} = B_m, \quad W_{m+1, m} = C_m \quad (II.5)$$

tenemos en (II.1) que:

$$\dot{p}_m(t) = B_{m+1} p_{m+1}(t) + C_{m-1} p_{m-1}(t) - (B_m + C_m) p_m(t) \quad (II.6)$$

donde  $B_n$  es la probabilidad por unidad de tiempo, estando en el sitio  $n$ , de saltar al sitio  $n-1$ , y  $C_n$  es la correspondiente probabilidad por unidad de tiempo de saltar al sitio  $n+1$ .  $B_n, C_n \geq 0$ . Ver fig. II.a.

Consideremos ahora un modelo periódico de periodo  $N$ :

$$B_{m+N} = B_m, \quad C_{m+N} = C_m \quad (II.7)$$

De (II.6) y (II.7) resulta:

$$\dot{p}_{m+N} = B_{m+1} p_{m+N+1} + C_{m-1} p_{m+N-1} - (B_m + C_m) p_{m+N} \quad (II.8)$$

y de esta forma el problema se reduce a un problema de salto en un círculo de  $N$  sitios, quedando para  $H$  una matriz efectiva  $N \times N$ . Ver fig. II.b

### El Estado Estacionario del Modelo Periódico

En el límite de tiempo suficientemente grande esperamos que el sistema alcance un estado estacionario. De (II.3b) resulta que  $H$  tiene un autovector por izquierda con autovalor nulo:  $A = (1 \dots 1)$ . De aquí existe al menos un autovector por derecha  $D$  con el mismo autovalor:  $H \cdot D = 0$ .  $D$  es una solución independiente del tiempo de la ecuación maestra y cuando se normaliza representa una solución distribución de probabilidad estacionaria del

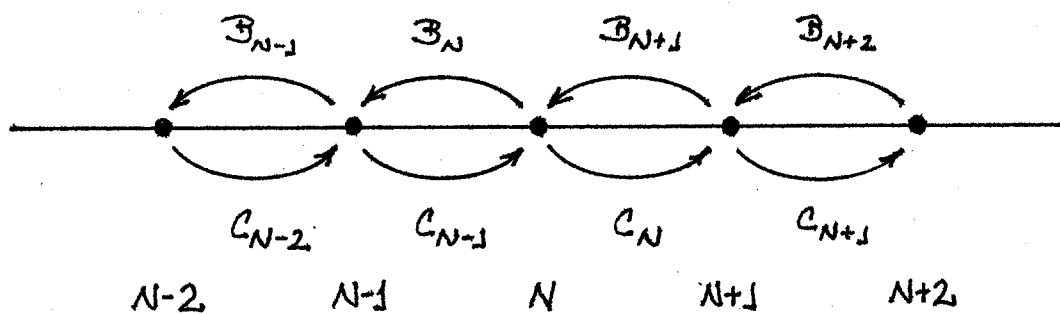


Figura II.a  
Definición de las constantes de salto  
para el problema unidimensional

$$H = \begin{pmatrix} -(B_1 + C_1) & B_2 & 0 & \dots & 0 & C_N \\ C_1 & -(B_2 + C_2) & B_3 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & C_2 & -(B_3 + C_3) & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -(B_{N-1} + C_{N-1}) & B_N \\ B_1 & 0 & 0 & \dots & C_{N-1} & -(B_N + C_N) \end{pmatrix}$$

Figura II.b  
Definición de la matriz H para  
un modelo periódico de período N

sistema. Van Kampen (Cap. V.3 pag. 110<sup>3</sup>) demostró que para todo sistema con un número finito de estados discretos cuya matriz  $H$  cumpla ciertas propiedades, las cuales quedan satisfechas en el caso periódico, no puede existir más de una solución estacionaria y todas las soluciones posibles para tiempos suficientemente grandes tienden a esta. Por lo tanto el autovalor nulo es único o no degenerado.

Podemos ver ahora que la parte real de los autovalores de  $H$  para el caso periódico es negativa (a excepción del autovalor nulo que es único). A tal fin consideremos la forma cuadrática:

$$F = \sum_{i,j=1}^N H_{ij} x_i x_j \quad (\text{II.9})$$

con  $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix}$ ,  $x_i \in \mathbb{R}$  y  $\vec{x} \cdot \vec{x} = \sum_{i=1}^N x_i^2 = 1$ .

$F$  se dice seminegativa si  $F \leq 0 \forall \vec{x}$ .  $F$  resulta definida seminegativa sii<sup>4</sup>:  $J_1 \leq 0$ ,  $J_2 \geq 0$ , ...,  $(-1)^N J_N \geq 0$ , donde:

$$J_n = \det \begin{pmatrix} H_{11} & \dots & H_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ H_{n1} & \dots & H_{nn} \end{pmatrix}$$

Esta condición es satisfecha de manera inmediata por una matriz como la detallada en la fig. II.b. Sea  $C$  la transformación que lleva  $H$  a su forma diagonal  $L$ :

$$H = C \cdot L \cdot C^{-1} \quad (\text{II.10})$$

$$L = \begin{pmatrix} l_1 & & 0 \\ & l_2 & \\ 0 & & \dots \\ & & & l_N \end{pmatrix}, \quad l_i = 0 \quad (\text{II.11})$$

Dado que  $F$  es un escalar frente a una transformación de similitud queda inalterado:

$$F = \sum_{i=1}^N l_i x_i^2 \leq 0 \quad (\text{II.12})$$

Ahora bien, si  $l$  es un autovalor de  $H$ , dado que  $H$  es real,  $l^*$

también es un autovalor. Por lo tanto tomando en (II.12) los coeficientes de un autovalor complejo y el de su complejo conjugado iguales resulta:

$$F = \sum_k \operatorname{Re}(l_k) x_k^2 + \sum_j l_j x_j^2 \leq 0 \quad (\text{II.13})$$

donde con subíndice  $k$  denotamos los autovalores complejos y con  $j$  los autovalores reales de  $H$ . Finalmente de la arbitrariedad de los  $x_i$  tenemos que:

$$\operatorname{Re}(l_k) \leq 0 \quad \text{y} \quad l_j < 0; \quad \forall k, j$$

Q.E.D.

Probamos a continuación que el estado estacionario de la ecuación maestra es independiente de las condiciones iniciales. De (II.4b):

$$P(t) = e^{Ht} P^0, \quad \text{con } P^0 = P(t=0) \quad (\text{II.14})$$

Usando (II.10):

$$P(t) = C e^{L^t} C^{-1} P^0 \quad (\text{II.14a})$$

o bien en componentes:

$$P_a(t) = \sum_{bc} C_{ab} e^{l_b t} C^{-1}_{bc} P_c^0 \quad (\text{II.14b})$$

y para tiempos suficientemente largos:

$$P_a(\infty) = \sum_c C_{ac} C^{-1}_{1c} P_c^0 \quad (\text{II.15})$$

donde hemos usado que la parte real de los autovalores  $l_b$  no nulos de  $H$  es negativa. Para obtener que  $P_a(\infty)$  es independiente de  $P^0$  será suficiente que  $C^{-1}_{1c}$  resulte independiente de  $c$ . De (II.10):

$$C^{-1}_{ab} H_{bc} = l_{ab} C^{-1}_{bc} = 0 \quad (II.16)$$

De (II.4b) resulta que  $C^{-1}_{ab} = C$  (=constante)  $\forall b$  es solución de (II.16). Por lo tanto:

$$P_a(\infty) = C_{ab} C \sum_c P_c^0 = C C_{ab} = P_a^e \quad (II.17)$$

donde  $P^e$  representa la solución estacionaria del sistema, y vemos así que  $s$  es independiente de  $P^0$ .

Q.E.D.

Introduzcamos ahora las cantidades<sup>2</sup>:

$$\bar{R}_m(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} P_{m+Nk}(t) \quad (II.18)$$

$$\bar{S}_m(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (m+Nk) P_{m+Nk}(t) \quad (II.19)$$

$\bar{R}_n(t)$  representa la probabilidad de que la partícula se encuentre en uno de los sitios  $n+Nk$  ( $k$  entero) en el instante  $t$ . El cociente  $\bar{S}_n(t)/\bar{R}_n(t)$  representa la posición media de la partícula cuando el promedio se restringe a los sitios  $n+Nk$  ( $k$  entero). De (II.18) y (II.19) se tiene inmediatamente que:

$$\bar{R}_{m+N}(t) = \bar{R}_m(t) \quad (II.20)$$

$$\bar{S}_{m+N}(t) = \bar{S}_m(t) \quad (II.21)$$

De (II.6) y (II.7) podemos obtener la evolución temporal de  $\bar{R}_n(t)$  y  $\bar{S}_n(t)$ :

$$\frac{d}{dt} \bar{R}_a = H_{ab} \bar{R}_b \quad (II.22)$$



$$\frac{d}{dt} \bar{Z}_a = H_{ab} \bar{Z}_b + Q_{ab} \bar{R}_b \quad (II.23)$$

con

$$Q_{ab} = (a-b) H_{ab} \quad (II.24)$$

Derrida<sup>2</sup> afirma que en el límite de tiempo suficientemente grande  $\bar{R}_n(t)$  y  $\bar{S}_n(t)$  poseen un comportamiento asintótico simple:

$$\text{Para } t \rightarrow \infty \left\{ \begin{array}{l} \bar{R}_n(t) \longrightarrow R_n \\ \bar{S}_n(t) \longrightarrow a_n t + T_n \end{array} \right. \quad (II.25)$$

$$(II.26)$$

donde  $R_n$ ,  $a_n$  y  $T_n$  no dependen del tiempo. Sin embargo dicho autor expresa<sup>2</sup> que no encontró una prueba simple para (II.25) y (II.26) aunque estos comportamientos parezcan razonables si excluimos el caso donde algunos  $W_i$  se anulan. En este caso se puede justificar (II.25) y (II.26) considerando el problema de salto en un círculo cerrado de  $N$  sitios, para el cual existe un estado estacionario dinámico con la partícula girando con velocidad constante.  $R_n$  es la probabilidad que la partícula esté en el sitio  $n$  en el estado estacionario, mientras que  $\bar{S}_n(t)$  está relacionado con el número medio de vueltas realizado por la partícula localizada en el sitio  $n$  en el instante  $t$ .

Debido a la importancia del comportamiento asintótico de  $\bar{R}_n(t)$  y  $\bar{S}_n(t)$  para obtener expresiones de la velocidad de la partícula y la constante de difusión daremos a continuación una demostración de (II.25) y (II.26). De (II.22) tenemos que:

$$\dot{\bar{R}}(t) = H \bar{R}(t) \quad (II.27)$$

es decir que  $\bar{R}(t)$  satisface una ecuación idéntica a (II.4b). Así la solución formal de (II.27) resulta:

$$\bar{R}(t) = e^{Ht} R^0 \text{ con } R^0 = R(t=0) \quad (II.28)$$

Ya hemos demostrado que las soluciones de la ecuación maestra

tienden a una solución estacionaria independiente de las condiciones iniciales. De (II.17) resulta:

$$\mathcal{R}_a(\infty) = C_a \mathcal{C} = \mathcal{R}_a \quad (\text{II.29})$$

que justifica (II.25). De (II.23) tenemos por otra parte que:

$$\dot{\bar{\mathcal{Z}}}(t) = H \bar{\mathcal{Z}}(t) + Q \bar{\mathcal{R}}(t) \quad (\text{II.30})$$

Usando (II.10) y (II.28):

$$\dot{\bar{\mathcal{Z}}} = C L C^{-1} \bar{\mathcal{Z}} + Q C e^{L t} C^{-1} \mathcal{R}^0 \quad (\text{II.31})$$

Definiendo:

$$A = C^{-1} \bar{\mathcal{Z}}, \quad B = C^{-1} Q C, \quad E = C^{-1} \mathcal{R}^0 \quad (\text{II.32})$$

resulta de (II.31) que:  $\dot{A} = L A + B \exp(Lt) E$ . Usando la convención de índices:

$$\begin{aligned} a, b, c &= 1, 2, \dots, N \\ i, j, k &= 2, 3, \dots, N \end{aligned}$$

podemos escribir:

$$\begin{aligned} \dot{A}_a &= l_a A_a + B_{a1} E_1 + \sum_i B_{ai} e^{l_i t} E_i \\ \dot{A}_1 &= B_{11} E_1 + \sum_i B_{1i} e^{l_i t} E_i \\ A_1 &= B_{11} E_1 t + \sum_i l_i^{-1} B_{1i} e^{l_i t} E_i + b_1, \quad b_1: \text{cte} \end{aligned} \quad (\text{II.33})$$

Si:  $A_j = \exp(l_j t) Z_j$  se tiene que:

$$\begin{aligned} \dot{A}_j &= l_j A_j + \dot{Z}_j e^{l_j t} \\ \dot{Z}_j &= B_{j1} E_1 e^{-l_j t} + B_{jj} E_j + \sum_{i \neq j} B_{ji} e^{(l_i - l_j)t} E_i \\ Z_j &= -l_j^{-1} B_{j1} E_1 e^{-l_j t} + B_{jj} E_j t + \\ &+ \sum_{i \neq j} (l_i - l_j)^{-1} B_{ji} e^{(l_i - l_j)t} E_i + b_j, \quad b_j = \text{cte} \end{aligned}$$

$$A_j = -l_j^{-1} B_{j1} E_1 + B_{jj} E_j t e^{l_j t} + b_j e^{l_j t} + \sum_{i \neq j} (l_i - l_j)^{-1} B_{ji} e^{l_i t} E_i \quad (II.34)$$

De (II.33) y (II.34):

$$t \rightarrow \infty \begin{cases} A_1 \rightarrow B_{11} E_1 t + b_1 \\ A_j \rightarrow -(l_j)^{-1} B_{j1} E_1 \end{cases} \quad (II.35)$$

De (II.32):  $\bar{B} = C A$

$$\bar{B}_a = C_{a1} A_1 + \sum_j C_{aj} A_j \quad (II.36)$$

Resulta por lo tanto que para

$$t \rightarrow \infty, \bar{B}_a \rightarrow C_{a1} (B_{11} E_1 t + b_1) - \sum_j l_j^{-1} C_{aj} B_{j1} E_1 \quad (II.37)$$

Dado que  $C^{-1}_{1c}$  es independiente de  $c$ , podemos elegir  $C^{-1}_{1c} = C = 1$  y de (II.29) resulta:  $C_{a1} = R_a$  y además:

$$E_1 = \sum_c C^{-1}_{1c} R_c^0 = J$$

$$B_{11} = \sum_{bc} Q_{cb} R_b$$

$$B_{j1} = \sum_{ab} C^{-1}_{ja} Q_{ab} R_b$$

Entonces en (II.37):

$$\bar{B}_a(\infty) = (R_a \sum_{bc} Q_{cb} R_b) t - \sum_{jbc} C_{aj} C^{-1}_{jc} Q_{cb} R_b l_j^{-1} + b_j R_a \quad (II.38)$$

Finalmente

tomando:

$$a_a = R_a \sum_{bc} Q_{cb} R_b \quad (II.39)$$

$$T_a = - \sum_{jbc} b_j^{-1} C_{aj} C_{jc}^{-1} Q_{cb} R_b + b_a R_a \quad (\text{II.40})$$

tenemos en (II.38) el comportamiento asintótico (II.26).

Q.E.D.

### Velocidad y Constante de Difusión

Sustituyendo en (II.22) y (II.23) a  $R_n(t)$  y  $S_n(t)$  por su comportamiento asintótico (II.25) y (II.26) encontramos las siguientes ecuaciones para  $R_n$ ,  $a_n$  y  $T_n$ :

$$0 = B_{m+1} R_{m+1} + C_{m-1} R_{m-1} - (B_m + C_m) R_m \quad (\text{II.41})$$

$$0 = B_{m+1} a_{m+1} + C_{m-1} a_{m-1} - (B_m + C_m) a_m \quad (\text{II.42})$$

$$a_m = B_{m+1} T_{m+1} + C_{m-1} T_{m-1} - (B_m + C_m) T_m - B_{m+1} R_{m+1} + C_{m-1} R_{m-1} \quad (\text{II.43})$$

De (II.20) y (II.21) resulta:

$$R_{m+N} = R_m \quad (\text{II.44})$$

$$a_{m+N} = a_m \quad (\text{II.45})$$

$$T_{m+N} = T_m \quad (\text{II.46})$$

Derrida<sup>2</sup> encuentra como solución a las relaciones de recurrencia (II.41) - (II.43) las siguientes expresiones:

$$R_m = C_a \pi_m \quad (\text{II.47})$$

donde

$$\pi_m = \frac{1}{C_m} \left( 1 + \sum_{i=1}^{N-1} \prod_{j=1}^i \frac{B_{m+j}}{C_{m+j}} \right) \quad (\text{II.48})$$

y  $C_1$  es una constante fijada por la normalización  $\sum_{m=1}^N R_m = 1$

$$a_m = A R_m \quad (11.49)$$

donde:

$$A = N \left( \sum_{n=1}^N \pi_n \right)^{-1} \left( 1 - \prod_{m=1}^N \frac{B_{m+1}}{C_m} \right) \quad (11.50)$$

$$T_m = - \left[ C_m \left( 1 - \prod_{i=1}^N \frac{B_{i+1}}{C_i} \right) \right]^{-1} \left( \psi_m + \sum_{i=1}^{N-1} \psi_{m+i} \prod_{j=1}^i \frac{B_{m+j}}{C_{m+j}} \right) \quad (11.51)$$

donde:

$$\psi_m = C_m R_m + \frac{A}{N} \sum_{i=1}^N i R_{m+i} + C_2 \quad (11.52)$$

y  $C_2$  es una constante arbitraria.

Con estos resultados y utilizando las definiciones (1.4) y (1.5) resultan para la velocidad y la constante de difusión las expresiones<sup>2</sup>:

$$V = A \quad (11.53)$$

$$D = \left( \sum_{i=1}^N \pi_i \right)^{-2} \left( A \sum_{n=1}^N u_n \sum_{i=1}^N i \pi_{n+i} + N \sum_{m=1}^N C_m u_m \pi_m \right) - A(N+2)/2 \quad (11.54)$$

donde:

$$u_m = C_m^{-1} \left( 1 + \sum_{i=1}^{N-1} \prod_{j=1}^i \frac{B_{m+j-j}}{C_{m-j}} \right) \quad (11.55)$$

Estas expresiones para  $V$  y  $D$  válida para un modelo periódico pueden aplicarse para el caso aleatorio tomando el límite  $N \rightarrow \infty$ , bajo la hipótesis de que los límites  $N \rightarrow \infty$  y  $t \rightarrow \infty$  conmutan. En este caso expresiones como:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \pi_m = \langle \pi_m \rangle \quad (11.56)$$

definen un promedio sobre la distribución de las constantes de salto. Derrida<sup>2</sup> en particular analiza el caso aleatorio asimétrico en el cual las variables aleatorias  $C_n$  y  $B_{n+1}$  pueden estar correlacionadas y encuentra que la velocidad y la constante de difusión son singulares en diferentes puntos.

#### Red Unidimensional Uniforme y Problema de una Impureza

En el caso simétrico tenemos que  $C_{n-1} = B_n$ ,  $\forall n$  por lo tanto (II.6) se reduce a:

$$\dot{p}_m = B_{m+1}(p_{m+1} - p_m) + B_m(p_{m-1} - p_m) \quad (\text{II.57})$$

Para una revisión del problema dinámico en sistemas unidimensionales aleatorios ver Alexander y otros<sup>3</sup>.

En el caso uniforme consideramos  $B_n = B \forall n$ , y tenemos que:

$$\dot{p}_m = B(p_{m+1} + p_{m-1} - 2p_m) \quad (\text{II.58})$$

Tomando  $p_n(t=0) = \delta_{n0}$  y desarrollando en Fourier a  $p_n$  obtenemos:

$$p_m(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(i n q - 2Bt(1 - \cos q)) dq \quad (\text{II.59})$$

En término de las funciones modificadas de Bessel la expresión exacta de  $p_n(t)$  es:

$$p_m(t) = \exp(-2Bt) I_{|m|}(2Bt) \quad (\text{II.60})$$

y su transformada de Laplace recordando (I.10) resulta:

$$p_m(s) = G_{m0}^u(s) = (2B)^{|m|} (s^2 + 4Bs)^{-1/2} \cdot (s + 2B + (s^2 + 4Bs)^{1/2})^{-|m|} \quad (\text{II.61})$$

La función de Green del sistema uniforme  $G^u$  resulta con invariancia traslacional:

$$G_{\pi+\nu, \nu}^u(z) = G_{\nu 0}^u(z) \quad (II.62)$$

De (II.58) podemos observar inmediatamente que:

$$\bar{X} = 0, \quad \bar{X}^2 = 2Bt \quad (II.63)$$

resultando según (I.4) y (I.5) para la velocidad y la constante de difusión que:

$$V = 0, \quad D = B \quad (II.64)$$

Por último consideremos el problema de una constante de salto impura  $b$  entre los sitios 0 y 1 de una red que de otra manera sería uniforme con constante de salto  $B$ . La función de Green de este problema con una impureza  $G^i$  podemos expresarla en término de las componentes de  $G^u$  :

$$G_{\nu, \delta}^i(z) = \sum_{\pi=1}^{\infty} \sum_{\nu'=-\infty}^{\infty} (T-Q)_{\pi+m} \left( G^0 + \frac{z G^0 Q G^0}{1 - z d G_{11}^0} \right) (\delta_{\nu, \nu'+1} - \delta_{\nu, \nu'}) \quad (II.65)$$

donde:

$$G^0 = B G^u, \quad T = BI, \quad Q_{mm} = d \delta_{m,1} \delta_{mm}, \quad d = \frac{1}{B} - \frac{1}{b}$$

En particular resulta:

$$G_{10}^i(z) = \frac{1}{B} \frac{G_{10}^0}{1 - d G_{00}^0} \quad (II.66)$$

#### Sistema Desordenado y Aproximación de Medio Efectivo

Al estudiar las propiedades de sistemas simétricos en los cuales las constantes de salto  $B_n$  son variables aleatorias independientes con idéntica distribución  $f(b)$  nos interesan los

promedios  $\langle P(t) \rangle$  sobre las realizaciones del desorden. De (II.14):

$$\langle P(t) \rangle = \langle e^{Ht} \rangle P^0 \quad (II.67)$$

En los casos límites podemos considerar la aproximación:

$$\langle P(t) \rangle \approx e^{H^* t} P^0 \quad (II.68)$$

en donde  $H^*$  corresponde a un sistema uniforme con una constante de salto efectiva  $B^*$ . Resulta<sup>2,3,4</sup> que:

$$B^* \rightarrow \begin{cases} \langle b \rangle = \int b f(b) db & t \rightarrow 0 \\ \langle 1/b \rangle^{-1} = (\int 1/b f(b) db)^{-1} & t \rightarrow \infty \end{cases} \quad (II.69)$$

Para un análisis del límite para tiempos suficientemente largos ver Prato<sup>4</sup>.

La ecuación autoconsistente para  $B^*$  en la aproximación de medio efectivo (I.11) resulta:

$$\int G_{10}^i(s) f(b) db = G_{10}^u(s) \quad (II.70)$$

y usando (II.66):

$$\int \frac{f(b) db}{1 - s \int G_{00}^o(s)} = 1 \quad (II.71)$$

De (II.61):

$$G_{00}^o(s) = B^* (s^2 + 4B^* s)^{-1/2} \quad (II.72)$$

entonces:

$$\int \frac{f(b) db}{\frac{1}{B^*} \sqrt{s^2 + 4B^* s} - s \left( \frac{1}{B^*} - \frac{1}{b} \right)} = \frac{B^*}{\sqrt{s^2 + 4B^* s}} \quad (II.73)$$



Analícemos ahora el comportamiento asintótico:

Si  $s \rightarrow \infty$   $\sqrt{s^2 + 4\mathcal{B}e^s} \approx s$  y en (II.73) resulta:

$$\frac{1}{s} \int b f(b) db = \frac{1}{s} \mathcal{B}e^s$$

$$\therefore \mathcal{B}e^s \approx \langle b \rangle \text{ si } s \rightarrow \infty \quad (\text{II.74})$$

multiplicando ambos miembros de (II.73) por  $x = \sqrt{s^2}$

$$\int \frac{f(b) db}{\frac{1}{\mathcal{B}e^s} \sqrt{x^2 + 4\mathcal{B}e^s} - x(\frac{1}{\mathcal{B}e^s} - \frac{1}{b})} = \frac{\mathcal{B}e^s}{\sqrt{x^2 + 4\mathcal{B}e^s}}$$

Si  $s \rightarrow 0$   $x \rightarrow 0$

$$\mathcal{B}e^s (x^2 + 4\mathcal{B}e^s)^{-1/2} \approx \sqrt{\mathcal{B}e^s}/2 - \frac{x}{8\sqrt{\mathcal{B}e^s}}$$

$$\left( \frac{1}{\mathcal{B}e^s} \sqrt{x^2 + 4\mathcal{B}e^s} - x \left( \frac{1}{\mathcal{B}e^s} - \frac{1}{b} \right) \right)^{-1} \approx \frac{\sqrt{\mathcal{B}e^s}}{2} - \left( \frac{1}{8\sqrt{\mathcal{B}e^s}} + \frac{1}{4} \left( \frac{\mathcal{B}e^s}{b} - 1 \right) \right) x$$

resulta que:

$$\int \frac{\mathcal{B}e^s}{b} f(b) db - 1 = 0$$

$$\therefore \mathcal{B}e^s \approx \langle 1/b \rangle^{-1} \text{ si } s \rightarrow 0 \quad (\text{II.75})$$

Vemos que (II.74) y (II.75) concuerdan con (II.65).

## CAPITULO III

## APROXIMACION DE MEDIO EFECTIVO EN UNA RED n-D

## Ecuación Maestra en n-D

Con  $|S\rangle$  denotaremos al vector posición del sitio  $S$  de la red n-D y consideramos que  $\langle S | S' \rangle = \delta_{S,S'}$  (En esta sección adoptaremos por comodidad la notación de Odagaki y Lax<sup>7</sup>). La probabilidad  $P(S,t|S_0,0)$  de que una partícula en una caminata aleatoria sobre la red se encuentre en el sitio  $S$  en el instante  $t$  dado que en  $t=0$  se hallaba en  $S_0$  obedece la ecuación maestra:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(S,t|S_0,0) = -\Gamma_S P(S,t|S_0,0) + \sum_{S' \neq S} W_{SS'} P(S',t|S_0,0) \quad (\text{III.1})$$

donde:

$$\Gamma_S = \sum_{S'} W_{S'S} \quad , \quad P(S,0|S_0,0) = \delta_{SS_0}$$

y  $W_{SS'}$  es la probabilidad de transición por unidad de tiempo del sitio  $S$  al  $S'$ .

La transformada de Laplace  $P(S,u|S_0)$  de  $P(S,t|S_0,0)$  obedece entonces la ecuación:

$$(\mu + \Gamma_S) P(S,u|S_0) - \sum_{S' \neq S} W_{SS'} P(S',u|S_0) = \delta_{SS_0} \quad (\text{III.2})$$

Definiendo:

$$\hat{P}(\mu) = \sum_{SS_0} |S\rangle P(S,\mu|S_0) \langle S_0| \quad (\text{III.3})$$

$$\hat{H} = - \sum_S |S\rangle \Gamma_S \langle S| + \sum_{S \neq S'} |S\rangle W_{SS'} \langle S'|$$

podemos escribir (III.2) de la siguiente manera:

$$(\mu \hat{I} - \hat{H}) \hat{P}(\mu) = \hat{I} \quad (\text{III.4})$$

resultando para la función de Green del problema la expresión:

$$\hat{G} = (\mu \hat{I} - \hat{H})^{-1} \quad (\text{III.5})$$

$$P(s, \mu | s_0) = \langle s | \hat{G} | s_0 \rangle = G_{ss_0} \quad (\text{III.6})$$

El estudio de la función de Green del sistema desordenado tiene gran importancia para el cálculo de cantidades como la conductividad en materiales amorfos. Para un medio aleatorio isotópico la conductividad escalar ac  $\sigma(\omega)$  viene dada por la expresión:

$$\sigma(\omega) = \frac{n e^2}{k_B T} D(\omega) \quad (\text{III.7})$$

$$D(\omega) = -\frac{\omega^2}{2d} \sum_s (s - s_0)^2 P(s, i\omega | s_0) \quad (\text{III.8})$$

donde  $d$  es la dimensión del sistema,  $e$  la carga del electrón,  $n$  es la densidad número de portadores de carga y  $D(\omega)$  representa la constante de difusión generalizada.

#### Problema de una Impureza

Consideremos una red homogénea, es decir aquella para la cual  $W_{ss'}$  es nula salvo entre sitios vecinos cercanos donde toma el mismo valor  $W_c$ . El Hamiltoniano de dicha red resulta:

$$\hat{\Sigma} = -z W_c \sum_s |s\rangle \langle s| + W_c \sum_{\substack{s' \neq s \\ (\text{n. n.})}} |s\rangle \langle s'| \quad (\text{III.9})$$

donde  $z$  es el número de coordinación de la red. La función de Green de este problema resulta:

$$\hat{G}^0 = (\mu \hat{I} - \hat{\Sigma})^{-1} \quad (\text{III.10})$$

Consideremos ahora una red con una impureza, es decir una red homogénea a excepción de una constante de salto entre dos sitios vecinos cercanos a y b  $W_{ab}$  la cual es distinta de  $W_c$  (consideremos el problema simétrico  $W_{ab} = W_{ba}$ ). El Hamiltoniano del problema con una impureza puede escribirse como:

$$\hat{H}^i = \hat{\Sigma} + \hat{V} \quad (\text{III.11})$$

con:

$$\begin{aligned} \hat{V} = & |a\rangle (W_c - W_{ba}) \langle a| + |a\rangle (W_{ab} - W_c) \langle b| \\ & + |b\rangle (W_{ba} - W_c) \langle a| + |b\rangle (W_c - W_{ab}) \langle b| \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

La función de Green de este problema es:

$$\hat{G}^i = (u \hat{J} - \hat{H}^i)^{-1} \quad (\text{III.13})$$

Escribiendo:  $\hat{V} = \hat{V}^1 + \hat{V}^2 + \hat{V}^3 + \hat{V}^4$

y definiendo  $b = W_c - W_{ab}$ ,  $b_1 = b_4 = b$ ,  $b_2 = b_3 = -b$  resulta:

$$V_{\alpha\beta}^1 = b_1 \delta_{\alpha a} \delta_{\beta a} \quad V_{\alpha\beta}^2 = b_2 \delta_{\alpha a} \delta_{\beta b}$$

$$V_{\alpha\beta}^3 = b_3 \delta_{\alpha b} \delta_{\beta a} \quad V_{\alpha\beta}^4 = b_4 \delta_{\alpha b} \delta_{\beta b}$$

Definiendo:

$$\hat{H}^1 = \hat{H}^i - \hat{V}^1 \quad \text{y} \quad \hat{G}^1 = (u \hat{J} - \hat{H}^1)^{-1} \quad (\text{III.14})$$

resulta:  $G^1 = (u \hat{J} - \hat{H}^1 - \hat{V}^1)^{-1}$

y utilizando el desarrollo de Dyson:

$$G^1 = G^1 + G^1 V^1 G^1 + G^1 V^1 G^1 V^1 G^1 + \dots$$

obtenemos:

$$G_{\alpha\beta}^i = G_{\alpha\beta}^1 + G_{\alpha a}^1 b_1 G_{a\beta}^1 (1 - b_1 G_{aa}^1)^{-1} \quad (\text{III.15})$$

Definiendo:

$$\hat{H}^2 = \hat{H}^1 - \hat{V}^2 \quad \text{y} \quad \hat{G}^2 = (u \hat{J} - \hat{H}^2)^{-1} \quad (\text{III.16})$$

resulta:  $G^1 = (u I - H^2 - V^2)^{-1}$  y

$$G_{\alpha\beta}^1 = G_{\alpha\beta}^2 + G_{\alpha a}^2 b_2 G_{b\beta}^2 (I - b_2 G_{ba}^2)^{-1} \quad (\text{III.17})$$

Definiendo:

$$\hat{H}^3 = \hat{H}^2 - \hat{V}^3 \quad \text{y} \quad \hat{G}^3 = (u \hat{I} - \hat{H}^3)^{-1} \quad (\text{III.18})$$

resulta:  $G^2 = (u I - H^3 - V^3)^{-1}$  y

$$G_{\alpha\beta}^2 = G_{\alpha\beta}^3 + G_{\alpha b}^3 b_3 G_{a\beta}^3 (I - b_3 G_{ab}^3)^{-1} \quad (\text{III.19})$$

Por último:  $\hat{\Sigma} = \hat{H}^3 - \hat{V}^4$  y  $\hat{G}^3 = (u \hat{I} - \hat{\Sigma} - \hat{V}^4)^{-1}$

$$G_{\alpha\beta}^3 = G_{\alpha\beta}^0 + G_{\alpha b}^0 b_4 G_{b\beta}^0 (I - b_4 G_{bb}^0)^{-1} \quad (\text{III.20})$$

Podemos ahora expresar la componente  $G_{ab}^1$  en términos de las componentes de  $G^0$ . De (III.15):

$$G_{ab}^1 = G_{ab}^1 (I - b_1 G_{aa}^1)^{-1} \quad (\text{III.21})$$

De (III.17):

$$G_{ab}^1 = [G_{ab}^2 - b_2 (G_{ab}^2 G_{ba}^2 - G_{aa}^2 G_{bb}^2)] (I - b_2 G_{ba}^2)^{-1}$$

$$G_{aa}^1 = G_{aa}^2 (I - b_2 G_{ba}^2)^{-1}$$

$$G_{ab}^1 = \frac{G_{ab}^2 + b (G_{ab}^2 G_{ba}^2 - G_{aa}^2 G_{bb}^2)}{I + b (G_{ba}^2 - G_{aa}^2)} \quad (\text{III.22})$$

De (III.19):

$$G_{ab}^2 = G_{ab}^3 (I - b_3 G_{ab}^3)^{-1}$$

$$G_{aa}^2 = G_{aa}^3 (1 - b_3 G_{ab}^3)^{-1}$$

$$G_{ba}^2 = [G_{ba}^3 - b_3 (G_{ab}^3 G_{ba}^3 - G_{aa}^3 G_{bb}^3)] (1 - b_3 G_{ab}^3)^{-1}$$

$$G_{bb}^2 = G_{bb}^3 (1 - b_3 G_{ab}^3)^{-1}$$

$$G_{ab}^i = \frac{G_{ab}^3 + bA}{1 + b(G_{ab}^3 + G_{ba}^3 - G_{aa}^3 + bA)} \quad (\text{III.23})$$

con

$$A = G_{ab}^3 G_{ba}^3 - G_{aa}^3 G_{bb}^3$$

De (III.20):

$$G_{ab}^3 = G_{ab}^0 (1 - b G_{bb}^0)^{-1}$$

$$G_{aa}^3 = [G_{aa}^0 + b(G_{ab}^0 G_{ba}^0 - G_{aa}^0 G_{bb}^0)] (1 - b G_{bb}^0)^{-1}$$

$$G_{ba}^3 = G_{ba}^0 (1 - b G_{bb}^0)^{-1}$$

$$G_{bb}^3 = G_{bb}^0 (1 - b G_{bb}^0)^{-1}$$

los cual nos permite expresar finalmente:

$$G_{ab}^i = \frac{G_{ab}^0 + b(G_{ab}^0 G_{ba}^0 - G_{aa}^0 G_{bb}^0)}{1 + b(G_{ab}^0 + G_{ba}^0 - G_{aa}^0 - G_{bb}^0)} \quad (\text{III.24})$$

#### Aproximación de Medio Efectivo

La condición autoconsistente (I.11) para  $W_c(u)$  es:

$$\langle G_{ab}^i - G_{ab}^0 \rangle = 0 \quad (\text{III.25})$$

donde  $\langle \dots \rangle$  denota un promedio sobre la distribución de  $W_{ab}$ .

Usando (III.24) y que  $G_{ab}^0 = G_{ba}^0$ ,  $G_{aa}^0 = G_{bb}^0$  por ser el sistema homogéneo, resulta que:

$$0 = \left\langle \frac{W_c - W_{ab}}{1 + 2(G_{ab}^0 - G_{aa}^0)(W_c - W_{ab})} \right\rangle \quad (\text{III.26})$$

Ecuación que coincide con la presentada por Odagaki y Lax<sup>7</sup>. Estos autores para la constante de difusión generalizada en la aproximación de medio efectivo dan la siguiente expresión:

$$D(\omega) = a^2 \sqrt{c} (i\omega) \quad (\text{III.27})$$

donde  $a$  es la constante de red.

## CAPITULO IV

FUNCION DE GREEN Y APROXIMACION DE MEDIO EFECTIVO  
EN UNA RED BIDIMENSIONAL

## Ecuación Maestra en 2-D

Consideremos el problema de una partícula que realiza una caminata aleatoria en una red regular bidimensional cuyos sitio identificamos por un par ordenado de enteros  $(m,n)$ . Suponiendo que sólo están permitidos saltos entre sitios adyacentes (vecinos más cercanos), si  $p_{mn}(t)$  es la probabilidad de encontrar la partícula en el sitio  $(m,n)$  en el instante  $t$ , la ecuación maestra adopta la forma:

$$\dot{p}_{mn} = A_{m+1} p_{m+1,n} + D_{m-1} p_{m-1,n} + B_{m+1} p_{m,n+1} + C_{m-1} p_{m,n-1} - (A_m + B_m + D_m + C_m) p_{mn} \quad (\text{IV.1})$$

En la fig. IV.a se muestra gráficamente el significado de las constantes de salto  $A_m$ ,  $B_n$ ,  $D_m$ ,  $C_n$ .

Para el caso del sistema homogéneo:  $A_m = B_n = B \quad \forall m,n$  y resulta en (IV.1)

$$\dot{p}_{mn} = B(p_{m+1,n} + p_{m-1,n} + p_{m,n+1} + p_{m,n-1} - 4p_{mn}) \quad (\text{IV.2})$$

Consideremos un desarrollo de Fourier de  $p_{mn}(t)$ :

$$p_{mn}(t) = \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 c(q_1, q_2; t) e^{i(mq_1 + nq_2)} \quad (\text{IV.3})$$

resulta:

$$p_{m\pm 1, n} = \int dq_1 dq_2 c(q_1, q_2; t) e^{i(mq_1 + nq_2)} e^{\pm iq_1}$$

$$p_{m, n\pm 1} = \int dq_1 dq_2 c(q_1, q_2; t) e^{i(mq_1 + nq_2)} e^{\pm iq_2}$$

y sustituyendo en (IV.2) obtenemos que:



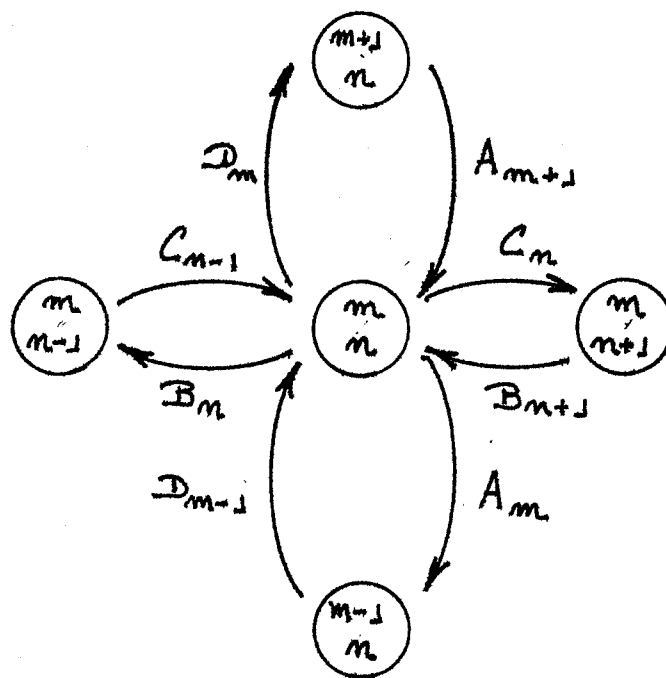


Figura IV.a  
Definición de las constantes de salto  
para el problema bidimensional

$$\dot{\mathcal{L}}(q_1, q_2; t) - 2B(\cos q_1 + \cos q_2 - 2)\mathcal{L}(q_1, q_2; t) = 0 \quad (\text{IV.4})$$

Suponiendo que  $p_{mn}(t=0) = \delta_{m0} \delta_{n0}$  y modos de relajación:

$$\mathcal{L}(q_1, q_2; t) = d \exp[-\lambda(q_1, q_2)t] \quad (\text{IV.5})$$

de (IV.4) resulta que:

$$\lambda(q_1, q_2) = 2B(2 - \cos q_1 - \cos q_2) \quad (\text{IV.6})$$

De la condición de normalización:  $\sum p_{mn}(0) = 1$  se tiene que  
 $d = (4\pi^2)^{-1}$

Entonces, resumiendo escribimos:

$$p_{mn}(t) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 \exp[i(mq_1 + nq_2) - \lambda t] \quad (\text{IV.7})$$

#### Densidad de Modos de Relajación

Las variables  $q_1$  y  $q_2$  que intervienen en (IV.6) son independientes entre si y se encuentran homogéneamente distribuidas en  $[-\pi, \pi]$ :

$$P_{\vec{q}}(q_1, q_2) = \frac{1}{(2\pi)^2}; \quad q_1, q_2 \in [-\pi, \pi] \quad (\text{IV.8})$$

Nos interesa calcular la densidad de modos de relajación en función de  $\lambda$ :  $\mathcal{P}(\lambda)$ ,  $\lambda \in [0, 8B]$ . Utilizando el teorema de transformación de variables estocásticas:

$$\mathcal{P}(\lambda) = \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 P_{\vec{q}}(q_1, q_2) \delta(\lambda - \lambda(q_1, q_2)) \quad (\text{IV.9})$$

y escribiendo:

$$\int (\lambda - \lambda(q_1, q_2)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(\lambda - 2B(2 - \cos q_1 - \cos q_2))} \quad (\text{IV.10})$$

puede verse que:

$$P(\lambda) = \frac{1}{4\pi B} P_{-1/2} \left( \frac{\lambda^2}{8B^2} - \frac{\lambda}{B} + 1 \right) \quad (\text{IV.11})$$

o bien utilizando que:

$$P_{-1/2}(x) = \frac{2}{\pi} K \left( \sqrt{\frac{1-x}{2}} \right) \quad (-1 < x < 1) \quad (\text{IV.12})$$

donde  $K(m)$  es la función Elíptica Completa de primer tipo, resulta:

$$P(\lambda) = (2\pi^2 B)^{-1} K \left( \sqrt{\frac{\lambda}{2B} - \frac{\lambda^2}{16B^2}} \right) \quad (\text{IV.13})$$

Estudiamos ahora el comportamiento asintótico de  $P(\lambda)$  sobre el borde de la zona de los valores permitidos para  $q_1$  y  $q_2$ . Ver fig. IV.b.

$$\begin{array}{lll} 1) & q_1 = q_2 = 0 & \implies \lambda = 0 \\ & \left. \begin{array}{l} q_1 = \pm\pi, \quad q_2 = 0 \\ q_1 = 0, \quad q_2 = \pm\pi \end{array} \right\} & \implies \lambda = 4B \\ 3) & q_1 = \pm\pi, \quad q_2 = \pm\pi & \implies \lambda = 8B \end{array}$$

Usando que:

$$K(m) \cong \frac{\pi}{2} \left( 1 + \frac{1}{4} m \right) \quad m \rightarrow 0 \quad (\text{IV.14})$$

$$K(m) \cong \frac{1}{2} \ln \left( \frac{16}{1-m} \right) \quad m \rightarrow 1 \quad (\text{IV.15})$$

y definiendo  $\xi = 8B - \lambda$ ,  $\eta = \lambda - 4B$  tenemos:

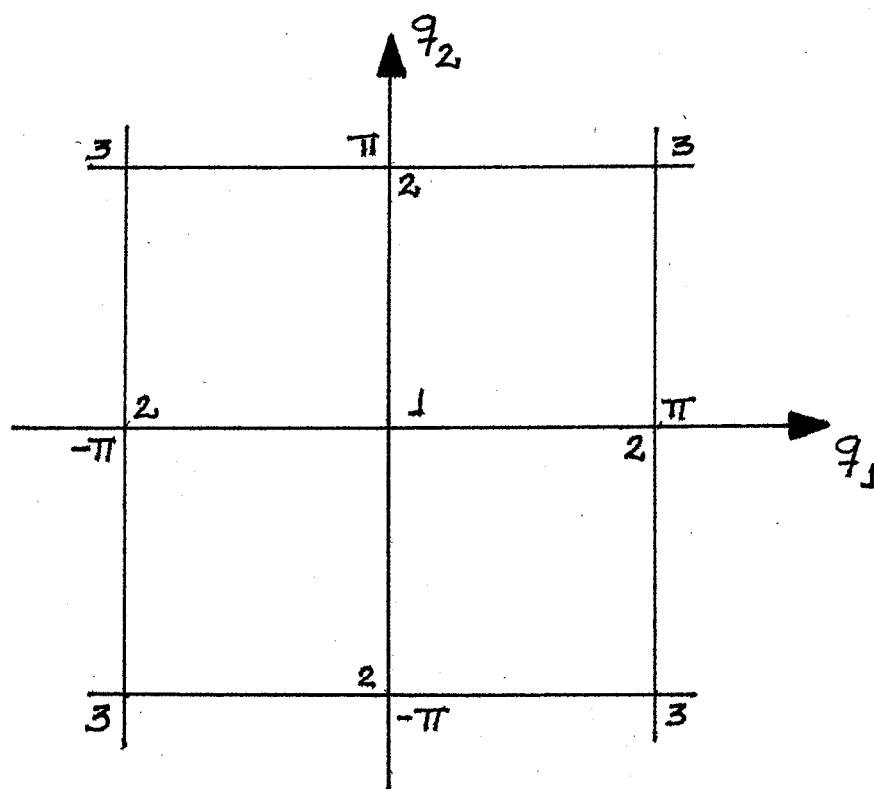


Figura IV.b  
 Definición de la zona  
 de valores permitidos de  $q_1$  y  $q_2$

$$f \longrightarrow \frac{1}{4\pi B} \left( 1 + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2}{2B}} \right), \quad \lambda \longrightarrow 0 \quad (\text{IV.16})$$

$$f \longrightarrow \frac{1}{4\pi B} \left( 1 + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{E}{2B}} \right), \quad \lambda \longrightarrow 8B \quad (\text{IV.17})$$

$$f \longrightarrow \frac{1}{4\pi^2 B} \ln \left( 512 \left( \frac{B}{\eta} \right)^2 \right), \quad \lambda \longrightarrow 4B \quad (\text{IV.18})$$

### Función de Green de la Red Uniforme

Transformando según Laplace la ecuación (IV.2) resulta:

$$s p_{mn}(s) = B(p_{m+1,n}(s) + p_{m-1,n}(s) + p_{m,n+1}(s) + p_{m,n-1}(s) - 4p_{mn}(s)) + p_{mn}^{\circ} \quad (\text{IV.19})$$

con  $p_{mn}^{\circ} = p_{mn}(t=0)$ . Desarrollando en Fourier  $p_{mn}(s)$ :

$$p_{mn}(s) = \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 \mathcal{L}(q_1, q_2; s) e^{i(\mu q_1 + \nu q_2)} \quad (\text{IV.20})$$

y sustituyendo en (IV.19) resulta:

$$\int dq_1 \int dq_2 e^{i(\mu q_1 + \nu q_2)} \mathcal{L}(q_1, q_2; s) \cdot [s - 2B(\cos q_1 + \cos q_2 - 2)] = p_{mn}^{\circ} \quad (\text{IV.21})$$

Suponiendo  $p_{mn}^{\circ} = \delta_{mm_0} \delta_{nn_0}$  y escribiendo:

$$p_{mn}^{\circ} = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 e^{i[(\mu - \mu_0)q_1 + (\nu - \nu_0)q_2]} \quad (\text{IV.22})$$

resulta que:

$$\mathcal{L}(q_1, q_2; s) = \frac{1}{4\pi^2} \left( s - 2B(\cos q_1 + \cos q_2 - 2) \right)^{-1} e^{-i(\mu_0 q_1 + \nu_0 q_2)} \quad (\text{IV.23})$$

Sustituyendo (IV.23) en (IV.20) y recordando (I.10) tenemos para la función de Green del problema uniforme bidimensional la expresión:

$$G_{\vec{n}, \vec{n}_0}^{\circ}(\zeta) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 \frac{e^{i[(m-m_0)q_1 + (n-n_0)q_2]}}{s - 2B(\cos q_1 + \cos q_2 - 2)} \quad (\text{IV.24})$$

donde hemos empleado la notación:  $\vec{r} = (m, n)$  y  $\vec{r}_0 = (m_0, n_0)$ . Considerando los cambios de variables  $q_1 \rightarrow -q_1$  y  $q_2 \rightarrow -q_2$  vemos de manera inmediata que se cumple:

$$\begin{aligned} G_{\vec{n}, \vec{n}_0}^{\circ} &= G_{\vec{n}_0, \vec{n}}^{\circ} \\ G_{\vec{n}, \vec{n}_0}^{\circ} &= G_{\vec{n} - \vec{n}_0, 0}^{\circ} = G_{\vec{n}_0 - \vec{n}, 0}^{\circ} \end{aligned} \quad (\text{IV.25})$$

y en particular si  $\vec{r}_0 = 0$ :

$$G_{\vec{n}}^{\circ} = G_{-\vec{n}}^{\circ} \quad (\text{IV.26})$$

Podemos integrar la expresión (IV.23) mediante el cambio de variable  $z = \exp(iq_1)$  sobre el círculo unidad en el plano complejo y resulta<sup>10</sup>:

$$G_{\vec{n}, \vec{n}_0}^{\circ} = \frac{1}{4\pi B} \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 e^{i(n-n_0)q_2} \frac{(C - \cos q_2 - \sqrt{(C - \cos q_2)^2 - 1})^{m-m_0}}{\sqrt{(C - \cos q_2)^2 - 1}} \quad (\text{IV.27})$$

donde:  $C = s/(2B) + 2$ . ( $m > m_0$ )

Podemos integrar (IV.27) para algunos casos particulares. Como estamos interesados en la aproximación de medio efectivo escojamos como vecinos cercanos de la red a:

$$\begin{aligned} \vec{n}_0 = \vec{0} = (0, 0) &\Rightarrow m_0 = n_0 = 0 \\ \vec{n} = \vec{1} = (1, 0) &\Rightarrow m = 1, n = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV.28})$$

y calculemos las componentes:  $G_{0,0}^{\circ}$  y  $G_{1,0}^{\circ}$  que intervienen en (III.27):

$$G_{\delta\delta}^{\circ} = \frac{1}{2\pi B} \int_0^{\pi} \frac{d\varphi}{\sqrt{(C - \cos\varphi)^2 - 1}} \quad (\text{IV.29})$$

$$G_{J\delta}^{\circ} = \frac{1}{2\pi B} \int_0^{\pi} \left( \frac{C - \cos\varphi}{\sqrt{(C - \cos\varphi)^2 - 1}} - 1 \right) d\varphi \quad (\text{IV.30})$$

Mediante el cambio de variables  $x = \cos \varphi$  podemos escribir:

$$G_{\delta\delta}^{\circ} = \frac{1}{2\pi B} \int_{-1}^1 \left( (D-x)(E-x)(1-x)(1+x) \right)^{-1/2} dx \quad (\text{IV.31})$$

$$G_{J\delta}^{\circ} = \frac{1}{2\pi B} \int_{-1}^1 (C-x) \left( (D-x)(E-x)(1-x)(1+x) \right)^{-1/2} dx - \frac{1}{2B} \quad (\text{IV.32})$$

donde:  $D = C + 1 > E = C - 1 > 1$ . Estas integrales se encuentran tabuladas<sup>9,11</sup> (la expresión 3.148,3 de Gradshteyn<sup>9</sup> presumiblemente es incorrecta):

$$G_{\delta\delta}^{\circ} = \frac{1}{2\pi B} K(k) \quad (\text{IV.33})$$

$$G_{J\delta}^{\circ} = \frac{1}{2\pi B} K(k) - \frac{1}{4B} \quad (\text{IV.34})$$

donde:

$$k = \left( 1 + \frac{3}{4B} \right)^{-1/2}, \quad k \in (0, 1) \quad (\text{IV.35})$$

Las expresiones (IV.33) y (IV.34) satisfacen la relación:

$$G_{\delta\delta}^{\circ} - G_{J\delta}^{\circ} = \left( 1 - \frac{3}{4B} G_{\delta\delta}^{\circ} \right) / 4B \quad (\text{IV.36})$$

requerida por Odagaki y Lax<sup>7</sup>.

Estudiemos ahora el comportamiento asintótico de  $G_{\delta\delta}^{\circ}(s)$ . Usando (IV.14) y (IV.15) con  $m = k^2$  tenemos que:

$$(i) \text{ si } s \gg 4B \quad G_{\infty} \approx 1/s$$

$$(ii) \text{ si } s \ll 4B \quad G_{\infty} \approx (4\pi B)^{-1} \ln(8(4B/s))$$

De (i)  $p_0(s) \rightarrow 1/s$  para  $s \rightarrow \infty$  lo cual implica que la transformada de Laplace satisface:

$$p_0(t) \rightarrow 1 \quad \text{para } t \rightarrow 0$$

lo cual es esperado en virtud de (IV.22).

#### Aproximación de Medio Efectivo

Con la elección de sitios cercanos realizada en (IV.28) la ecuación autoconsistente para  $B^e(s)$  dada en (III.26) puede escribirse como:

$$0 = \int db f(b) \frac{B^e - b}{1 + 2(B^e - b)(G_{J\delta}^0 - G_{\delta\delta}^0)} \quad (IV.37)$$

Consideremos en particular como función distribución de la impureza a una función constante sobre un intervalo:

$$f(b) = \begin{cases} 1/\beta - \alpha, & b \in [\alpha, \beta] \\ 0, & b \notin [\alpha, \beta] \end{cases}, \beta > \alpha > 0 \quad (IV.38)$$

En este caso (IV.37) puede integrarse directamente. Si definimos:

$$\Delta = 2B^e (G_{J\delta}^0 - G_{\delta\delta}^0) \quad (IV.39)$$

se tiene que:

$$\ln \left( \frac{(1+\Delta)B^e - \Delta\beta}{(1+\Delta)B^e - \Delta\alpha} \right) + (\beta - \alpha) \frac{\Delta}{B^e} = 0 \quad (IV.40)$$

De (IV.33) y (IV.34) resulta que:

$$\Delta(k) = \frac{1}{\pi} (1-k) K(k) - \frac{1}{2}, \quad (2-D) \quad (IV.41)$$



Ver gráfica de (IV.41) en fig. IV.c. usando que  $K(0) = \pi/2$  y (IV.15) con  $m = k^2$  resulta que:

$$\Delta \in (-1/2, 0) \quad , \quad (2-D) \quad (IV.42)$$

En el caso unidimensional teníamos para  $B^*(s)$  la ecuación autoconsistente (II.71). Considerando (IV.38) esta expresión puede también integrarse y expresando  $G_{\infty}(s)$  dada en (II.72) en términos de  $k$  dada en (IV.35) resulta una ecuación idéntica a (IV.40) con:

$$\Delta(k) = \sqrt{1-k} - 1 \quad , \quad (1-D) \quad (IV.43)$$

Ver gráfica de (IV.43) en la fig.4.d. Resulta obviamente que:

$$\Delta \in (-1, 0) \quad , \quad (1-D) \quad (IV.44)$$

Sea:

$$f(\beta) = \ln \left( \frac{(1+\Delta)\beta - \Delta\beta}{(1+\Delta)\beta - \Delta\alpha} \right) + (\beta - \alpha) \frac{\Delta}{\beta} \quad (IV.45)$$

Es fácil verificar que si  $\Delta \in (-1, 0)$  el argumento del logaritmo en (IV.44) es mayor o igual que 1 resultando en consecuencia que  $B^* > 0$ . Además independientemente de  $\alpha$  y  $\beta$  resulta que  $f(\beta) > 0$  y  $f(\alpha) < 0$ , y como  $f$  es continua se tiene que siempre existe una raíz de  $B^*$  en  $[\alpha, \beta]$ .

Si  $s \rightarrow \infty$ ,  $k \rightarrow 0$ , en 1-D y 2-D  $\Delta \rightarrow 0$ . En este caso usando la aproximación:

$$\ln(1+x) \simeq x - \frac{1}{2}x^2 \quad \text{para } x \rightarrow 0$$

podemos escribir a partir de (IV.40) que:

$$(B^* - \alpha)^2 - (B^* - \beta)^2 = 0$$

con lo cual resulta que:

$$B^* \rightarrow \frac{1}{2}(\beta + \alpha) \quad \text{si } s \rightarrow \infty \quad (IV.46)$$

Esta condición es equivalente a  $B^* \rightarrow \langle b \rangle$  usando (IV.38).

Figura IV.c  
Función  $\Delta(k)$  para el caso bidimensional

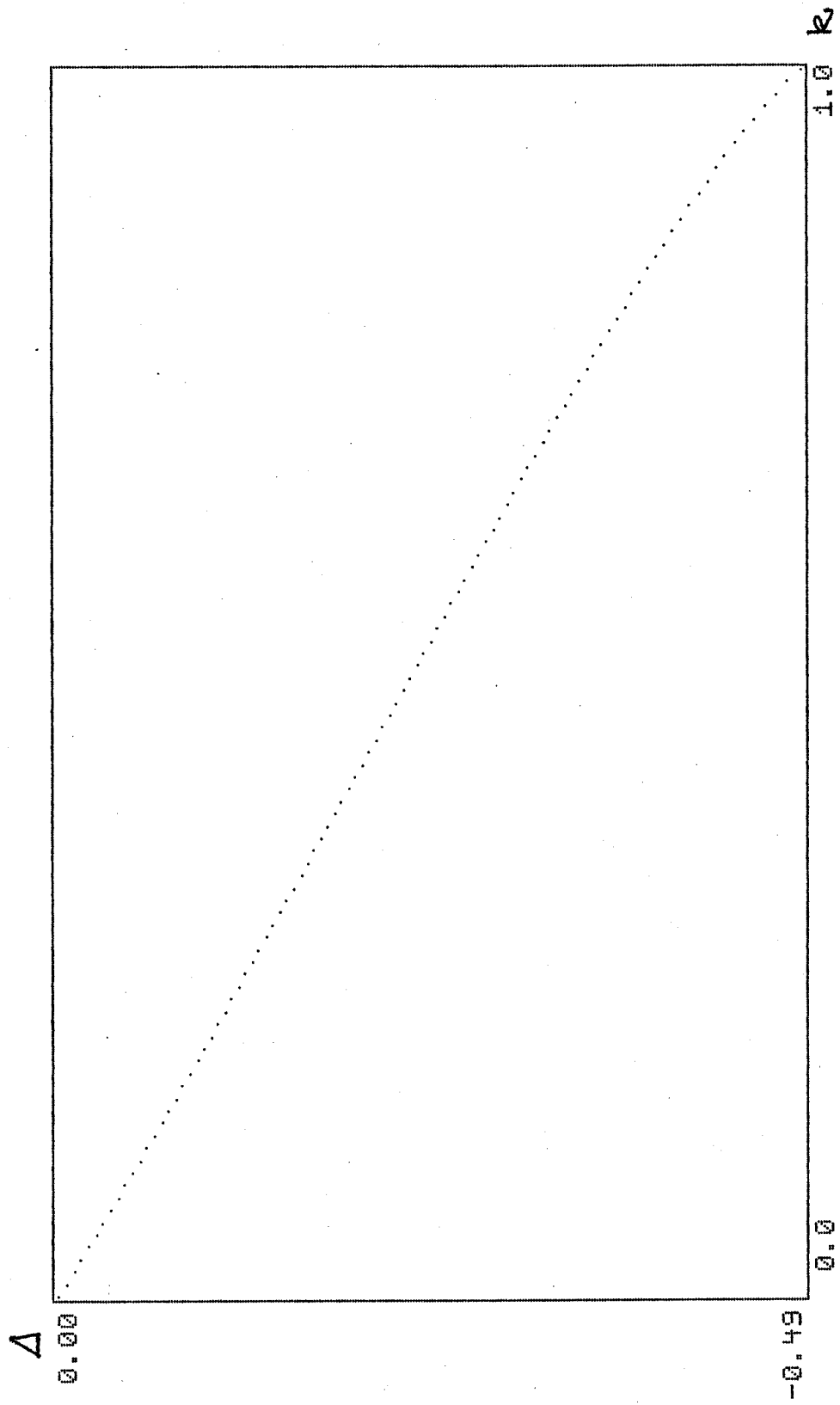
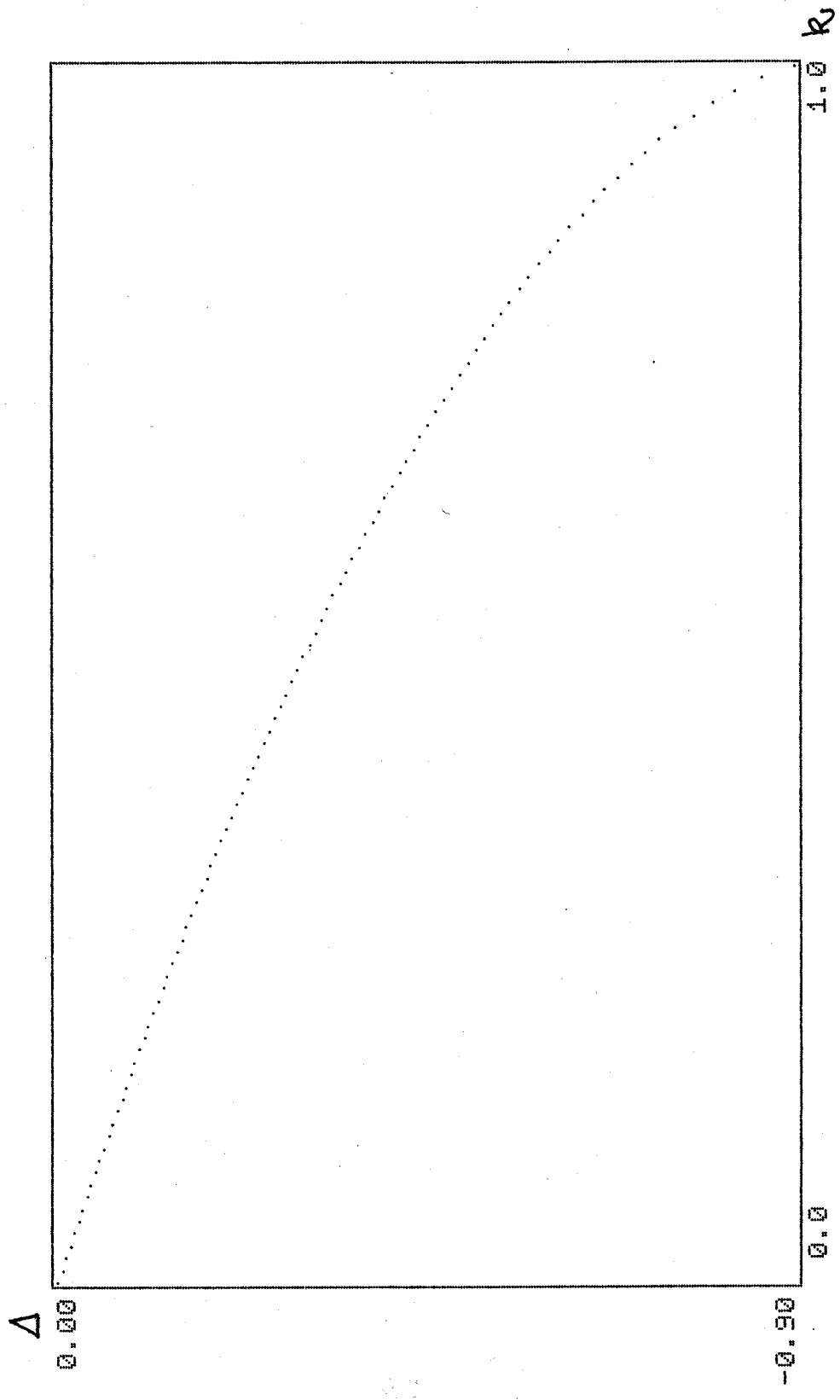


Figura IV.d  
Función  $\Delta(k)$  para el caso unidimensional



Si  $s \rightarrow 0$ ,  $k \rightarrow 1$ :  
 En 1-D  $\Delta \rightarrow -1$  y sustituyendo en (IV.40) resulta que:

$$\ln(\beta/\alpha) - (\beta - \alpha)/B^* = 0$$

con lo cual resulta que:

$$B^* \rightarrow (\beta - \alpha) / \ln(\beta/\alpha) \text{ si } s \rightarrow 0, (1-D) \quad (\text{IV.47})$$

Esta condición es equivalente a  $B^* \rightarrow \langle 1/b \rangle^{-1}$  usando (IV.38).  
 Ver (II.69) y (II.75).

En 2-D  $\Delta \rightarrow -1/2$  y sustituyendo en (IV.40) resulta que:

$$\ln\left(\frac{B^* + \beta}{B^* + \alpha}\right) - (\beta - \alpha) / 2B^* = 0 \quad (\text{IV.48})$$

Resulta así en 2-D un apartamiento respecto del límite (II.75) válido en 1-D.

#### Ilustración Numérica

Dada (IV.35) podemos fijar un valor de  $k \in (0,1)$  y resolver (IV.40) para dicho valor  $k$  fijo y luego encontrar  $s$  despejando en (IV.35):

$$s = 4B^* \left( \frac{1}{k} - 1 \right) \quad (\text{IV.49})$$

Esta manera de implementar el cálculo tiene como ventaja que al resolver (IV.40) por algún método iterativo (como la Regula Falsi modificada) se trabaja con la función  $\Delta$  valuada en un punto  $k$  fijo. Para  $s$  fijo  $\Delta$  depende de  $B^*$  a través de  $k$ . En (IV.40) tenemos entonces la ecuación para  $B^*$  dado un valor fijo de  $k$ ; la dependencia en  $B^*$  es explícita y la dependencia en  $k$  se da sólo a través  $\Delta$ , dada en (IV.43) para 1-D y en (IV.41) para 2-D.

En el apéndice del trabajo registramos los programas en FORTRAN implementados para el cálculo  $B^*$  en función de  $\ln(s)$ , en las fig. IV.e y IV.g los resultados obtenidos en 1-D y en las fig. IV.f y IV.h los obtenidos en 2-D.

Figura IV.e

B\* (ln s)      1-D

$\alpha = 1$        $\beta = 100$

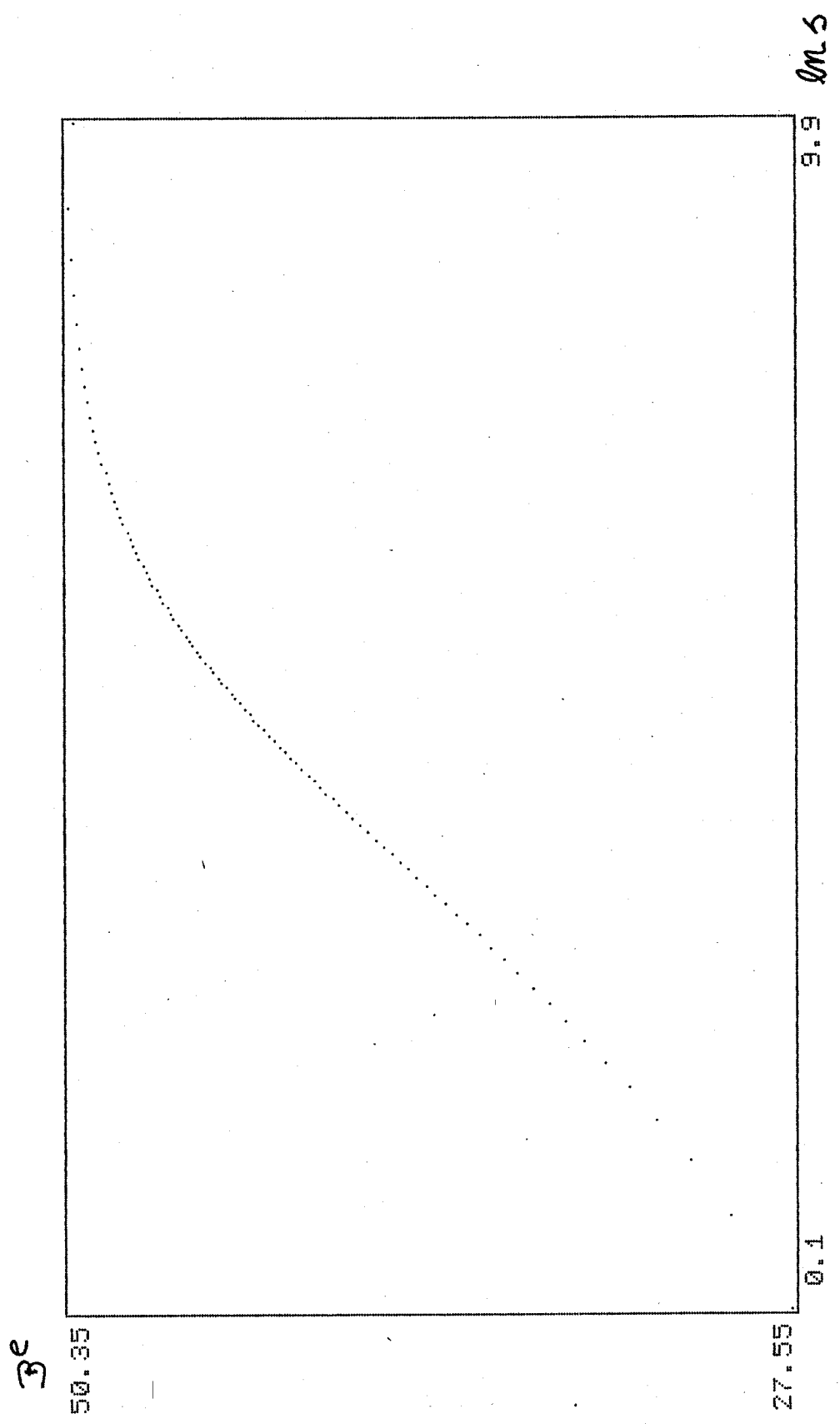




Figura IV.f

B\* (ln s)      2-D

$\alpha = 1$        $\beta = 100$

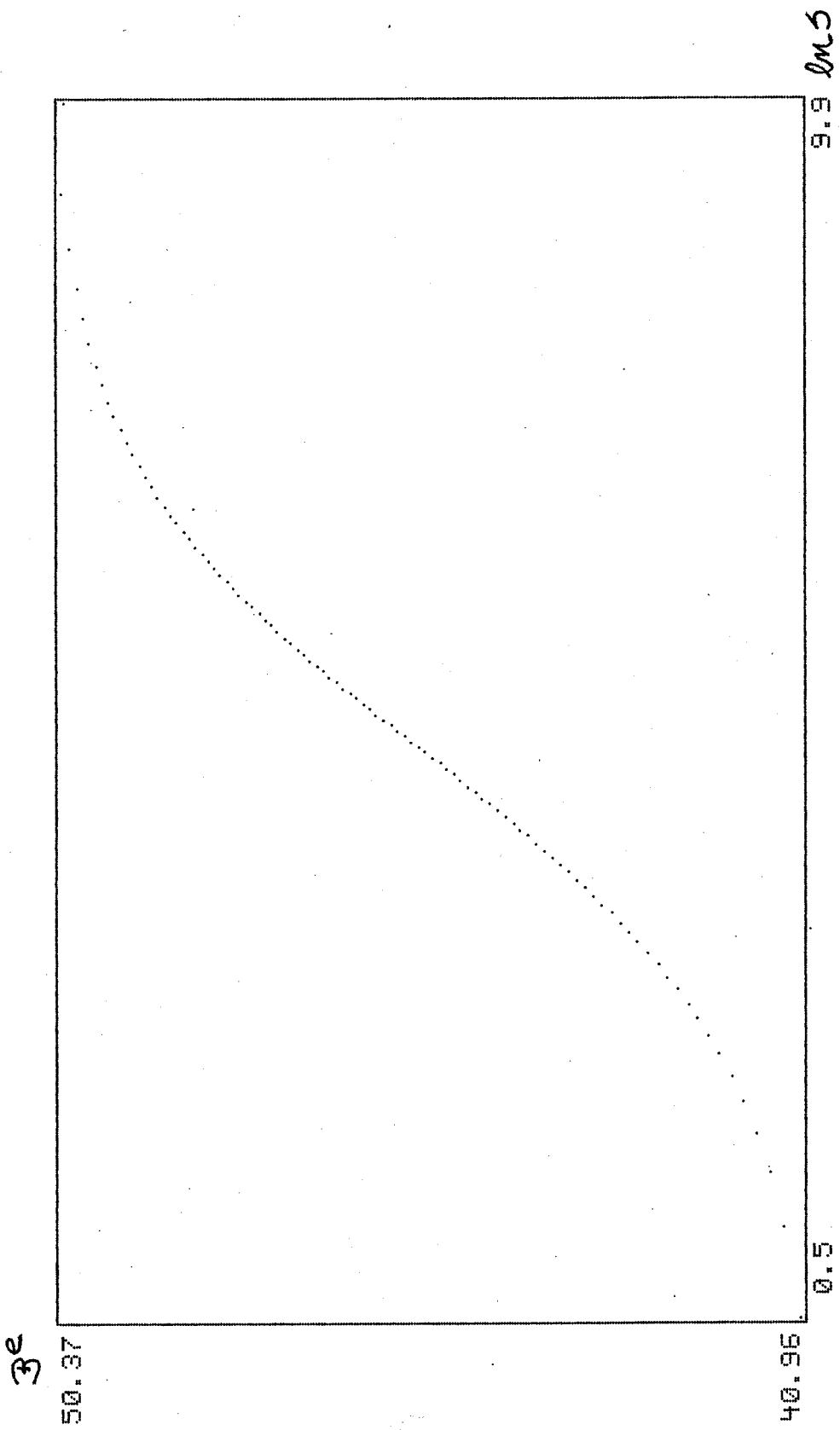


Figura IV.g

B\* (ln s) 1-D

$\alpha = 1$   $\beta = 1000$

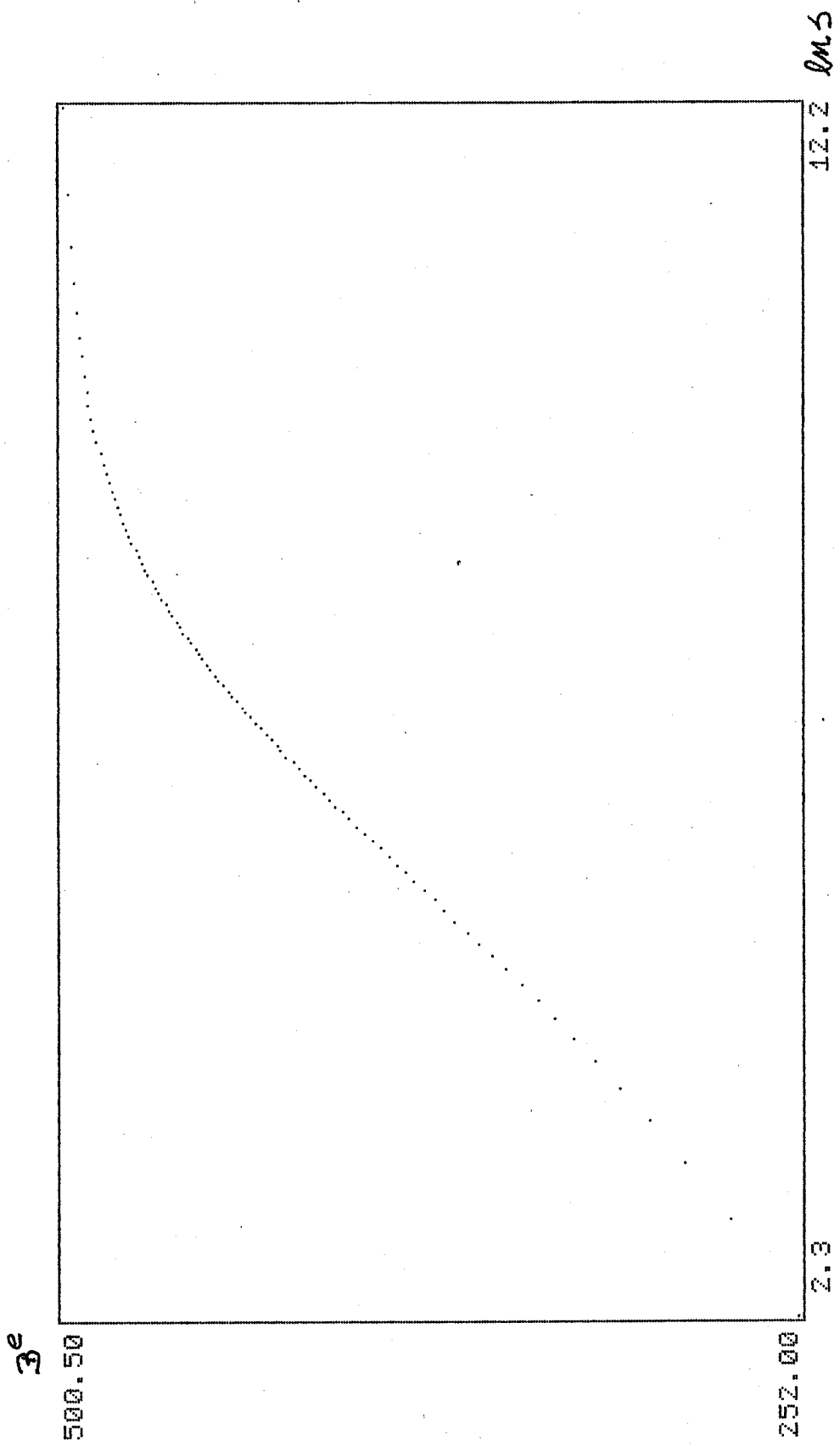
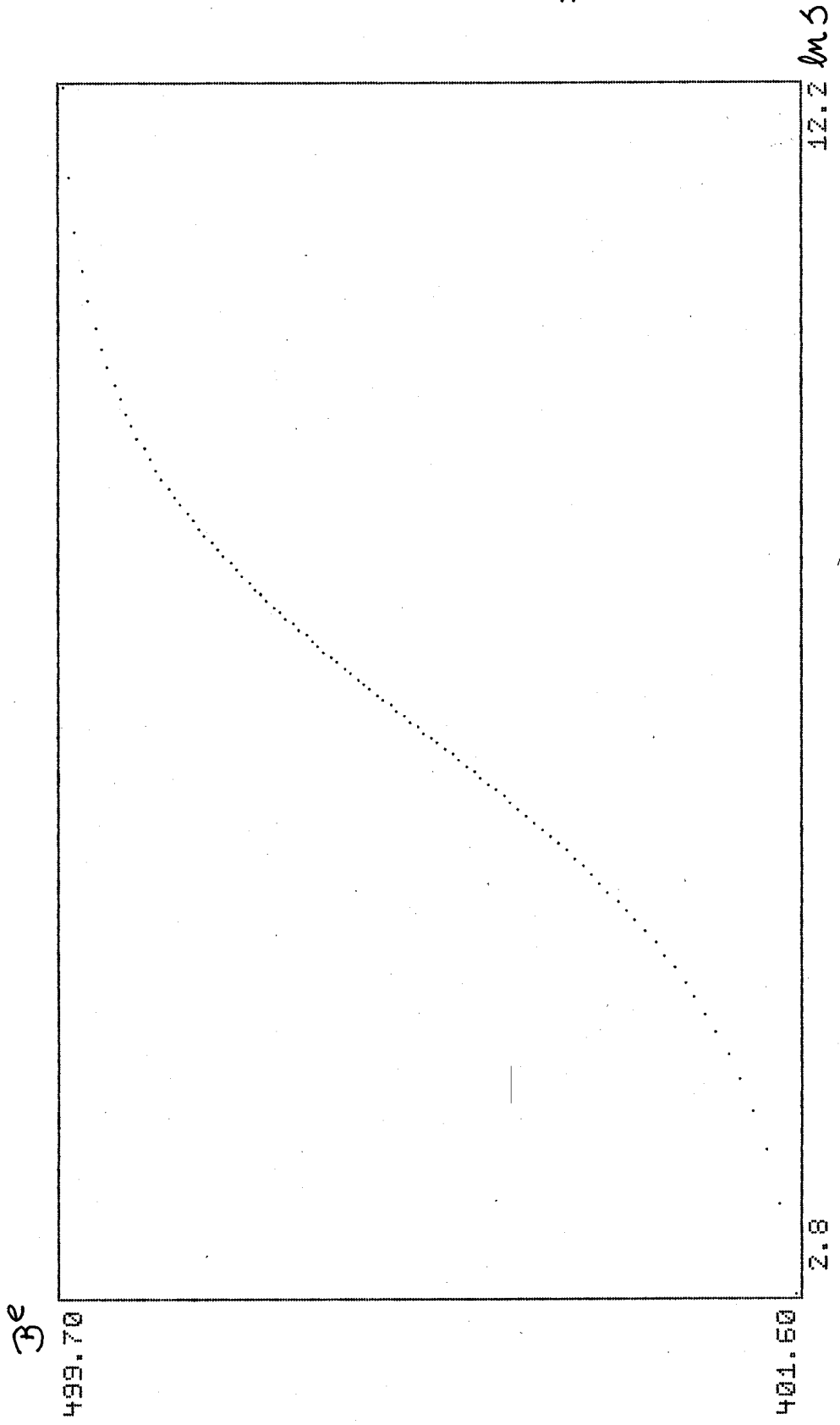


Figura IV.h

B\* (ln s)      2-D

$\alpha = 1$        $\beta = 1000$



## CAPITULO V

## CONCLUSIONES

En este trabajo hemos analizado en primer término la ecuación maestra para un modelo periódico y hemos justificado el comportamiento asintótico expresado en (II.25) y (II.26) utilizado por Derrida<sup>2</sup>.

Luego expresamos en general la aproximación de medio efectivo para una red n-D obteniendo la componente de la función de Green, correspondiente a sitios vecinos cercanos, del problema con una impureza como función de las componentes de la función de Green del problema uniforme.

Por último encontramos expresiones para las componentes de la función de Green de una red bidimensional uniforme y estudiamos la aproximación de medio efectivo comparando con el caso unidimensional. Aquí encontramos una diferencia cualitativa en el comportamiento asintótico, para valores suficientemente pequeños del parámetro de Laplace  $s$ , de la constante de medio efectivo  $B^*$  entre los casos unidimensional y bidimensional.

APENDICE



```

C*****
C*PROGRAMA PRINCIPAL PARA EL CALCULO DE LA CONSTANTE DE SALTO DE MEDIO
C EFECTIVO PARA EL PROBLEMA DE DIFUSION EN UNA RED 1/2-D CON DESORDEN*
C
C
C

```

```

DIMENSION ALNS(10000), BE(10000)
BYTE NN(11)
DATA NN/11*' '/
NN( 1)= 'A'
NN( 2)= 'M'
NN( 3)= 'E'
NN( 5)= 'D'
NN( 9)= 'D'
NN(10)= 'A'
NN(11)= 'T'
WRITE (1,100)
1 WRITE (1,200)
READ (1,300) K
IF (K .EQ. 1) GOTO 2
IF (K .EQ. 2) GOTO 2
GOTO 1

2 WRITE (1,400)
READ (1,500) ALFA
WRITE (1,600)
READ (1,500) BETA
IF (ALFA .LT. 0.) GOTO 2
IF (BETA .LT. 0.) GOTO 2
IF (BETA .LE. ALFA) GOTO 2
WRITE (1,700)
READ (1,800) NN(6),NN(7)
WRITE (1,900)
READ (1,300) NTOL
WRITE (1,1000)
READ (1,300) N
PI= 3.1415927
AK= 1.
Z= 1./FLOAT(N)
M= N - 1
C*BARRIDO UNIFORME DEL INTERVALO DE AK DE 1 A 0 EN PASOS DE Z
DO 8 I= 1, M
AK= AK - Z
IF (K .EQ. 1) GOTO 3
DELTA= 1./PI * (1.-AK) * ELIC1(AK) - 0.5

```

```

                                                    GOTO 4
3  DELTA= SQRT (1.-AK) - 1.
4  IFLAG= 0.
   A= ALFA
   B= BETA
C*CALCULO DE 'BE' MEDIANTE MRGFLS
  CALL MRGFLS (DELTA,A,B,1.E-4,1.E-7,NTOL,IFLAG)
  GOTO (5,6,2,2), IFLAG
5  BE(I)= (B+A)/2.
                                                    GOTO 7
6  BE(I)= A
7  S = 4.* BE(I) * (1./AK-1.)
   ALNS(I)= ALOG (S)
C*IMPRESION TEMPORAL DE I, S, ALNS(I), BE(I), IFLAG
  WRITE (1,1100) I, S, ALNS(I), BE(I), IFLAG
8  CONTINUE
C*GRABACION DE LOS DATOS EN EL DISCO
   IF (K .EQ. 1)
                                                    GOTO 9
   NN( 4)= '2'
                                                    GOTO 10
9  NN( 4)= '1'
10 CALL OPEN (8,NN,2)
   WRITE (8,1200) (ALNS(I),BE(I), I=1,M)
   ENDFILE 8
C*FINALIZACION
  WRITE (1,1300)
  READ  (1,300) J
  IF (J .GT. 0)
                                                    GOTO 1
  WRITE (1,1400)
100 FORMAT (15X,'CALCULO DE LA CONSTANTE DE SALTO EFECTIVA BE(S)'/
1      14X,'PROBLEMA DE DIFUSION EN UNA RED 1/2-D CON DESORDEN'/
2      15X,'          ***** P.PURY - 7/86*****          '//////)
200 FORMAT (1X,'ESCOJA LA DIMENSION DEL SISTEMA',4X,
1      , '1-D= 1, 2-D= 2  ')
300 FORMAT (I5)
400 FORMAT (1X,'ESCOJA LOS EXTREMOS DEL INTERVALO QUE ACOTAN BE'/
1      1X,'ALFA= ')
500 FORMAT (E14.0)
600 FORMAT (1X,'BETA= ')
700 FORMAT (1X,'ESCOJA NOMBRE DEL ARCHIVO DE DATOS (2 CARACT.) ')
800 FORMAT (2A1)
900 FORMAT (1X,'ESCOJA NRO. MAXIMO DE ITERACIONES PARA MRGFLS ')
1000 FORMAT (1X,'ESCOJA NUMERO DE PUNTOS A GRAFICAR ')
1100 FORMAT (1X,'I=',I5,4X,'S= ',E11.5,4X,'ALNS= ',E11.5,4X,'BE= ',

```

```

1          ,E11.5,5X,'IFLAG= ',I1/)
1200  FORMAT (1X,E10.4,1X,E10.4)
1300  FORMAT (1X,'DESEA CONTINUAR?',4X,'SI= 1, NO=0 '/')
1400  FORMAT (1X,'FIN')
      END

C
C          *IFLAG= 1          CONVERGENCIA EN XTOL .LT. .5E-4
C          *IFLAG= 2          CONVERGENCIA EN FTOL .LT. 1.E-7
C*****

C*****
C* CALCULO DE LA INTEGRAL ELIPTICA DE PRIMER TIPO MEDIANTE APROXIMACION
C  POLINOMICA CON ERROR MENOR QUE 3.E-5
C          **P.PURY - 7/86**
      FUNCTION ELIC1(AK)
      AM= AK**2.
      FM= 1.- AM
      IF(FM) 10,10,20
10  WRITE(1,100)
100  FORMAT(1X,'VALOR NO PERMITIDO DEL ARGUMENTO EN ELIC1')
      ELIC1= 0
      RETURN
20  B1= 1.3862944 + 0.1119723 * FM + 0.0725296 * FM**2.
      B2= 0.5      + 0.1213478 * FM + 0.0288729 * FM**2.
      ELIC1= B1 + B2 * ALOG(1/FM)
      RETURN
      END
C*****

```

```

C*****
C          **ALGORITMO REGULA FALSI MODIFICADA**
C          *(CONTE - BOOR, ANALISIS NUMERICO, CAP.2)*
C          **P.PURY - 7/86**
C
      SUBROUTINE MRGFLS (D,A,B,XTOL,FTOL,NTOL,IFLAG)
C*DEFINICION DE LA FUNCION CUYOS CEROS CORRESPONDEN A LOS VALORES DE BE
      F(X)= ALOG(((1.+D)*X-D*BETA)/((1.+D)*X-D*ALFA))+(BETA-ALFA)*D/X
      ALFA= A
      BETA= B
      IFLAG= 1
      FA= F(A)
      SIGNFA= SIGN (1.,FA)
      FB= F(B)
C*VERIFICAR CAMBIO DE SIGNO
      IF (SIGNFA*FB .LE. 0.)          GOTO 1
      IFLAG= 3
      WRITE (1,100)
100  FORMAT (1X,'F(BE) TIENE EL MISMO SIGNO EN AMBOS EXTREMOS'////)
      RETURN
1   W= A
      FW= FA
      DO 4 N= 1,NTOL
C*VERIFICAR INTERVALO SUFICIENTEMENTE PEQUENO
      IF (ABS(B-A)/2. .LT. XTOL)     RETURN
C*VERIFICAR VALOR FUNCIONAL SUFICIENTEMENTE PEQUENO
      IF (ABS(FW) .GT. FTOL)         GOTO 2
      A= W
      B= W
      IFLAG= 2
      RETURN
2   W= (FA*B- FB*A) / (FA-FB)
      PREVFW= SIGN(1.,FW)
C*EVALUACION DE F(W)
      FW= F(W)
C*CAMBIO A UN NUEVO INTERVALO
      IF (SIGNFA*FW .LT. 0.)         GOTO 3
      A= W
      FA= FW
      IF (FW*PREVFW .GT. 0.)         FB= FB/2.
      GOTO 4
3   B=W
      FB= FW

```

```
IF (FW*PREVFW .GT. 0.)          FA= FA/2.
4  CONTINUE
   IFLAG= 4
   WRITE (1,200) NTOL
200 FORMAT (1X,'NO CONVERGE MRGFLS EN',I5,' ITERACIONES'////)
      RETURN

END

C*LA RUTINA MODIFICA LOS ARGUMENTOS A,B,IFLAG
C
C          *IFLAG= 1          CONVERGE EN XTOL
C          *IFLAG= 2          CONVERGE EN FTOL
C          *IFLAG= 3          IGUAL SIGNO DE F(BE) EN LOS EXTREMOS
C          *IFLAG= 4          NO CONVERGE EN NTOL
C*****
```

## REFERENCIAS

- 1.- P.W.Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958)
- 2.- B.Derrida, J. Stat. Phys. 31, 433 (1983)
- 3.- N.G.Van Kampen, "Stochastic Processes in Physics and Chemistry", North-Holland (1981)
- 4.- J.Rey Pastor, P.Pi Calleja y C.A.Trejo, "Análisis Matemático", Kapelusz (1965) Tomo II, 63-7
- 5.- S.Alexander, J.Bernasconi, W.R.Schneider y R.Orbach, Rev. Mod. Phys. 53, 175 (1981)
- 6.- D.P.Prato, Tesis Doctoral Univ. of Massachusetts, Amherst, set. 1985, cap. III
- 7.- T.Odagaki y M.Lax, Phys. Rev. B 24, 5284 (1981)
- 8.- I.S.Gradshteyn y I.M.Ryzhik, "Table of Integrals, Series and Products", Academic Press (1965)
- 9.- M.Abramowitz y I.Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover (1972)
- 10.- J.Mathews y R.Walker, "Mathematical Methods of Physics", Addison-Wesley (1969), cap. III
- 11.- Grobner y Hofreiter, "Integraltafel", Springer-Verlag (1966)