

SISTEMAS DESORDENADOS ANISOTRÓPICOS EN 2-D: SIMULACIÓN POR MONTE-CARLO Y APROXIMACIÓN DE MEDIO EFECTIVO.

E. R. Reyes*, M. O. Cáceres†, S. Bustingorry y G. L. Insua

Departamento de Física, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400, 8300, Neuquén.

†Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, CNEA y Universidad Nacional de Cuyo, 8400, Bariloche
e-mail: reyes@uncoma.edu.ar

En este trabajo presentamos un estudio de los procesos de transporte en medios desordenados que presentan anisotropía, en particular nos interesa el comportamiento del coeficiente de difusión en una red cuadrada con interacción a vecinos más cercanos, en la que planteamos un problema percolativo por ligaduras. La anisotropía del sistema es modelada a través de diferentes probabilidades de ocupación de los enlaces en cada dirección. El problema fue atacado mediante una simulación por Monte Carlo y la utilización de una generalización de la técnica de Medio Efectivo desarrollada recientemente. Se ha obtenido el comportamiento en frecuencia para el coeficiente de difusión. A valores intermedios de ω , se observa que $\text{Re}[D(\omega)] \propto \omega^s$, con $0 \leq s \leq 1$. A partir del comportamiento del coeficiente de difusión en la red cuadrada (en el límite $\omega = 0$) se determina el umbral percolativo para todo el rango de probabilidades de ocupación. Los resultados obtenidos muestran un buen acuerdo entre la simulación y los resultados teóricos.

We have presented a study of the transport processes in disordered systems with anisotropy; particularly we are interested in the behavior of the diffusion coefficient in a 2D lattice, with a percolative distribution of the bonds. The anisotropy is modeled considering different bond distribution functions in each direction. The problem was solved with Monte Carlo simulations and a generalization of the Effective Medium Approximation. We have obtained the frequency behavior of the diffusion coefficient. At intermediate values of ω we observe that $\text{Re}[D(\omega)] \propto \omega^s$, with $0 \leq s \leq 1$. It is possible to obtain the percolative threshold in the overall range of occupation probability, using the behavior of $D(\omega=0)$. The results obtained shows a good agreement between simulation and theoretical approaches.

I. INTRODUCCIÓN

En este trabajo planteamos el estudio de la difusión en sistemas desordenados que presentan anisotropía. Algunos ejemplos típicos en los que se presenta esta situación son: (i) el estudio de la conductividad eléctrica en una delgada capa de material de crecimiento, en el cual la conductancia a lo largo del eje de crecimiento es varios órdenes de magnitud diferente que la del plano basal, (ii) propiedades dieléctricas de las rocas que constituyen los reservorios de petróleo.

En particular en la industria petrolera, se miden las propiedades dieléctricas de las rocas de reservorio para determinar el contenido de petróleo. En este contexto, la saturación de agua en areniscas estratificadas puede ser relacionada con la conductividad eléctrica medida con herramientas de perforación, que operan en un rango amplio de frecuencias que puede llegar hasta el gigahertz. Estas herramientas en frecuencia son usadas para medir la conductividad en corriente continua (*dc*), removiendo los datos de alta frecuencia. Sin embargo los datos completos en todo el rango de frecuencias pueden ser una fuente adicional de información para las mediciones de saturación de agua⁽¹⁾.

El principal problema para modelar la conductividad eléctrica en los sistemas que hemos mencionado, proviene del hecho que las rocas porosas

que sirven de reservorio generalmente muestran una fuerte anisotropía. Esta anisotropía puede ser causada por factores geométricos, o de conductividad intrínseca. Este hecho ha provocado un aumento en el interés en el estudio de la conductividad en rocas de formación que presentan anisotropías, debido a su influencia sobre las medidas obtenidas por herramientas de perfilaje ya sea de resistividad o de inducción. Es por eso que la correcta evaluación de la conductividad de estas formaciones es muy importante para el cálculo de la saturación efectiva de hidrocarburos. En este contexto se han realizado esfuerzos en una mejor descripción de estos efectos de la anisotropía⁽²⁾.

Por otra parte las propiedades de conductividad *ac* del $\text{La}_2\text{NiO}_{4+\delta}$ han sido extensamente estudiadas en forma experimental⁽³⁾. Las principales características de este sistema pueden ser resumidas así: (i) pertenece a una clase de estructuras casi bi-dimensionales toda vez que la conductividad en el plano basal de NiO_2 es más grande que la del eje ortogonal de crecimiento del cristal, en alrededor de dos órdenes de magnitud, (ii) el transporte involucra estados de Anderson localizados débilmente.

En este trabajo extendemos la Aproximación de Medio Efectivo (AME) de forma tal que nos permita considerar un sistema desordenado que presenta anisotropía. La teoría nos permite calcular la respuesta en frecuencia de la conductividad eléctrica para distintos

* Autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

modelos de desorden y diversas condiciones de anisotropía.

El primer esfuerzo para tratar este tipo de sistemas fue realizado por Bernasconi⁽⁴⁾, quién calculó la conductividad dc , en el marco de una generalización de la teoría de Kirkpatrick⁽⁵⁾, para redes cuadradas y cúbicas simples. El siguiente trabajo relacionado con una AME en este tipo de sistemas anisotrópicos fue realizado por Toledo et al⁽⁶⁾, sobre la base del mismo esquema en redes triangulares en dos y tres dimensiones, para la modelización del transporte en medios porosos anisotrópicos.

Sin pérdida de generalidad, en este trabajo restringimos el problema a una red cuadrada simple que presenta desorden, el cual es representado por una ocupación aleatoria de ligaduras entre sitios vecinos más cercanos. La anisotropía es introducida considerando que cada dirección en la red (a las cuáles llamaremos x e y) posee una función de distribución de ligaduras diferente. Para estudiar las propiedades de transporte de este sistema comenzamos considerando una caminata aleatoria (CA) sobre un medio anisotrópico en $2D^{(7)(8)}$, la cuál puede ser representada introduciendo una Ecuación Maestra (EM) de un paso, con índices discretos (m, n) sobre los ejes (y, x) respectivamente.

II. La AME anisotrópica en dos dimensiones

II.1 El caso anisotrópico ordenado

Consideremos una CA sobre un medio anisotrópico, tal que la partícula está gobernada por una EM

$$\frac{\partial}{\partial t} P(s, t | s_0, 0) = -\Gamma_s P(s, t | s_0, 0) + \sum_{s'(\neq s)} W_{s',s} P(s', t | s_0, 0) \quad (1)$$

aquí s representa un vector arbitrario n -dimensional sobre una celda hiper-cúbica, $\Gamma_s = \sum_{s'(\neq s)} W_{s',s}$ y $W_{s',s}$ es la probabilidad de transición por saltos del sitio s' al s . Introduciendo el *Hamiltoniano* de la CA

$$H = - \sum_s |s\rangle \Gamma_s \langle s| + \sum_{s',s(\neq)} |s\rangle W_{s',s} \langle s'| \quad (2)$$

la solución formal de (1) en la representación de Laplace (es decir: $t \rightarrow u$) es

$$P(s, u | s_0) = \langle s | (u - H)^{-1} | s_0 \rangle \equiv G_{s,s_0} \quad (3)$$

donde G_{s,s_0} representa la función de Green del sistema.

Para nuestro problema bi-dimensional con transiciones solo entre sitios vecinos más cercanos, (1) se puede escribir

$$P_{m,n} = D_{m+1} P_{m+1,n} + C_{m-1} P_{m-1,n} + A_{n+1} P_{m,n+1} + B_{n-1} P_{m,n-1} - (D_m + C_m + A_n + B_n) P_{m,n} \quad (4)$$

Aquí $P_{m,n}(t)$ es la probabilidad de encontrar una partícula en el sitio (m, n) y al tiempo t , con la condición que al tiempo inicial $P_{m,n}(t_0 = 0) = \delta_{m,m_0} \delta_{n,n_0}$. Las probabilidades de salto en la dirección y son C_m, D_m

(arriba y abajo respectivamente) y en la dirección x las correspondientes probabilidades son A_n, B_n (izquierda y derecha respectivamente).

Consideremos ahora el caso anisotrópico pero homogéneo en cada dirección de (4), o lo que es equivalente: $\{C_m, D_m, A_n, B_n\} \rightarrow \{D, C, A, B\}$. Siguiendo el esquema de la AME⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾, introducimos una perturbación V en el *Hamiltoniano* anisotrópico homogéneo H_0 asociado a (4), por lo tanto el *Hamiltoniano* de la CA para una impureza toma la forma

$$H_{Total} = H_0 + V \quad (5)$$

donde H_0 toma la forma

$$H_0 = D |m, n\rangle \langle m+1, n| + C |m, n\rangle \langle m-1, n| + A |m, n\rangle \langle m, n+1| + B |m, n\rangle \langle m, n-1| - (D + C + A + B) |m, n\rangle \langle m, n| \quad (6)$$

Si no hay bias en ninguna de las dos direcciones podemos considerar $A = B \equiv w_x^0$ y $D = C \equiv w_y^0$.

El *Hamiltoniano* de la perturbación V puede ser escrito en forma más compacta con las siguientes definiciones $b = w_{y(x)}^0 - w_{ab} = b_1 = b_4$ y $-b = b_2 = b_3$, donde $w_{y(x)}^0$ representa la constante de salto correspondiente a una impureza localizada en la dirección $y(x)$. Hay que notar que esta constante de salto representa un factor de escala de la conductividad intrínseca en cada una de las dos direcciones consideradas. Finalmente V adquiere la forma

$$V = V_1 + V_2 + V_3 + V_4 = b_1 \delta_{\alpha\alpha} \delta_{\beta\alpha} + b_2 \delta_{\alpha\alpha} \delta_{\beta\beta} + b_3 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\alpha} + b_4 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\beta\beta}$$

donde $\delta_{\alpha\beta}$ es la delta de Kronecker.

La función de Green del problema de una impureza, G_{s,s_0}^i , puede ser escrita en términos de la función de Green anisotrópica *no perturbada* $G_{s,s_0}^0 = \langle s | (u - H_0)^{-1} | s_0 \rangle$.

II.11 El caso anisotrópico aleatorio

Cuando el conjunto $S = \{A_n, B_n, C_m, D_m\}$ de probabilidades de salto entre sitios vecinos más cercanos en (4), es un conjunto de variables aleatorias independientes, idénticamente distribuidas, estamos en presencia del modelo usual de caminata aleatoria isotrópica en un medio aleatorio.

Adoptemos la notación $P_{m,n} \equiv P_{m,n}(t, S)$, como la probabilidad condicional de encontrar al caminante al tiempo t , para una configuración particular del desorden S , y con la condición de haber estado en el sitio $(m=0, n=0)$ al tiempo $t_0 = 0$.

La AME consiste en calcular una probabilidad de transición efectiva, asumiendo que la función de Green para una impureza (promediada sobre el desorden) es igual a la función de Green homogénea coherente. De igual manera en nuestro problema general anisotrópico, la función de Green de una impureza (en nuestro caso

perturbaremos una ligadura) será igual a la función de Green anisotrópica coherente no perturbada.

En particular, y debido a que estamos estudiando un problema en 2D, la AME se reducirá al planteo de dos ecuaciones autoconsistentes, para cada dirección x e y respectivamente, en las dos probabilidades de transición coherentes desconocidas w_{cx} y w_{cy}

$$\left\langle G_{y,y_0}^i(u, w_{cy}, w_y^0, w_y) \right\rangle_{\Pi(w_y)} = G_{y,y_0}^0(u, w_{cy}, w_y^0) \quad (7)$$

$$\left\langle G_{x,x_0}^i(u, w_{cx}, w_x^0, w_x) \right\rangle_{\Pi(w_x)} = G_{x,x_0}^0(u, w_{cx}, w_x^0)$$

donde G_{s,s_0}^i y G_{s,s_0}^0 son las funciones de Green

anisotrópicas para una impureza y no perturbada, respectivamente.

Los promedios deben ser calculados sobre $\Pi(w_y)$ y $\Pi(w_x)$, que son las medidas de probabilidad sobre las variables aleatorias $w_{y(x)}$. Notar que la función de Green de una impureza está construida en general con una *ligadura impura* arbitraria ab localizada ya sea en la dirección y o x , entonces $w_{y(x)}$ representa una variable aleatoria en la dirección de interés.

Como nuestro problema se reduce a interacciones a vecinos más cercanos, entonces las expresiones que necesitamos de las funciones de Green (ver Apéndice) se reducen a

$$G_{(1,0);(0,0)}^i = \frac{G_{(1,0);(0,0)}^0 + (w_{cy} - w_{(1,0);(0,0)}) \left[(G_{(1,0);(0,0)}^0)^2 - (G_{(0,0);(0,0)}^0)^2 \right]}{1 + 2(w_{cy} - w_{(1,0);(0,0)}) (G_{(1,0);(0,0)}^0 - G_{(0,0);(0,0)}^0)} \quad (8)$$

$$G_{(0,1);(0,0)}^i = \frac{G_{(0,1);(0,0)}^0 + (w_{cx} - w_{(0,1);(0,0)}) \left[(G_{(0,1);(0,0)}^0)^2 - (G_{(0,0);(0,0)}^0)^2 \right]}{1 + 2(w_{cx} - w_{(0,1);(0,0)}) (G_{(0,1);(0,0)}^0 - G_{(0,0);(0,0)}^0)}$$

usando (7) y (8) las condiciones autoconsistentes quedan

$$\left\langle \frac{w_{cy} - w_{(1,0);(0,0)}}{1 + 2(w_{cy} - w_{(1,0);(0,0)}) (G_{(1,0);(0,0)}^0 - G_{(0,0);(0,0)}^0)} \right\rangle_{\Pi(w_y)} = 0 \quad (9)$$

$$\left\langle \frac{w_{cx} - w_{(0,1);(0,0)}}{1 + 2(w_{cx} - w_{(0,1);(0,0)}) (G_{(0,1);(0,0)}^0 - G_{(0,0);(0,0)}^0)} \right\rangle_{\Pi(w_x)} = 0$$

es importante mencionar que el presente formalismo puede ser extendido al caso en que $A_n \neq B_n$ y $C_m \neq D_m$ (es decir en presencia de bias), sin embargo este problema no será tratado aquí.

Siguiendo la teoría de respuesta lineal⁽⁹⁾ el coeficiente de difusión generalizado $D(u)$, en el contexto de la AME anisotrópica, está dado por

$$D_{y(x)}(u) = a^2 w_{cy(x)}(u) \quad (10)$$

donde a es la constante de red, que por simplicidad tomamos como unitaria ($a = 1$). Entonces la teoría de transporte estocástico predice una conductividad dependiente de la frecuencia, en las direcciones y o x respectivamente, proporcional a la constante de salto coherente $w_{cy(x)}(u)$

$$\sigma_{y(x)}(\omega) = \frac{ne^2}{kT} D_{y(x)}(u = i\omega) \quad (11)$$

Esta expresión es la relación de Einstein generalizada en medios anisotrópicos. Por lo tanto las propiedades dieléctricas de nuestro sistema anisotrópico, en cada

dirección, pueden ser estudiadas considerando las partes real e imaginaria de (11).

III. Desorden anisotrópico

Consideremos el caso en que las ligaduras desordenadas en la dirección x e y están distribuidas siguiendo un modelo percolativo. Por lo tanto una ligadura en la dirección x de la red puede ser conductora con probabilidad p_x o puede ser aislante con probabilidad $1-p_x$ (análogamente con la dirección y), es decir que las medidas de probabilidad están dadas por

$$\Pi(w_x) = p_x \delta(w_x - w_x^0) + (1 - p_x) \delta(w_x) \quad (12)$$

$$\Pi(w_y) = p_y \delta(w_y - w_y^0) + (1 - p_y) \delta(w_y)$$

La solución de nuestro problema consiste en resolver el sistema de ecuaciones (9) utilizando las funciones de distribución dadas en (12), obteniendo de esta manera dos ecuaciones autoconsistentes para el cálculo de w_{cx} y w_{cy}

$$p_x w_x^0 - w_{cx} + 2(w_{cx} w_x^0 - w_{cx}^2) (G_{(0,1);(0,0)}^0(u) - G_{(0,0);(0,0)}^0(u)) = 0$$

$$p_y w_y^0 - w_{cy} + 2(w_{cy} w_y^0 - w_{cy}^2) (G_{(1,0);(0,0)}^0(u) - G_{(0,0);(0,0)}^0(u)) = 0 \quad (13)$$

La respuesta en frecuencia se obtiene resolviendo estas ecuaciones autoconsistentes, utilizando las expresiones explícitas para las funciones de Green homogéneas dadas en el Apéndice.

En la Figura 1 mostramos el comportamiento de la parte real del coeficiente de difusión generalizado en la dirección y , para distintos valores de los parámetros $w_{y(x)}^0$ para un amplio rango de frecuencias.

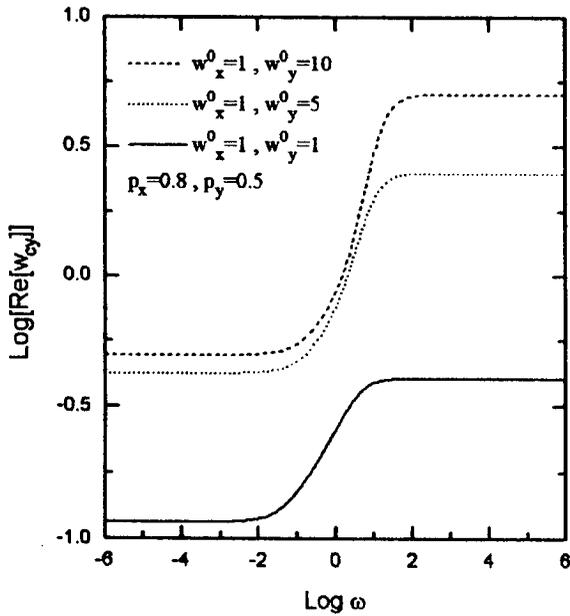


Figura 1: Parte real del coeficiente de difusión generalizado (en la dirección y) en función de la frecuencia.

En la región de bajas frecuencias observamos que la curva es aplastada y la conductividad está dada por su valor en corriente continua (dc). En la región de altas frecuencias podemos observar una saturación de $\text{Re}[D_y(\omega)]$, mientras que en el rango de frecuencias intermedias, la conductividad ac se comporta siguiendo aproximadamente una ley de potencias $\sigma_y(\omega) \propto \omega^s$ con $0 < s < 1$. Este comportamiento es otro ejemplo de la llamada *respuesta dieléctrica universal*.

La parte imaginaria de $\sigma(\omega)$ se muestra en la Figura 2, en la cual es posible apreciar el pico característico de estos diagramas y la posterior relajación a cero a altas frecuencias. Además es posible observar la dependencia lineal de $\text{Im}[D_y(\omega)]$ en función de ω a bajas frecuencias.

Podemos evaluar analíticamente el límite $\omega \rightarrow \infty$ utilizando desarrollos en serie en las funciones de Green correspondientes que aparecen en (13). Con esto es posible obtener

$$D_{y(x)}(\omega) \cong p_{y(x)} w_{y(x)}^0 + i \frac{2p_{y(x)}(1-p_{y(x)})(w_{y(x)}^0)^2}{\omega}$$

Puede verse que en este límite, la parte real del coeficiente de difusión generalizado para una dirección satura, dependiendo sólo de los parámetros asociados a

dicha dirección. Esta dependencia puede ser observada en las Figuras 1 y 3.

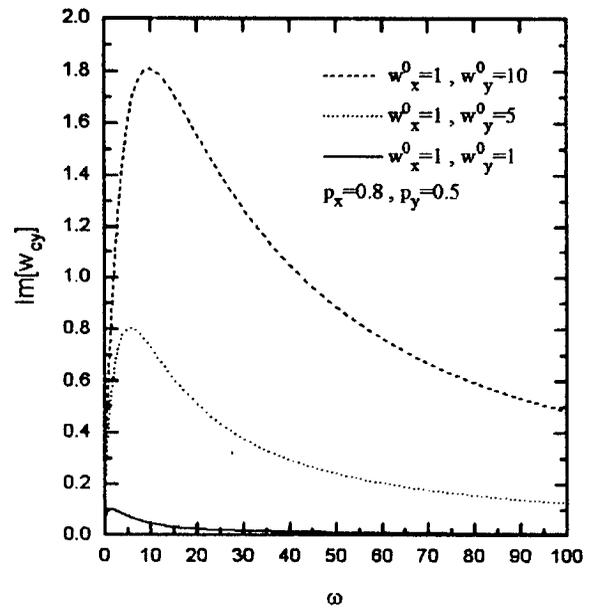


Figura 2: Parte imaginaria del coeficiente de difusión generalizado (en la dirección y) en función de la frecuencia, para los mismos valores de los parámetros considerados en la Figura 1.

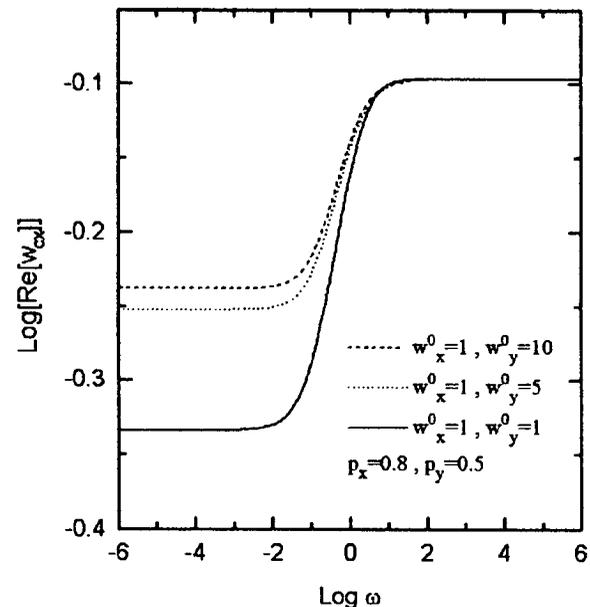


Figura 3: Parte real del coeficiente de difusión generalizado (en la dirección x) en función de la frecuencia. Se puede observar que el límite a frecuencias altas es independiente de w_y^0 .

En este límite la constante de difusión generalizada anisotrópica es la misma que para el caso unidimensional sin bias⁽⁹⁾. Este hecho puede ser entendido heurísticamente debido a que para tiempos cortos ($u \rightarrow \infty$) el comportamiento de $D_{y(x)}(\omega)$ es

afectado fundamentalmente por las ligaduras en la dirección desordenada, de tal manera que la dispersión en la dirección y sólo depende de w_y^0 y no de la constante de salto en la dirección perpendicular w_x^0 .

Podemos estudiar más detalladamente el comportamiento a baja frecuencia de $D_{y(x)}(\omega)$ a partir de desarrollos en serie en $u \approx 0$. Con esto es posible escribir la condición de autoconsistencia (13) de la siguiente forma

$$p_y w_y^0 - w_{cy} + (w_{cy}^2 - w_{cy} w_y^0) \left(\frac{2 \arctg \left(\sqrt{w_{cy} / w_x^0} \right)}{\pi w_{cy}} \right) - \frac{\pi \omega}{2 \sqrt{16 w_{cy} w_x^0}} + i (w_{cy}^2 - w_{cy} w_y^0) \sqrt{\frac{\omega}{16 w_{cy} w_x^0}} \left(\ln \omega - \ln \frac{64 w_{cy} w_y^0}{w_{cy} + w_x^0} \right) = 0 \quad (14)$$

Un resultado similar puede obtenerse para la otra dirección. De esta ecuación es claro que cuando $\omega \rightarrow 0$ la parte real de $D_{y(x)}(\omega)$ satura y su parte imaginaria va a cero.

III.1 Límite dc

Otro importante resultado lo constituye el cálculo de la conductividad dc , que corresponde a $u = 0$ en (14). Usando la notación $w_{cx}(u=0) \equiv w_{cx(0)}$ y $w_{cy}(u=0) \equiv w_{cy(0)}$, podemos escribir las ecuaciones autoconsistentes en este límite

$$p_x w_x^0 - w_{cx(0)} = \frac{2}{\pi} (w_x^0 - w_{cx(0)}) \arctg \left(\sqrt{w_{cx(0)} / w_{cy(0)}} \right) \quad (15)$$

$$p_y w_y^0 - w_{cy(0)} = \frac{2}{\pi} (w_y^0 - w_{cy(0)}) \arctg \left(\sqrt{w_{cy(0)} / w_{cx(0)}} \right)$$

Como podemos ver nuestro modelo de percolación anisotrópica tiene similares propiedades (en un sentido amplio) a las de los modelos en redes isotrópicas, sin embargo una de las diferencias fundamentales es que la concentración crítica p_c (umbral percolativo) característica de los modelos isotrópicos, se convierte en una "superficie crítica" en el modelo anisotrópico. Esto se puede ver explícitamente a partir de la condición de percolación para una red cuadrada en $2D^{(11)}$

$$p_y + p_x - 1 = 0 \quad (16)$$

Este límite fue también estudiado mediante simulaciones de Monte Carlo (MC) de una caminata aleatoria sobre una red cuadrada bidimensional. El cálculo consistió en la determinación del coeficiente de difusión en cada una de las dos direcciones en la red a partir de medidas de los recorridos cuadráticos medios en función del tiempo. Para esto se consideró la relación de Einstein $\langle y(x)^2 \rangle \propto D_{y(x)} t$ en el régimen asintótico.

Cuando analizamos una caminata aleatoria discreta desde un punto de vista percolativo debe tenerse en cuenta el comportamiento de esta caminata por debajo

y por encima del umbral percolativo. Cuando se está por debajo de este umbral es característica la presencia de clusters de tamaño finito, de forma tal que a tiempos suficientemente largos el recorrido cuadrático medio satura rápidamente a un valor R_∞^2 , indicando una rápida anulación del coeficiente de difusión. Cuando se trabaja por encima del umbral percolativo se está en presencia de clusters infinitos, lo que a tiempos largos (régimen asintótico) indica un aumento lineal del recorrido cuadrático medio en función del tiempo, y esto a su vez un coeficiente de difusión constante en cada dirección. Para valores de probabilidad cercanos al umbral, el recorrido cuadrático medio muestra un crecimiento de acuerdo a una ley de potencias proporcional a $(p_x + p_y)^u$. Por último puede notarse que el umbral percolativo queda determinado por la anulación de los coeficientes de difusión.

Para estas simulaciones se fijaron las constantes de salto, las cuáles se tomaron iguales para las dos direcciones, y se trabajó en un amplio rango de probabilidades. Se utilizaron redes de 4000×4000 sitios con caminatas de hasta 90000 pasos, promediando sobre 10 caminatas en 300 estructuras diferentes.

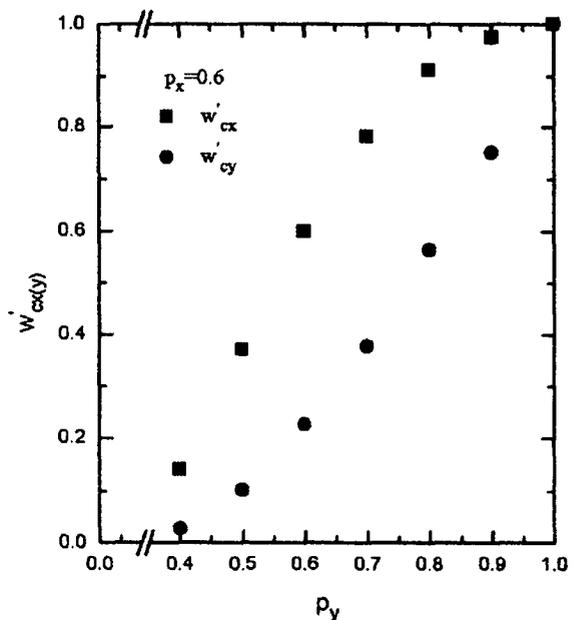


Figura 4: Coeficiente de difusión normalizado $w'_{cx(y)} = w_{cx(y)} / w_{cx(y)}(p_y = 1)$, a $\omega = 0$ obtenido por Monte Carlo. Se observa claramente el umbral percolativo de acuerdo a (16).

En la Figura 4 puede verse el comportamiento del coeficiente de difusión en dc , en cada dirección como una función de las probabilidades de ocupación. Es posible observar claramente el umbral percolativo con la correspondiente anulación de los coeficientes de difusión. Este umbral fue determinado para todo el rango de probabilidades, mostrando un excelente acuerdo con la superficie crítica determinada en la ecuación (16).

El acuerdo entre los resultados obtenidos mediante las simulaciones por MC y la AME es excelente, como

puede observarse en la Figura 5. Además, la anulación del coeficiente de difusión en $p_x = p_y = 0.5$ está en perfecto acuerdo con la concentración crítica (umbral percolativo) para una red cuadrada que presenta isotropía.

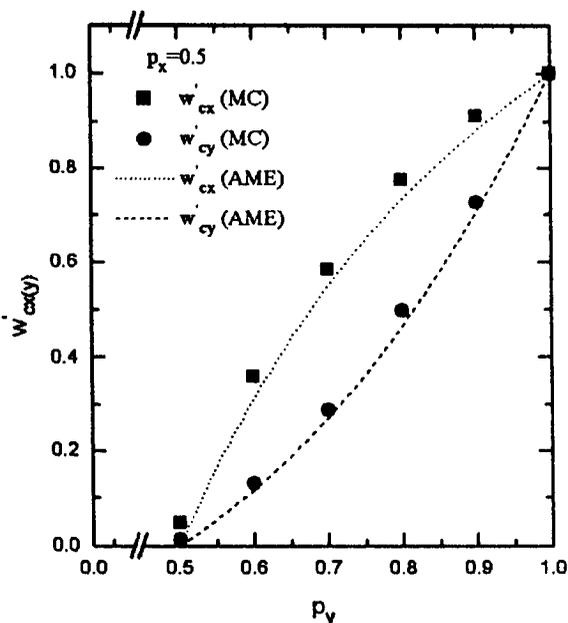


Figura 5: Comparación entre la AME y el Monte Carlo para $w'_{cx(y)}$.

IV. Conclusiones

Los resultados presentados en este trabajo nos brindan un mejor entendimiento del comportamiento en frecuencia de la conductividad en medios desordenados anisotrópicos. Hemos trabajado este problema en el contexto de la bien conocida AME, introduciendo una generalización a esta aproximación que nos lleva a un conjunto de ecuaciones autoconsistentes acopladas, que tienen en cuenta los efectos anisotrópicos sobre la conductividad. Nuestra aproximación es muy general y posibilita el estudio de diferentes modelos de desorden sobre redes en dos y tres dimensiones.

Hemos resuelto el problema de la difusión en una red cuadrada bidimensional con desorden percolativo anisotrópico, considerando distintas probabilidades de ocupación en cada una de las direcciones de la red. En particular obtuvimos dos ecuaciones autoconsistentes en las probabilidades de salto coherentes w_{cy} y w_{cx} , las cuales resolvimos numéricamente. El comportamiento en

frecuencia de $\text{Re}[D_{y(x)}(\omega)]$ muestra una dependencia tipo ley de potencias ($\sigma_{y(x)} \propto \omega^s$ con $0 < s < 1$) llamada *respuesta dieléctrica universal*. El límite dc ($\omega = 0$) también fue resuelto mediante simulaciones por Monte Carlo, habiendo encontrado un muy buen acuerdo entre las mismas y los resultados correspondientes a la AME. El comportamiento del coeficiente de difusión en función de la probabilidad de ocupación para las ligaduras, nos permitió obtener el umbral percolativo. Hemos logrado reproducir con nuestro modelo resultados anteriores⁽⁴⁾⁽⁶⁾ en dc , por lo tanto nuestro esquema permite estudiar todo el rango de frecuencias en forma unificada.

V. Apéndice

Cálculo de las funciones de Green

Teniendo en cuenta que la AME anisotrópica nos ha conducido al planteo de un sistema de ecuaciones auto-consistentes acopladas para las probabilidades de salto desconocidas w_{cx} y w_{cy} (7), debemos calcular las funciones de Green involucradas. Consideremos la Ecuación Maestra bi-dimensional de un paso (4). La situación más general se plantea cuando las probabilidades de salto $\{A_n, B_n, C_m, D_m\}$ son todas diferentes, es decir el caso no-homogéneo con bias. Podemos ver que la función de Green de este problema puede ser mapeada en una más simple con solo dos constantes de salto diferentes

$$Q_{m,n} = \sqrt{C_m D_m} (Q_{m+1,n} + Q_{m-1,n} - 2Q_{m,n}) + \sqrt{A_n B_n} (Q_{m,n+1} + Q_{m,n-1} - 2Q_{m,n}) \quad (17)$$

Entonces la solución general no-homogénea de (4) puede ser escrita en términos de la función de Green de (4.8) así

$$P_{m,n}(t) = Q_{m,n}(t) \left(\frac{A_n}{B_n}\right)^{n/2} \left(\frac{C_m}{D_m}\right)^{m/2} \exp[-(A_n + B_n + C_m + D_m - 2\sqrt{A_n B_n} - 2\sqrt{C_m D_m})t] \quad (18)$$

La función de Green bi-dimensional (sin bias)

Si bien la metodología presentada es muy general, por motivos de simplicidad no consideraremos sistemas con bias, por lo tanto podemos escribir: $A_n = B_n = a$ y $C_m = D_m = d$ en (18). Si utilizamos la representación de Fourier para $Q_{m,n}(t)$, y transformamos (18) en Laplace, la función de Green toma la forma (con la condición inicial $Q_{m,n}(t=0) = \delta_{m,m_0} \delta_{n,n_0}$)

$$Q_{m,n}(t) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dq_1 \int_{-\pi}^{\pi} dq_2 \frac{e^{i[(m-m_0)q_1 + (n-n_0)q_2]}}{u + 2[a(1 - \cos q_2) + d(1 - \cos q_1)]} = G_{(m,n);(m_0,n_0)}^0 \quad (19)$$

Debido a que solo nos interesan las interacciones entre vecinos más cercanos, las funciones de Green involucradas en (9) se reducirán a alguno de los siguientes casos

- (i) $m = 0, n = 0, m_0 = 0, n_0 = 0$

$$G_{(0,0);(0,0)}^0(u) = -\frac{2}{\pi \sqrt{(4a+u)(4d+u)}} K \left(\sqrt{\frac{16ad}{(4a+u)(4d+u)}} \right) \quad (20)$$

(ii) $m = 1, n = 0, m_0 = 0, n_0 = 0$

$$G_{(1,0);(0,0)}^0(u) = \frac{1}{\pi a \sqrt{(4a+u)(4d+u)}} \left\{ (u+4a+4d) \Pi \left(\frac{4a}{u+4d}, \sqrt{\frac{16ad}{(4a+u)(4d+u)}} \right) - 2d K \left(\sqrt{\frac{16ad}{(4a+u)(4d+u)}} \right) \right\} - \frac{1}{2d} \quad (21)$$

(iii) $m = 0, n = 1, m_0 = 0, n_0 = 0$

$$G_{(0,1);(0,0)}^0(u) = \frac{1}{\pi a \sqrt{(4a+u)(4d+u)}} \left\{ (u+4a+4d) \Pi \left(\frac{4d}{u+4a}, \sqrt{\frac{16ad}{(4a+u)(4d+u)}} \right) - 2a K \left(\sqrt{\frac{16ad}{(4a+u)(4d+u)}} \right) \right\} - \frac{1}{2a} \quad (22)$$

donde $K(p)$ es la Integral Elíptica Completa de Primera Especie y $\Pi(v, p) = \Pi(v, p, \frac{\pi}{2})$ es la Integral Elíptica Completa de Tercera Especie. En particular, si hacemos la identificación $a = d$, estamos en presencia del caso isotrópico y la correspondiente función de Green para cada caso toma la forma

(i) $G_{(0,0);(0,0)}^{0(isotropic)} = \frac{1}{2\pi d} \left(1 + \frac{u}{4d} \right) K \left(\sqrt{1 + \frac{u}{4d}} \right)$

(ii) y (iii)

$$G_{(1,0);(0,0)}^{0(isotropic)} = G_{(0,1);(0,0)}^{0(isotropic)} = \frac{1}{2\pi d} K \left(\sqrt{1 + \frac{u}{4d}} \right) - \frac{1}{4d}$$

Las funciones de Green para una impureza

Para resolver (7) necesitamos calcular las funciones de Green para una impureza puesta en las direcciones x e y . En general podemos calcular estas funciones independientemente de la dirección elegida en nuestra red cuadrada simple. Además, debido a que nos interesa el caso general, supondremos que $w_{ab} \neq w_{ba}$ (es decir que podemos generalizar al caso en que haya bias en el sistema).

Como ya lo mencionáramos, la función de Green perturbada está dada por $G^i = (u - H_{Total})^{-1}$, con $H_{Total} = H_0 + V$. La forma explícita para el Hamiltoniano H_0 está dada por (6) y el Hamiltoniano de la perturbación V puede ser escrito como

$$V = V_1 + V_2 + V_3 + V_4 = b_1 \delta_{aa} \delta_{\beta\alpha} + b_2 \delta_{aa} \delta_{\beta\beta} + b_3 \delta_{ab} \delta_{\beta\alpha} + b_4 \delta_{ab} \delta_{\beta\beta} \quad (23)$$

donde $\delta_{\alpha\beta}$ es la delta de Kronecker y definimos

$$\begin{aligned} \tilde{b} &= w_c - w_{ba} = b_1 = -b_3 \\ b &= w_c - w_{ab} = -b_2 = b_4 \end{aligned} \quad (24)$$

Lo que pretendemos es escribir la función de Green para una impureza en función de la correspondiente función de Green coherente. Definamos $H_1 = H_{Total} - V_1$ y la función de Green asociada $G_1 = (u - H_1)^{-1}$, entonces

$$G^i = (u - H_1 - V_1)^{-1} = (u - H_1)^{-1} \left(1 - (u - H_1)^{-1} V_1 \right)^{-1}$$

Operando sobre esta última expresión, podemos escribir

$$G^i - G^i (u - H_1)^{-1} V_1 = G_1 \quad (25)$$

arreglando (25) y utilizando un desarrollo tipo Dyson obtenemos el elemento deseado

$$G^i = G_1 + G_1 V_1 G_1 (1 - G_1 V_1)^{-1}$$

Usando (23) y (24), finalmente queda

$$G_{(a\beta)}^i = G_{1(a\beta)} + G_{1(aa)} \tilde{b} G_{1(a\beta)} (1 - \tilde{b} G_{1(aa)})^{-1} \quad (26)$$

Aplicando el mismo esquema con V_2, V_3 y V_4 , se obtiene la expresión exacta

$$G_{(ab)}^i = \frac{G_{(ab)}^0 + b (G_{(ab)}^0 G_{(ba)}^0 - G_{(aa)}^0 G_{(bb)}^0)}{1 + b (G_{(ba)}^0 - G_{(bb)}^0) + \tilde{b} (G_{(ab)}^0 - G_{(aa)}^0)} \quad (27)$$

es decir que es posible expresar la función de Green anisotrópica de una impureza, en términos de la correspondiente función de Green anisotrópica homogénea. Los coeficientes a, b representan sitios genéricos en nuestra red cuadrada y pueden estar representando que la impureza está colocada en la dirección x o y .

Si en particular solo nos interesa estudiar sistemas para los cuáles no hay bias presente (es decir $w_{ab} = w_{ba}$), vemos que $b = \tilde{b}$ entonces la expresión buscada adopta la forma

$$G_{(ab)}^i = \frac{G_{(ab)}^0 + b (G_{(ab)}^0 G_{(ba)}^0 - G_{(aa)}^0 G_{(bb)}^0)}{1 + b (G_{(ab)}^0 + G_{(ba)}^0 - G_{(bb)}^0 - G_{(aa)}^0)} \quad (28)$$

Referencias

- 1 - C. R. Berg, *Geophysics*, **60**, 1070, (1995).
- 2 - J. M. V. A. Koelman and A. de Kuijper, *Physica A*, **247**, 10 (1997).
- 3 - H. Jhans, D. Kim, R. J. Rasmussen and J. M. Honig, *Phys. Rev. B*, **54**, 11224 (1996).
- 4 - J. Bernasconi, *Phys. Rev. B*, **9**, 4575 (1974).
- 5 - S. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.*, **45**, 574 (1973).
- 6 - P. G. Toledo, H. Ted Davis and L. E. Scriven, *Chem. Eng. Sci.*, **47**, 391 (1992).
- 7 - J. W. Haus and K. W. Kehr, *Phys. Rep.* **150**, 263 (1987).
- 8 - G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk*, North-Holland (1994).
- 9 - T. Odagaki and M. Lax, *Phys. Rev. B*, **24**, 5284 (1981).
- 10 - E. R. Reyes, M. O. Cáceres and P. A. Pury, *Physica A* (1998) (in press).
- 11 - G. Grimmet, *Percolation*, Springer-Verlag (1980).