



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DIFUSION POR TUNELAJE

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE FISICO

P R E S E N T A :

MARIA DE LOURDES VILCHIS QUINTERO

Tesis dirigida por el Dr. Salvador C. Moy Salas



México, D. F.

1994



TESIS CON FALLA DE ORIGEN

44
2eJ.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA DE
MEXICO

M. EN C. VIRGINIA ABRIN BATULE

Jefe de la División de Estudios Profesionales
Facultad de Ciencias
Presente

Los abajo firmantes, comunicamos a Usted, que habiendo revisado el trabajo de Tesis que realiz(ó)ron 1a pasante(s) MARIA DE LOURDES VILCHIS QUINTERO

con número de cuenta 7345401-6 con el Título: "DIFUSION POR TUNELAJE"

Otorgamos nuestro **Voto Aprobatorio** y consideramos que a la brevedad deberá presentar su Examen Profesional para obtener el título de F I S I C O

GRADO	NOMBRE(S)	APELLIDOS COMPLETOS	FIRMA
DR.	SALVADOR	GODOY SALAS	<i>S. Godoy Salas</i>
Director de Tesis	DR. ROSALIO FERNANDO	RODRIGUEZ ZEPEDA	<i>R. Rodríguez Zepeda</i>
DR.	ROLANDO CRISOSTOMO	CASTILLO CABALLERO	<i>R. Castillo Caballero</i>
DR.	MARCOS LEY KOO		<i>M. Leykoo</i>
Suplente	DRA. MARTHA LORENA ZOGAIB	ACHCAR	<i>Loarena Zogaib</i>
Suplente			

A MIS PADRES

A MI ESPOSO

A MIS HIJOS

LOURDES

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Salvador Godoy Salas por la oportunidad brindada al dirigir esta tesis, así como, por su tiempo y apoyo para la realización de la misma.

Agradezco al Dr. Rosalío Fernando Rodríguez Zepeda, al Dr. Rolando Crisóstomo Castillo Caballero, al Dr. Marcos Ley Koo y a la Dra. Martha Lorena Zogaib por la revisión y valiosos comentarios hechos a este trabajo.

Agradezco a mi esposo su valiosa colaboración, para que pudiera dedicar mayor tiempo, a la elaboración de esta tesis.

Deseo agradecer también al Lic. Izmael Herrera Arias, Director del Colegio de Ciencias y Humanidades Azcapotzalco, U.N.A.M, por haberme concedido la licencia que le solicité, para concluir la tesis y efectuar los trámites de titulación.

INDICE

Introducción		vi
Capítulo I	Teoría General de Difusión	
1.1	Flujo de Difusión. Primera ecuación de difusión	1
1.2	Diferentes tipos de coeficientes de difusión	3
1.3	Ley de la conservación de la masa durante la difusión. Segunda ecuación de difusión	6
1.4	Soluciones de la segunda ecuación de difusión	8
Capítulo II	Un modelo cuántico de pasos al azar para la difusión por tunelaje en sólidos cristalinos unidimensionales. Una corrección cuántica a la ley de Fick.	
2.1	Difusión microscópica de amplitudes	12
2.2	Un modelo de camino coherente al azar	17
2.3	La probabilidad en las celdas de la red	19
2.4	Solución analítica en una red infinita	21
2.5	Expresión analítica para la función de Green	23
2.A	Apéndice 2.A Cálculo de la Potencia U^N	26
2.B	Apéndice 2.B Lista de propiedades de los polinomios de Chebyshev	29
Capítulo III	Coefficiente de difusión	
3.1	La corriente de difusión $J(M,N)$	33
3.2	El límite hidrodinámico	35
3.3	Los coeficientes de difusión clásico y cuántico	36

Capítulo IV	Conclusiones	
4.1	Difusión macroscópica	38
4.2	Límites de validez	42
Bibliografía		44

INTRODUCCION

El objeto de la presente tesis es estudiar los coeficientes de difusión de un proceso de difusión por tunelaje. El método de ataque del problema consiste en el uso de un proceso estocástico coherente, llamado " Quantum Random Walk" (QRW). desarrollado hace tres años en la Facultad de Ciencias, por el Dr. Godoy. Dicho proceso se distingue de los métodos clásicos tradicionales en el hecho de que, las ecuaciones dinámicas que describen dicho proceso, siguen el formalismo de la mecánica cuántica, esto es, son ecuaciones para la amplitud de probabilidad. Esta teoría tiene como característica distintiva en su estructura, la presencia de interferencias a la probabilidad.

Haciendo uso de este modelo teórico, se calculó la corriente de probabilidad en cada celda de una red cristalina. A continuación se evaluó dicha corriente en el límite hidrodinámico, este límite describe la etapa final de la relajación de un sistema "ideal" (sin interacciones) a su estado de equilibrio [18]. En este límite, los tiempos son muy largos y la densidad de partículas difiere poco de sus valores en equilibrio. En este límite es donde vale la ley de Fick.

Se encontraron dos coeficientes de difusión. El primero es el resultado de Landauer, el cual se demuestra, proviene de la contribución incoherente de la teoría. Este primer resultado demuestra, incidentalmente, que la ley de Fick y el coeficiente de Landauer son una ley de difusión incoherente (clásica). El segundo coeficiente, sin duda alguna el resultado más importante de nuestro trabajo, proviene de una corrección cuántica a la ley de Fick. Este coeficiente de difusión coherente, tiene la propiedad de ser observable solamente en sólidos de un número pequeño de celdas. En otras palabras, la corrección cuántica a la ley de Fick, solamente tiene sentido físico en materiales mesoscópicos. En un sólido macroscópico, la difusión por tunelaje está controlada por la ecuación clásica de la ley de Fick y su correspondiente coeficiente de difusión de Landauer.

CAPITULO I

TEORIA GENERAL DE DIFUSION

1.1 Flujo de difusión. Primera ecuación de difusión.

Si se llena con mucho cuidado un tubo de ensayo con dos líquidos miscibles de diferente densidad (por ejemplo, el agua y una solución de sulfato de cobre), veremos que la superficie de separación, muy distinguible en el primer momento comienza a disiparse. Poco a poco aparecerá una zona de transición que irá extinguiéndose hasta que todo el líquido quede homogéneo. Este fenómeno tiene lugar en ausencia de agitación convectiva (por ejemplo, realizando el experimento en un tubo capilar fino, a temperatura constante a todo su largo). El proceso transcurre muy lentamente y para unas capas de líquido de unos cuantos centímetros de altura la diferencia en las concentraciones en los extremos del tubo de ensayo será notable aún veinticuatro horas después de haber comenzado el experimento.

Este proceso se llama difusión y consiste en que el sistema tiende espontáneamente a nivelar la concentración. Los átomos de la clase A se desplazan hacia donde hay menos átomos A.

De esa manera, las causas del surgimiento del flujo de difusión están relacionadas con la tendencia del sistema a aumentar la entropía al mezclarse.

La tendencia de las partículas a mezclarse se realiza gracias a la agitación térmica. La transferencia de la sustancia se efectúa mediante el movimiento desordenado de las partículas (átomos, iones y moléculas). Este movimiento tiene lugar igualmente en ausencia de la diferencia de concentración, pero en ese caso no tiene carácter orientado y no origina el surgimiento de un flujo de difusión. Un ejemplo clásico de movimiento aleatorio es el movimiento browniano de una partícula en el líquido. Es importante

subrayar, que el mecanismo de difusión en el cuerpo sólido no coincide con el tipo principal de movimiento térmico de las partículas: las pequeñas oscilaciones de los átomos cerca del estado de equilibrio en el cristal no conllevan a la difusión.

Por esta razón la difusión en los cuerpos sólidos transcurre mucho más despacio que en los líquidos y aún mucho más despacio que en los gases, empezando a estudiarse más tarde. Se considera, que el primer experimento científico para estudiar la difusión en un cuerpo sólido fue realizado en 1896 por el metalúrgico inglés Roberts-Austen, quien dió su nombre a la austenita. Al soldar un disco fino de oro con la brida de un cilindro de plomo puro, de 2.5 cm de largo, manteniendo esa pareja difusiva durante 10 días en un horno a 200° C, observó, que el oro y el plomo se penetraban mutuamente.

Sin embargo, las ecuaciones básicas de la difusión fueron escritas mucho antes, en 1855, por Fick. La idea principal de Fick consistía en que el movimiento difusivo, considerado como penetración de la sustancia disuelta en el disolvente, es totalmente análoga a la penetración del calor al conducto del calor, y para él, desde el punto de vista matemático, pueden utilizarse las mismas ecuaciones que empleaba Fourier en los problemas de la conductibilidad calorífica: «Es suficiente sustituir en la ley de Fourier las palabras *cantidad de calor* por *cantidad de sustancia disuelta* y la palabra *temperatura* por *concentración de la solución*».

De acuerdo con esta analogía, si se supone que la difusión transcurre sólo en dirección del eje x, y que la concentración (c) de soluto no depende de y y z, se puede escribir que la cantidad de soluto que pasa durante el tiempo dt por la superficie S, siendo la concentración c(x), es igual a

$$dq = - D S \frac{\partial c}{\partial x} dt, \quad (1.1)$$

donde el coeficiente de difusión D es una constante que depende de la naturaleza del disolvente y del soluto.

Introduciendo la densidad de flujo de la sustancia $j = dq/Sdt$, obtendremos la primera ecuación de Fick (para la difusión unidimensional en dirección del eje x):

$$j_x = - D \frac{\partial c}{\partial x}. \quad (1.2)$$

El signo menos significa que el flujo está dirigido desde la región con mayor concentración hacia la de menor concentración.

Para el problema tridimensional la primer ecuación de Fick tiene la forma:

$$j = - D \nabla c. \quad (1.3)$$

La dimensión de la densidad de flujo de la sustancia depende de la dimensión de la concentración. Si $[c] = \text{partículas(moles)/m}^3$, entonces $[j] = \text{partículas(moles)/m}^2\text{s}$. La dimensión del coeficiente de difusión es siempre, L^2/t , o sea $[D] = m^2/s$. En la mayoría de los manuales D se expresa en cm^2/s .

1.2 Diferentes tipos de coeficientes de difusión

Según las condiciones en que se efectúa el experimento de difusión se diferencian varios tipos de coeficientes de difusión. Así, cualquier coeficiente de difusión se introduce en concordancia con las Ecs.(1.1) a (1.3), como factor de proporcionalidad entre el flujo y el gradiente de concentración, pero el flujo de difusión que entra en esas ecuaciones es definido de diferente manera. En esta parte examinamos la difusión en ausencia de fuerzas externas.

Al tener contacto dos muestras (A y B) que se disuelven ilimitadamente una en la otra en la fase sólida, se produce una mezcla como consecuencia de la difusión mutua de ambos componentes. Designemos el flujo del i -ésimo componente respecto al observador inmóvil por j_i . Esto puede ser, por ejemplo, el flujo medido respecto al borde de la muestra inmóvil en el sistema de coordenadas del laboratorio. Si la difusión transcurre en dirección del eje x , entonces

$$j_i = - \bar{D} \frac{\partial c_i}{\partial x}, \quad (1.4)$$

donde \bar{D} es el coeficiente de difusión mutua.

Si la dimensión del cristal y su densidad no cambian, en el curso del experimento, $j_A' = - j_B'$, y $dc_A/dx = - dc_B/dx$; en este caso el coeficiente de difusión mutua es el mismo, entre éste en j_A' o en j_B' . Está claro que la magnitud \bar{D} depende tanto de la movilidad de

los componentes , como de la interacción entre ellos. Por eso el coeficiente de difusión mutua es la característica de difusión más difícil de interpretar.

La movilidad de cada componente puede ser caracterizada por el coeficiente de difusión propio que coincide con el de difusión mutua sólo si son iguales los coeficientes propios de ambos componentes. En el caso contrario, cada plano de la red en la región de difusión mutua (en la zona de difusión) se mueve respecto al borde de la muestra en el sistema de coordenadas del laboratorio, en dirección del componente con mayor coeficiente propio: tiene lugar un movimiento de la red como un todo.

Entonces, se puede presentar la relación entre los flujos en el sistema de coordenadas fijo (del laboratorio, j_i) y en movimiento (j_i') como,

$$j_i' = j_i + c_i v_k \quad (1.5)$$

donde v_k es la velocidad del movimiento de la red, y definir a través del flujo el coeficiente de difusión propio del i -ésimo componente (D_i) respecto al observador en movimiento

$$j_i = - D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \quad (1.6)$$

Shewmon [1] propuso una analogía palpable al examinar el caso siguiente. Consideremos que, sobre la superficie del agua corriente de un río se ha vertido el contenido de un frasco de tinta. La tinta se extiende y al mismo tiempo la mancha de tinta es llevada por la corriente. Por esa razón el observador situado en la orilla y el de la lancha que sigue la corriente, verán extenderse la mancha a distinta velocidad. La noción correcta sobre la difusión propia de la tinta se la formará el observador que está en movimiento.

En ausencia de fuerzas externas, si $D_A = D_B$, $v_k = 0$. Entonces, $\tilde{D} = D_A = D_B$.

El coeficiente de difusión propio es también una característica compleja. Refleja la movilidad del componente dado de una manera más clara que el coeficiente de difusión mutua, pero a su vez depende de la interacción de los componentes.

El coeficiente de difusión mutua, al igual que los coeficientes de difusión propios, depende de la composición de la aleación a consecuencia del cambio de la vecindad del átomo que difunde y, por lo tanto, del campo de fuerzas en el que se mueve (excepto en el caso de la solución perfecta). Por eso hay que relacionarlos con una composición

determinada de la solución sólida. En principio, un experimento correcto de difusión mutua, permite hallar la dependencia entre los coeficientes de difusión (\tilde{D} , D_A y D_B) y la concentración.

La movilidad del i -ésimo componente puede caracterizarse tanto por los coeficientes propios, como por los coeficientes de difusión parciales (D_{ik}), que se introducen de la manera siguiente:

$$j_i = - \sum_k D_{ik} \frac{\partial c_k}{\partial x} \quad (1.7)$$

Los coeficientes parciales pueden determinarse tanto para la difusión propia, como para la difusión mutua; en el último caso hay que definirlos a través del flujo j_i determinado en el sistema de coordenadas fijo.

Como se deduce de la definición (1.7), hay que diferenciar los coeficientes parciales diagonales (D_{ii}), que reflejan la influencia del gradiente de concentración del i -ésimo componente sobre su flujo, de los coeficientes no diagonales (D_{ik}), que reflejan la influencia de los gradientes restantes (dc_k/dx).

La comparación de las expresiones (1.6) y (1.7) permite establecer la relación entre los coeficientes propios y parciales:

$$D_i = D_{ii} + \sum_{k \neq i} D_{ik} \frac{\partial c_k / \partial x}{\partial c_i / \partial x}$$

En un sistema binario $dc_A/dx = -dc_B/dx$, y $D_A = D_{AA} - D_{AB}$.

Así pues, si todos los D_{ik} son pequeños, entonces $D_i = D_{ii}$, por eso muy a menudo los coeficientes propios se diferencian poco de los parciales.

Todos los coeficientes introducidos hasta ahora eran coeficientes de heterodifusión (o coeficientes químicos de difusión). Más fácil es la interpretación del caso, cuando no hay gradiente de concentración ($\nabla c_i = 0$), y si hay gradiente de concentración de isótopos, concentración de átomos, radioactivos (c_i^*). En ese caso

$$j_i = - D_i^* \frac{\partial c_i}{\partial x} \quad (1.8)$$

Aquí D_i^* es el coeficiente de difusión de isótopos. Esta característica es más fácil de interpretar, pues los átomos radiactivos, prácticamente, se mueven en un campo de fuerzas continuo. Si los átomos radiactivos son de la misma clase que los no radiactivos, entonces D_i^* es el coeficiente de autodifusión. Por su definición, la autodifusión es la nivelación de la composición isotópica, por eso también se puede para la nivelación de la composición isotópica de la aleación emplear el término «coeficiente de autodifusión» pero hay que diferenciar la autodifusión en la aleación de la autodifusión en la sustancia pura.

En principio, es posible encontrar un coeficiente análogo al de difusión de los isótopos en la aleación en un experimento sin radiactividad, si $\nabla c_i \rightarrow 0$, pero, está claro, que para ello, hay que emplear otros métodos más sensibles.

1.3 Ley de la conservación de la masa durante la difusión.

Segunda ecuación de difusión.

En ausencia de fuentes y sumideros (reacción química, transformación de fase, evaporación y otros) puede considerarse, que la cantidad de sustancia en difusión no cambia, sólo se redistribuye.

La segunda ecuación de Fick describe la variación de la concentración de la sustancia que difunde en el espacio y en el tiempo. Esta ecuación se deduce directamente del balance de masa durante la difusión y de la expresión para el flujo.

Examinemos un problema unidimensional (la concentración sólo depende de x).

Calculemos los flujos a través de dos planos x y $x + dx$, situados a la distancia dx uno de otro. El flujo a través del plano x , en concordancia con la Ec.(1.1), es $- D S (\partial c / \partial x)_x$, y a través del plano $(x + dx)$ es $- D S (\partial c / \partial x)_{x+dx}$. Como resultado, durante el tiempo dt en el volumen $S dx$ quedará la cantidad de sustancia

$$dq = -D S \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_x dt + D S \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x+dx} dt.$$

Teniendo en cuenta que

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x+dx} - \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_x = \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) dx,$$

obtendremos

$$dq = D S \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right) dx dt$$

si el coeficiente de difusión no depende de las coordenadas. Esto llevará al aumento de la concentración con el tiempo:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = S \frac{dq}{dx dt}$$

Examinando el equilibrio llegamos a la ecuación

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (1.10)$$

Para el caso tridimensional, cuando la concentración es función de las tres coordenadas, la segunda ecuación de difusión toma la forma,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right)$$

o bien

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c, \quad (1.11)$$

donde ∇^2 es el operador de Laplace.

Es fácil obtener la Ec.(1.11) de la Ec.(1.2), si se escribe la ley de conservación de la masa durante la difusión en forma de la ecuación de continuidad para el flujo:

$$\operatorname{div} \mathbf{J} + \frac{\partial c}{\partial t} = 0 \quad (1.12)$$

Introduciendo en la Ec.(1.12) la expresión de la densidad de la corriente (1.2), obtendremos la segunda ecuación de Fick para el caso, en que el coeficiente de difusión depende de las coordenadas:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div} (D \nabla c) \quad (1.13)$$

o bien, si el coeficiente de difusión no depende de las coordenadas

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c. \quad (1.14)$$

1.4 Soluciones de la segunda ecuación de difusión

La segunda ecuación de difusión representa una ecuación diferencial en derivadas parciales, y para resolverla, hay que formular las condiciones iniciales y de frontera que debe satisfacer la concentración de la sustancia que difunde. Estas condiciones se determinan basándose en un análisis de la situación, en la que ocurre la difusión.

Es imprescindible señalar que dentro del cuerpo sólido la concentración es función continua de las coordenadas y del tiempo: su primera derivada respecto de t , las primeras y segundas derivadas respecto de x , y y z también son continuas. Las suposiciones mencionadas no se refieren a la superficie del cuerpo sólido, así como a la superficie de separación interior y a un instante en que comienza la difusión de la sustancia: en esos puntos y en ese momento, la concentración y sus derivadas pueden ser discontinuas.

La distribución inicial de concentraciones $c(x,y,z,0)$, puede ser arbitraria, pero con mayor frecuencia, esa función es constante o igual a cero. En lo que se refiere a las condiciones de frontera (condiciones en la superficie), por lo común, en los problemas de difusión se dan o bien la concentración en la superficie $c(0,t)$, o bien el flujo $(\partial c / \partial x)_{0,t}$. En casos particulares estas magnitudes pueden ser constantes o iguales a cero.

La ecuación de difusión (en las matemáticas más a menudo se llama ecuación del calor) se resuelve con diferentes métodos [15], los principales son: el método de separación de variables (Fourier), el cálculo operacional (Laplace-Carson-Heaviside), el método de la fuente (funciones de Green).

a) Solución para el caso estacionario en una dimensión. En este caso queremos una solución que no dependa del tiempo, esto es: la función c evidentemente sólo dependerá de la posición x . Por lo tanto las derivadas parciales se convierten en derivadas totales, y la ecuación a resolver será:

$$\frac{d^2c}{dx^2} = 0. \quad (1.15)$$

Integrando la Ec.(1.15), la solución toma la forma

$$c(x) = a x + b.$$

Donde a y b son constantes que tienen que evaluarse por las condiciones a la frontera. Puesto que x puede tomar valores infinitos, esto nos obliga a tomar la constante a , como cero. La concentración es pues una constante en estado estacionario. Esto es correcto, pues bajo esta circunstancia la corriente de difusión dada por la ley de Fick (1.10) es cero. Así que no existe difusión estacionaria. Obteniéndose la solución para una muestra unidimensional infinita cuya concentración es independiente del tiempo

$$c(x) = b,$$

en donde b es la concentración inicial. Lo cual nos dice que en equilibrio la concentración debe estar uniformemente distribuída a lo largo de todo el material.

b) Difusión en una muestra infinita, considerando como condiciones a la frontera, que la concentración es finita en una muestra unidimensional.

Tomando como condición inicial que la concentración es cero en todos los puntos del espacio excepto en un punto, que por comodidad se escoge como el origen. Por tanto la concentración inicial se expresa como:

$$c(x,0) = q \delta(x). \quad (1.16)$$

Donde se ha usado la función delta de Dirac para expresar la concentración localizada en el origen. La solución de este problema se llama en la literatura función de Green. Dado que x es infinito en ambas direcciones, para resolver este problema se hará uso de la técnica de la transformada de Fourier.

Considerando la ecuación de difusión

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}$$

y aplicando transformada de Fourier en ambos miembros de la ecuación se obtiene

$$\frac{\partial C(k,t)}{\partial t} = D (ik)^2 C(k,t). \quad (1.17)$$

La ecuación anterior es una ecuación diferencial de primer orden, cuya solución es

$$C(k,t) = C(0,t) e^{-Dk^2 t}, \quad (1.18)$$

en donde $C(0,t) = q$. Por consiguiente, la concentración en función de la distancia y del tiempo se obtendrá aplicando la transformada inversa de Fourier a la Ec.(1.18).

$$c(x,t) = \frac{q}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt} \quad (1.19)$$

Las curvas de concentración que describen la dependencia entre la concentración y la posición (x) para diferentes instantes, están representadas en la Fig.(1.1).

EL área bajo la curva en cualquier instante es igual a q . Con el tiempo las curvas se disipan, y el máximo disminuye según la ley $t^{-1/2}$. EL ancho de la curva (la desviación estandar σ) aumenta conforme a la raíz cuadrada del tiempo, de tal manera que el tiempo y el coeficiente de difusión están relacionados con la desviación estandar, $\sigma^2 \equiv 2 D t$.

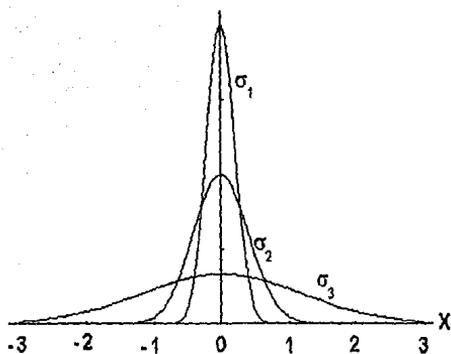


Fig. 1.1 Tres gráficos de distribución de concentración,
 $\sigma_1 = 0.2$, $\sigma_2 = 0.4$, $\sigma_3 = 1.2$.

CAPITULO II

UN MODELO CUANTICO DE PASOS AL AZAR PARA LA DIFUSION POR TUNELAJE EN SOLIDOS CRISTALINOS UNIDIMENSIONALES. UNA CORRECCION CUANTICA A LA LEY DE FICK

2.1 Difusión microscópica de amplitudes.

Para empezar, consideremos dos ondas planas arbitrarias, que se mueven en direcciones opuestas y que inciden sobre una barrera de potencial simétrica, de anchura 2α , la cual por simplicidad matemática, la centramos en $x = 0$. Pensemos de esta barrera de potencial como la separación de dos celdas en un sólido cristalino con constante de red igual a ℓ . En estado estacionario para $k \geq 0$, la función de onda entrante está dada por

$$\Psi_{\pm}^{\text{enl}}(x) = \begin{cases} a e^{+ikx}, & x < -\alpha, \\ b e^{-ikx}, & x > +\alpha. \end{cases} \quad (2.1)$$

De la teoría elemental unidimensional de dispersión, las ondas estacionarias salientes están dadas por

$$\Psi_{\pm}^{\text{sal}}(x) = \begin{cases} [a S_{11}(k) + b S_{12}(k)] e^{-ikx}, & x < -\alpha, \\ [a S_{21}(k) + b S_{22}(k)] e^{ikx}, & x > +\alpha. \end{cases} \quad (2.2)$$

Aquí S es la matriz 2×2 de la celda unitaria microscópica. Considerando una barrera de potencial simétrica, los picos de los paquetes de onda reflejados y transmitidos alcanzarán los puntos medios de sus valles al mismo tiempo, teniendo por consiguiente un modelo de interferencia máximo. Así, si la conservación de la probabilidad, la invariancia bajo reflexión en el tiempo y la invariancia de la barrera de potencial en un espacio de reflexiones, se cumplen simultáneamente, la matriz S puede ser representada en la forma general [4]

$$S(k) = e^{i\theta(k)} \begin{pmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Aquí $T(k)$ y $R(k)$ son los coeficientes de transmisión y reflexión de la celda unitaria microscópica ($T + R = 1$) y $\theta(k)$ es un factor de fase común a todos los elementos de matriz.

Las ondas planas sobre todo (2.1) y (2.2) dejan las posiciones de las partículas completamente especificadas. Sin embargo, primero, para describir un fenómeno de transporte, necesitamos alguna localización en posición. Así, a cambio de ondas planas, escogemos para describir nuestras partículas dispersadas un modelo de paquetes de onda localizado en cada valle. En el caso más general los paquetes de onda entrantes están dados por

$$\Psi_{\pm}^{ent}(x,t) = \int_0^{\infty} g(k) e^{-i\omega(k)t} \begin{cases} a e^{+ikx} & x < -\alpha, \\ b e^{-ikx} & x > +\alpha. \end{cases} dk, \quad (2.4)$$

Aquí $\omega(k) = \hbar k^2/2m$, y $g(k)$ puede ser escogida para ser una función pico con el máximo en $k = k_0$, correspondiendo a velocidades $v_0 = \pm \hbar k_0$ y energía $E_0 = \hbar \omega(k_0)$.

De la misma manera los paquetes de onda salientes están descritos por

$$\Psi_{\pm}^{snl}(x,t) = \int_0^{\infty} g(k) e^{-i\omega(k)t} \begin{cases} [a S_{11}(k) + b S_{12}(k)] e^{-ikx} & x < -\alpha, \\ [a S_{21}(k) + b S_{22}(k)] e^{+ikx} & x > +\alpha. \end{cases} dk, \quad (2.5)$$

Es bien sabido en mecánica cuántica que para una función $g(k)$ con un pico muy pronunciado en $k = k_0$, la posición del máximo del paquete (llamado el centroide) está bien aproximada por el requisito de fase estacionaria evaluada en $k = k_0$ [19]. Usando este método de fase estacionaria para las dos ondas entrantes en la Ec.(2.4), tenemos que el movimiento de los dos centroides entrantes está dado por

$$\frac{d}{dk}(\pm k x - \omega(k) t) \Big|_{k_0} = \pm x - \omega'_0 t = 0.$$

O sea que los centroides están localizados en $x = \pm \omega'_0 t$. Si para $t = 0$ escogemos los dos centroides entrantes que estén exáctamente en el punto medio de sus valles, respectivamente, tenemos para sus posiciones iniciales la cantidad $x_i = \pm \ell/2$ al tiempo inicial $t_i = -\ell/2\omega'_0$. Es bien sabido que la selección de $g(k)$ es equivalente a la selección de alguna condición inicial específica para $\Psi(x,t)$. Como mencionamos previamente, tomamos las condiciones iniciales al tiempo t_i en el que los dos centroides entrantes alcanzan los puntos medios de los valles. En consecuencia escogemos las condiciones iniciales

$$\Psi_+^{ent}(x_i, t_i) = A(x = -\ell/2, t = t_i) \frac{e^{+ik_0 x}}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x + \ell/2)^2}{4\sigma^2}\right], \quad x < -\alpha \quad (2.6)$$

y

$$\Psi_-^{ent}(x_i, t_i) = B(x = +\ell/2, t = t_i) \frac{e^{-ik_0 x}}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - \ell/2)^2}{4\sigma^2}\right], \quad x > \alpha \quad (2.7)$$

donde los números complejos A, B son constantes en sus respectivas celdas. Estas funciones entrantes representan funciones con probabilidad $|\Psi|^2$ gaussiana, centradas en los puntos medios de los valles, $x = \pm\ell/2$. La incertidumbre en la posición Δx es su

desviación estandar σ , $\Delta x = \sigma$ y se supone constante en esta tesis y de tamaño menor que el espacio entre dos celdas, por tanto un paquete no puede ocupar mas de una celda.

Sustituyendo las Ecs.(2.6) y (2.7) y el tiempo $t = 0$ en la Ec.(2.4), podemos resolver para $g(k)$ en una transformada inversa de Fourier [12], y obtener en ambos casos la misma función de distribución de momentos:

$$g(k) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_0x} \exp\left[\frac{-x^2}{4\sigma^2}\right] e^{-ikx} dx \quad (2.8)$$

resolviendo la integral obtenemos

$$g(k) = \frac{(4\sigma^2)^{1/4}}{(2\pi)^{1/2} (2\pi)^{1/4}} \exp\left[-\frac{(k - k_0)^2 4\sigma^2}{4}\right] \quad (2.9)$$

Esta distribución en el espacio de momentos es gaussiana también. Está centrada en k_0 y tiene una incertidumbre en el momento $\Delta k = 1/2\sigma$.

El momento promedio ($\pm \hbar k_0$) y su dispersión momental ($\hbar \Delta k$) no varían en el tiempo debido a que el momento es una constante de movimiento. Esta función $g(k)$ es la que ahora usamos en la Ec.(2.5). Ahora podemos escribir

$$\Psi_{\pm}^{sal}(x,t) = \int_0^{\infty} g(k) [S(k)] \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} e^{+i(\pm kx - \omega t)} dk, \quad \begin{array}{l} x < -\alpha \\ x > +\alpha \end{array} \quad (2.10)$$

Esta integral no puede llevarse a cabo a menos que un modelo explícito para la matriz S (o la barrera de potencial) esté dado. Para evitar esto, se hará una aproximación. Dado que $g(k)$ es una función con un pico muy alto centrado en $k = k_0$, podemos proceder a hacer una expansión en serie de Taylor de la matriz S alrededor del punto k_0 ; así podemos escribir

$$S(k) = S(k_0) + \frac{dS}{dk_0} (k - k_0) + \dots \quad (2.11)$$

Ahora daremos un paso más en las aproximaciones: es posible hacer nuestra aproximación a orden cero, ésto es, $S(k) \cong S(k_0)$. Esto implica

$$|S(k_0)| \gg |d^n S/dk_0^n|. \quad (2.12)$$

Ciertamente la Ec.(2.12) no es válida para valores arbitrarios de k_0 ; sin embargo, con sólo mirar en cualquier gráfica del coeficiente de transmisión vs energía, en cualquier modelo particular de potencial [4], nos convencerá que podemos encontrar tales puntos en los cuales la Ec.(2.12) es cierta. En verdad, escogiendo valores para k_0 de alta energía o bien puntos que están colocados aproximadamente en el punto medio de energías resonantes, donde el coeficiente T es casi constante, la condición (2.12) está bien satisfecha. Bajo esta condición tan restrictiva, la Ec.(2.9) se reduce a una integral que da el mismo paquete Gaussiano que la función entrante (2.6) y (2.7),

$$\begin{cases} \Psi_-^{sal}(x,t) \\ \Psi_+^{sal}(x,t) \end{cases} \cong |S(k_0)| \int_0^\infty g(k) e^{-i\omega t} \begin{cases} a e^{-ikx} \\ b e^{+ikx} \end{cases} dk, \quad \begin{cases} x < -\alpha \\ x > +\alpha \end{cases} \quad (2.13)$$

Para el paquete saliente, los centroides llegarán a los puntos medios de sus respectivos valles $x_r = \pm \ell/2$ al tiempo $t_r = + \ell/2\omega'_0$. Por tanto podemos escribir la Ec.(2.13) como

$$\Psi_-^{sal}(x,t_r) \cong B(x = -\ell/2, t = t_r) \frac{e^{-ik_0 x}}{[2\pi \sigma^2]^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x + \ell/2)^2}{4\sigma^2}\right], \quad x < -\alpha \quad (2.14a)$$

$$\Psi_+^{sal}(x,t_r) \cong A(x = +\ell/2, t = t_r) \frac{e^{+ik_0 x}}{[2\pi \sigma^2]^{1/4}} \exp\left[-\frac{(x - \ell/2)^2}{4\sigma^2}\right], \quad x > \alpha \quad (2.14b)$$

Los nuevos coeficientes A y B están dados por

$$\begin{bmatrix} B(x = -\ell/2, t = t_1 + \tau) \\ A(x = +\ell/2, t = t_1 + \tau) \end{bmatrix} = |S(k_0)| \begin{bmatrix} A(x = -\ell/2, t = t_1) \\ B(x = +\ell/2, t = t_1) \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

Aquí hemos definido $\tau \equiv t_f - t_i = \ell/\omega'_0$ como el "tiempo de salto". La Ec.(2.15) es la ecuación básica sobre la cual construiremos nuestro proceso de difusión coherente.

Note que en este modelo cuando $t = t_f$ los paquetes salientes tienen la misma forma y la misma posición como los entrantes, así en torno a estos paquetes dispersados entrarán ondas en las dos siguientes barreras adyacentes, y el proceso entero se repite así mismo otra vez. Un proceso de difusión recursivo se llevará a cabo de ésta manera.

2.2 Un modelo de camino coherente al azar.

En esta sección aplicaremos los resultados de la sección 2.1 para una red cristalina infinita, en la cual los electrones se mueven como partículas libres en los valles de potencial y el "salto" de cada uno de los valles al siguiente es por tunelaje cuántico (o dispersión arriba del potencial). En la sección 2.1, usamos por simplicidad matemática una barrera de potencial en el origen. Con el objeto de describir nuestro modelo de difusión para un potencial periódico, en una red unidimensional infinita (modelo de Kronig-Penney), traslademos el origen $x \rightarrow x + \ell/2$ de tal manera que los puntos medios de los valles, ahora están localizados en las posiciones $x = M\ell$ ($M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$), y también, haciendo un corrimiento en el origen del tiempo $t \rightarrow t + \ell/2\omega'_0$, de tal manera que para valores enteros $t = N\tau$ ($N = 0, 1, 2, \dots$) los centroides estarán localizados en los puntos medios de los valles. En el modelo de difusión que estamos proponiendo, generalizamos los resultados de la sección 2.1, de tal forma, que en cada valle de la red ($x = M\ell$) tenemos ambos movimientos, a la derecha y a la izquierda del paquete de onda, cuya función de onda a un tiempo fijo $t = N\tau$ está descrito por

$$\begin{aligned} \Psi_M(x, t = N\tau) &= [A(M\ell, N\tau) e^{+ik_0x} + B(M\ell, N\tau) e^{-ik_0x}] \\ &\cdot \frac{1}{[2\pi\sigma^2]^{1/4}} \exp\left[\frac{-(x - M\ell)^2}{4\sigma^2}\right] \\ &\equiv \Psi_M^+(x, N\tau) + \Psi_M^-(x, N\tau). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Aquí $A(M\ell, N\tau)$ y $B(M\ell, N\tau)$ denotan la amplitud modulante para los paquetes moviéndose a la derecha y a la izquierda, respectivamente. Nótese que éstas amplitudes están evaluadas

en los puntos medios de los valles ($x = M\ell$) y a tiempos discretos ($t = N\tau$). Es importante hacer notar que, en la Ec.(2.16), hemos supuesto que los paquetes de onda no son dispersados (ensanchados)

$$\sigma = \text{constante en el tiempo} \quad (2.17)$$

Como aproximación a la mecánica cuántica, esta aproximación solo es válida para tiempos cortos.

Las amplitudes modulantes A y B satisfacen, para las coordenadas de dos valles contiguos de la red, $x = M\ell$ y $(M+1)\ell$, las mismas ecuaciones recursivas (2.15). Esto es, omitiendo factores de fase comunes, escribiremos

$$\begin{pmatrix} B[M\ell, (N+1)\tau] \\ A[(M+1)\ell, (N+1)\tau] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{pmatrix}_{k_0} \begin{pmatrix} A[M\ell, N\tau] \\ B[(M+1)\ell, N\tau] \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

En esta ecuación, el segundo miembro contiene al tiempo $t = N\tau$, las amplitudes de dos paquetes entrantes localizados en valles contiguos, una amplitud entrante A moviéndose a la derecha en el valle $M\ell$, y otra amplitud entrante B moviéndose a la izquierda en el valle $(M+1)\ell$. Nótese que ambos paquetes incidirán en la misma barrera de potencial, y después de la colisión tendremos, a un tiempo posterior $t = (N+1)\tau$, los paquetes salientes localizados en los puntos medios de los valles, con amplitud B moviéndose a la izquierda en el valle $M\ell$ y con amplitud A en el valle $(M+1)\ell$. Estas son ecuaciones recursivas porque las mismas funciones A y B están relacionadas a dos tiempos sucesivos. Estas ecuaciones definen las ecuaciones básicas de nuestro modelo de camino aleatorio cuántico.

Puesto que por hipótesis cualquier paquete de onda en cualquier punto de la red va a ser siempre Gaussiano, y la posición de su centroide va a ser siempre en el punto medio del valle ($x = M\ell$), es claro que sólo necesitamos especificar la evolución en el espacio y en el tiempo de las correspondientes amplitudes modulantes $A(M, N)$ y $B(M, N)$, las cuales se deben poder obtener al resolver la Ec.(2.18) con condiciones iniciales y de frontera apropiadas. El modelo se describe gráficamente en la Fig. 2.1

2.3 La probabilidad en las celdas de la red.

Ahora deseamos la probabilidad en cada punto de la red. Mientras tengamos tiempos cortos de tal manera que el ancho de cada paquete no alcance a ocupar la posición de algún valle vecino, tendremos un modelo donde cada paquete permanecerá casi localizado en una sola celda. En este caso en que no hay superposición de dos paquetes de celdas adyacentes, la probabilidad en cada celda M será la contribución única de la función de onda Ψ_M descrita en la Ec.(2.16). Enfatizamos que esta función Ψ_M es la superposición de dos paquetes Gaussianos que se mueven en direcciones opuestas.

Según la Mecánica Cuántica, la probabilidad $P(x,t)$ está dada por $|\Psi(x,t)|^2$, y para la probabilidad total en toda una celda M , debemos sumar (integrar) la probabilidad en cada punto de la celda. En consecuencia tenemos para la celda M (por simplicidad usamos $\ell = 1$ y $\tau = 1$):

$$P(M,N) = \int_{\text{celda } M} |\Psi_M(x,N)|^2 dx = \int_{\text{celda } M} |\Psi_M^+(x,N) + \Psi_M^-(x,N)|^2 dx \quad (2.19)$$

Substituyendo de la Ec.(2.16) tenemos

$$P(M,N) = |A(M,N)|^2 + |B(M,N)|^2 + 2 \operatorname{Re} \int_M \Psi_M^+(x,N) \Psi_M^-(x,N)^* dx \quad (2.20)$$

Aquí, la integral es una contribución de interferencia producida por la superposición total de dos paquetes Gaussianos, que se mueven en direcciones opuestas en la misma celda M . El valor explícito de esta integral está dada por

$$\int_M \Psi_M^+(x,N) \Psi_M^-(x,N)^* dx = AB^* e^{2ik_0M} \exp\left\{\frac{-k_0^2}{2(\Delta k)^2}\right\} \quad (2.21)$$

Dado que por hipótesis tenemos una distribución de momento con un pico muy pronunciado alrededor de k_0 en forma tal que $\Delta k \ll k_0$, la integral es por lo tanto de orden exponencial fuertemente decreciente, y ésta contribución puede ser despreciada con confianza.

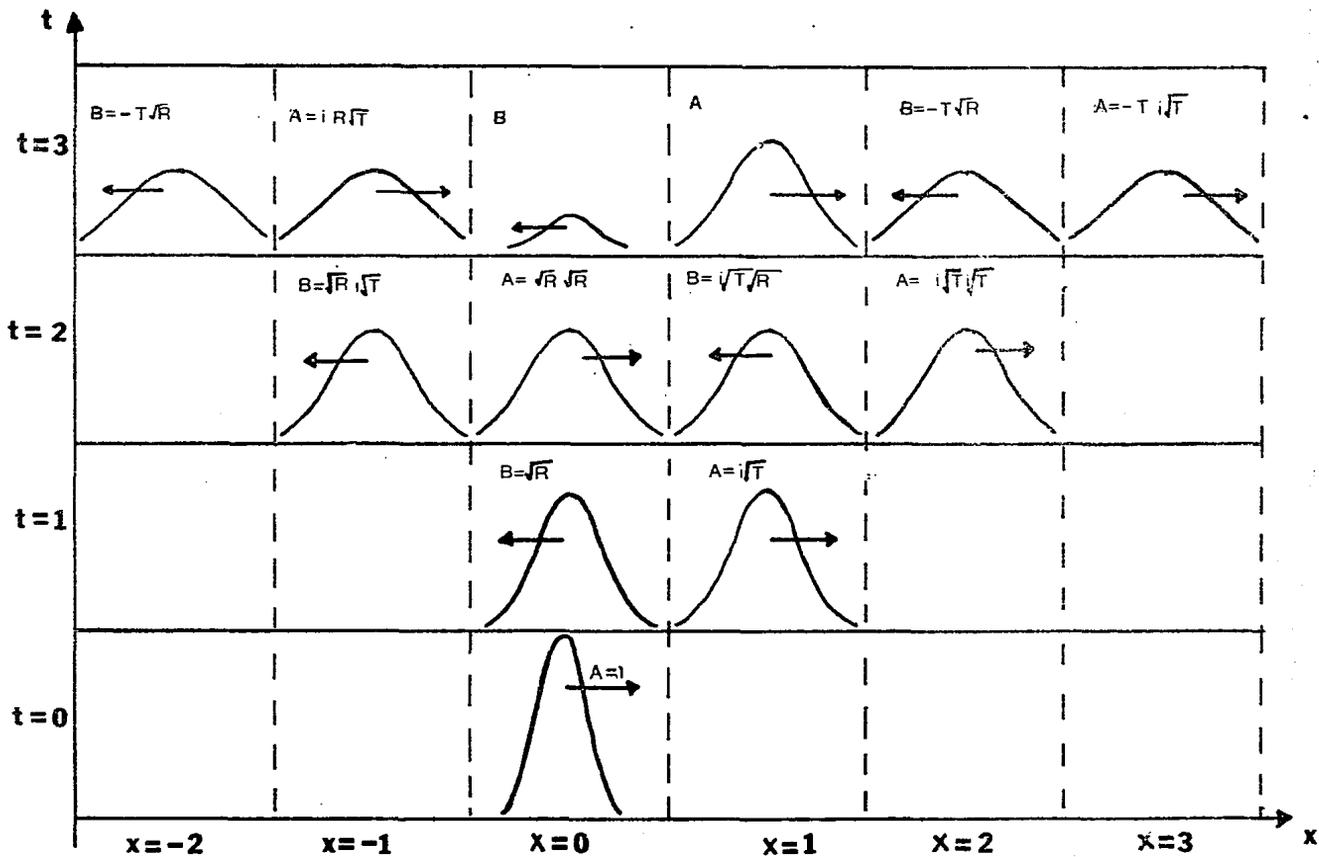


Fig. 2.1 Evolución en el espacio y en el tiempo de las amplitudes $A_{(M,N)}$ y $B_{(M,N)}$

Nótese entonces que en este modelo, la interferencia no proviene de los paquetes que se mueven en direcciones opuestas en la misma celda. La interferencia provendrá en un mismo valle, de la superposición de amplitudes de dos paquetes de onda moviéndose en la *misma* dirección. Esto podemos verlo en el ejemplo gráfico de la Fig. 2.2.

El resultado es, que la probabilidad total en cada celda de la red, es una superposición incoherente (sin interferencia) de dos paquetes de onda que se mueven en direcciones opuestas. Cada paquete tendrá su propia amplitud, el cual será un número complejo, y ésta amplitud estará construida en cada instante y en cada posición de acuerdo a las reglas de la Ec.(2.18). El resultado neto es que la probabilidad total está dada en cada celda M de la red al tiempo N por

$$P(M,N) = |A(M,N)|^2 + |B(M,N)|^2 \equiv P_+(M,N) + P_-(M,N). \quad (2.22)$$

Hasta ahora esto se ve como un resultado clásico, nótese sin embargo que de acuerdo a la Ec. (2.18) ya sea A(M,N) o B(M,N) es una superposición coherente de dos amplitudes complejas, que viajan en la misma dirección, pero cuyo valor depende del tiempo previo, ésto producirá una interferencia cuántica como se demuestra a continuación. Substituyendo la Ec.(2.18) en la Ec.(2.22) encontramos

$$P_+(M,N) \equiv |A(M,N)|^2 = T P_+(M-1,N-1) + R P_-(M,N-1) + \sqrt{TR} [iA(M-1,N-1) B^*(M,N-1) + c.c.], \quad (2.23a)$$

$$P_-(M,N) \equiv |B(M,N)|^2 = R P_+(M,N-1) + T P_-(M+1,N-1) + \sqrt{TR} [iA^*(M,N-1) B(M+1,N-1) + c.c.] \quad (2.23b)$$

La existencia de estos términos de interferencia producen la gran diferencia entre procesos aleatorios clásicos (sin interferencia), y procesos aleatorios cuánticos (con interferencia). Debemos hacer notar que si arbitrariamente despreciamos los términos de interferencia en la Ecs.(2.23), recobramos automáticamente las ecuaciones clásicas de caminata aleatoria correlacionada (CCW = Classical Correlated Walk) que ha sido reportada en la referencia [7], ésto es

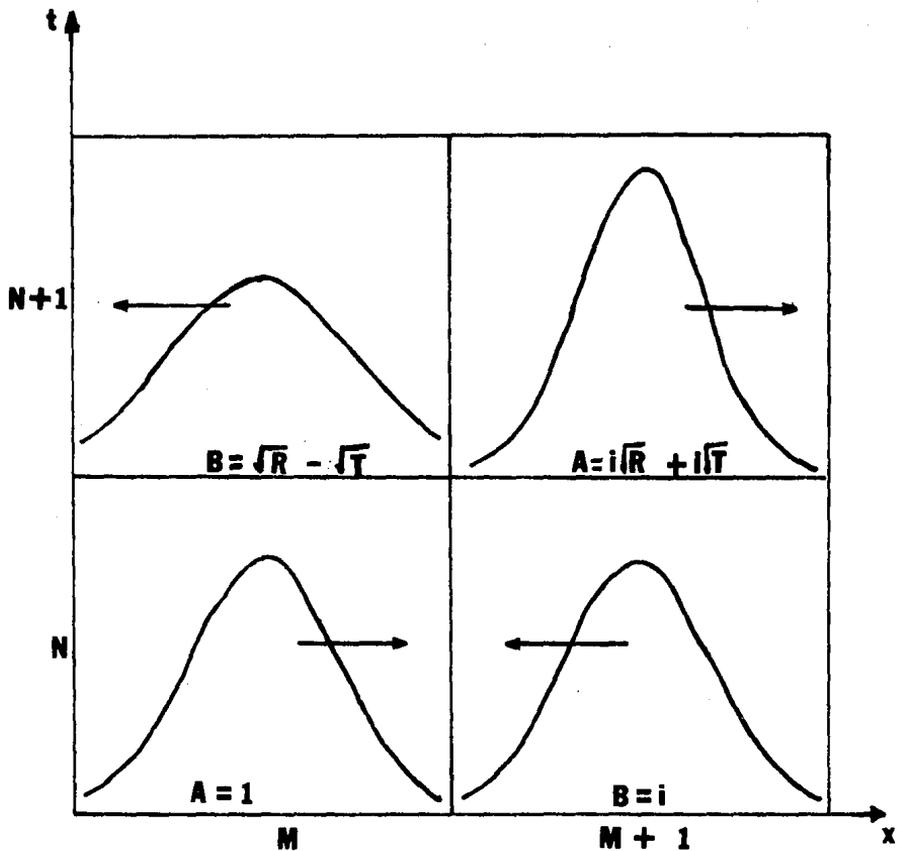


Fig. 2.2 Ejemplo gráfico de cómo se puede producir interferencia destructiva (celda M, tiempo N+1) y constructiva (celda M+1, tiempo N+1)

$$P_{+}(M,N) = T P_{+}(M-1,N-1) + R P(M,N-1) \quad (2.24a)$$

$$P_{-}(M,N) = R P_{+}(M,N-1) + T P_{-}(M+1,N-1). \quad (2.24b)$$

De estas ecuaciones incoherentes obtendremos el coeficiente de difusión en el siguiente capítulo.

2.4 Solución analítica en una red infinita.

El conjunto de ecuaciones en diferencias finitas Ec.(2.18) puede, en principio ser resuelto para cualquier condición inicial y cualquier condición a la frontera. Como condición a la frontera, tomamos una red infinita, y como condición inicial, escogemos un sólo paquete moviéndose a la derecha en el origen $x = 0$:

$$A(M,N=0) = \delta_{M,0}, \quad B(M,N=0) = 0 \quad (2.25)$$

Dadas estas condiciones iniciales, la solución de la Ec.(2.18) se obtiene de la siguiente manera: primero definimos la transformada de Fourier Ec.(2.26), que no son más que las "funciones características" de las amplitudes $\tilde{A}(k,N)$ y $\tilde{B}(k,N)$, por

$$\begin{bmatrix} \tilde{A}(k,N) \\ \tilde{B}(k,N) \end{bmatrix} = \sum_{M=-\infty}^{M=+\infty} e^{ikM} \begin{bmatrix} A(M,N) \\ B(M,N) \end{bmatrix}. \quad (2.26)$$

Transformando con las series de Fourier la Ec.(2.18), obtenemos una ecuación Markoviana

$$\tilde{\Psi}(k,N) = U(k) \tilde{\Psi}(k,N-1), \quad (2.27)$$

donde $\tilde{\Psi}$ es el vector columna definido por

$$\tilde{\Psi}(k,N) = \begin{bmatrix} \tilde{A}(k,N) \\ \tilde{B}(k,N) \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

y $U(k)$ es la matriz de "transición" unitaria

$$U(k) = \begin{bmatrix} i\sqrt{T}e^{ik} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R} & i\sqrt{T}e^{-ik} \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

La solución formal inmediata de la Ec.(2.27) es

$$\tilde{\Psi}(k,N) = U(k)^N \tilde{\Psi}(k,N=0). \quad (2.30)$$

Usando métodos de álgebra lineal mostrados en el apéndice 2.A, obtenemos

$$U(k)^N = \tilde{G}(k,N) U(k) + \tilde{G}(k,N-1)1. \quad (2.31)$$

Aquí, $\tilde{G}(k,N)$ es la función de Green del problema, y está dada por

$$\tilde{G}(k,N) = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-}, \quad (2.32)$$

donde λ_+ y λ_- son los eigenvalores unitarios de la matriz U dados por

$$\lambda_{\mp} = i\sqrt{T} \cos k \mp (1-T \cos^2 k)^{1/2}. \quad (2.33)$$

Substituyendo las Ecs.(2.31),(2.32) y (2.25) en la Ec.(2.30), obtenemos

$$\begin{bmatrix} \tilde{A}(k,N) \\ \tilde{B}(k,N) \end{bmatrix} = \tilde{G}(k,N) \begin{bmatrix} i\sqrt{T} e^{ik} \\ \sqrt{R} \end{bmatrix} + \tilde{G}(k,N-1) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

Posteriormente, invirtiendo la serie de Fourier,

$$G(M,N) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-ikM} \tilde{G}(k,N) dk, \quad (2.35)$$

finalmente llegamos a

$$A(M,N) = i\sqrt{T} G(M-1,N) + G(M,N-1) \quad (2.36a)$$

$$B(M,N) = \sqrt{R} G(M,N). \quad (2.36b)$$

En la siguiente sección calcularemos la función de Green explícitamente.

2.5 Expresión analítica para la función de Green.

En esta sección, calcularemos en forma analítica exacta la función de Green $G(M,N)$. Para empezar, usando la definición [15]

$$G(M,N) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-ikM} \tilde{G}(k,N) dk ,$$

se pueden obtener directamente de la definición misma, unas cuantas soluciones para tiempos pequeños; de hecho, usando la Eq.(2.32), podemos reescribir,

$$G(x,N) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-ikx} \tilde{G}(k,N) dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} e^{-ikx} \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-} dk, \quad (2.37)$$

y ahora para valores particulares de $N = 0, 1, 2, 3, \dots$ podemos encontrar directamente de la integral (2.37) que:

$$\begin{aligned} G(x,0) &= 0, \\ G(x,1) &= \delta_{x,0}, \\ G(x,2) &= i\sqrt{T} (\delta_{x,1} + \delta_{x,-1}), \\ G(x,3) &= (1 - 2T) \delta_{x,0} - T \delta_{x,2} - T \delta_{x,-2}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

A continuación, buscaremos una solución para un tiempo arbitrario N . Nótese primero, que la función $\tilde{G}(k,N)$ es proporcional a un polinomio de Chebyshev de segundo tipo $U_{N-1}(z)$. Esto se debe a que podemos reescribir los eigenvalores λ , de la siguiente manera:

$$\lambda_{\mp} = i \left[z \mp i(1-z^2)^{1/2} \right] \quad \text{donde} \quad z \equiv \sqrt{T} \cos k. \quad (2.39)$$

Substituyendo la Ec.(2.39) en la Ec. (2.32), obtenemos

$$\begin{aligned} \tilde{G}(k, N) &= (i)^N \frac{[z + i(1-z^2)^{1/2}]^N - [z - i(1-z^2)^{1/2}]^N}{(1-z^2)^{1/2}} \\ &= (i)^N \begin{cases} 0, & N = 0, \\ U_{N-1}(z), & N \geq 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.40)$$

A continuación, el polinomio de Chebyshev $U_N(z)$ se puede escribir como [2]

$$U_N(z) = \sum_{j=0}^{\lfloor N/2 \rfloor} \frac{(-1)^j (N-j)!}{j!(N-2j)!} (2z)^{N-2j}, \quad (2.41a)$$

y ahora demostraremos que

$$(2z)^{N-2j} = (\sqrt{T})^{N-2j} \sum_{n=0}^{N-2j} \frac{(N-2j)!}{n!(N-2j-n)!} e^{ik(N-2j-2n)}, \quad (2.41b)$$

lo cual, se obtiene de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} (2z)^{N-2j} &\equiv (2\sqrt{T} \cos k)^{N-2j} = \left[2\sqrt{T} \frac{(e^{ik} + e^{-ik})}{2} \right]^{N-2j} \\ &= (\sqrt{T})^{N-2j} (e^{ik} + e^{-ik})^{N-2j} \end{aligned}$$

Aplicando el teorema del binomio a la igualdad anterior, se obtiene finalmente

$$\begin{aligned}
 (2Z)^{N-2j} &= (\sqrt{T})^{N-2j} \sum_{n=0}^{N-2j} \binom{N-2j}{n} \left(e^{ik} \right)^n \left(e^{-ik} \right)^{N-2j-n} \\
 &= (\sqrt{T})^{N-2j} \sum_{n=0}^{N-2j} \frac{(N-2j)!}{n!(N-2j-n)!} e^{ik(N-2j-2n)}.
 \end{aligned}$$

Si sustituimos finalmente las Ecs.(2.41) en la Ec.(2.37) llegamos a una expresión analítica de la función de Green de la siguiente forma

$$G(x, N+1) = (i)^N \sum_{j=0}^{\lfloor N/2 \rfloor} (-1)^j \sum_{n=0}^{N-2j} (\sqrt{T})^{N-2j} \frac{(N-j)! \delta(N-x, 2j+2n)}{j!(N-2j-n)! N!}. \quad (2.42)$$

La función delta de Kronecker $\delta(N-x, 2j+2n)$ implica, que la función $G(x, N+1)$ es diferente de cero sólo si $N-x = 2(j+n)$. Dado que j y n son enteros positivos, entonces $N-x$ debe ser un entero positivo par. En consecuencia N y x deben tener la misma paridad. Bajo estas condiciones $n = (N-x-2j)/2$ será un entero positivo sólo si $2j < N-x$. Por lo tanto, la Ec.(2.42) se puede escribir finalmente como

$$G(x, N+1) = (i)^N \sum_{j=0}^{\lfloor N-x \rfloor / 2} (-1)^j (\sqrt{T})^{N-2j} \frac{(N-j)!}{j! \left(\frac{N+x-2j}{2} \right)! \left(\frac{N-x-2j}{2} \right)!} \quad (2.43)$$

Notemos que $G(x, N+1)$ tiene paridad par en la variable x .

Sustituyendo la Ec.(2.43) en las Ecs.(2.36), tenemos la expresión analítica completa para las amplitudes $A(M, N)$ y $B(M, N)$. Podemos ahora calcular la probabilidad $P(M, N)$ de encontrar partículas en cada celda M y a cualquier tiempo N . Por la Ec.(2.20) tenemos que

$$P(M, N) = |A(M, N)|^2 + |B(M, N)|^2,$$

esta función puede ser calculada numéricamente para distintos valores de M y N .

APENDICE 2.A

Cálculo de la potencia U^N

En este apéndice derivaremos una expresión para la matriz U^N , con U unitaria dada por la Ec.(2.29)

$$\begin{pmatrix} A(k,N) \\ B(k,N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sqrt{T}e^{ik} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R} & i\sqrt{T}e^{-ik} \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} A(k,N=0) \\ B(k,N=0) \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

De acuerdo con el teorema de Cayley-Hamilton podemos escribir para cualquier función polinomial de una matriz de 2×2

$$U^N = \bar{G}(k,N) U + \bar{G}(k,N-1) I \quad (\text{A.2})$$

con

$$\bar{G} = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-} \quad (\text{A.3})$$

en donde λ_{\pm} son los eigenvalores de la matriz U . Por consiguiente, para determinar \bar{G} , primero obtendremos los eigenvalores λ_{\pm} , que deben satisfacer la ecuación siguiente

$$\det[U - \lambda I] = \begin{vmatrix} i\sqrt{T} e^{ik} - \lambda & \sqrt{R} \\ \sqrt{R} & i\sqrt{T} e^{-ik} - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (\text{A.4})$$

Desarrollando la Ec.(A.4) obtenemos la siguiente expresión

$$(i\sqrt{T} e^{ik} - \lambda)(i\sqrt{T} e^{-ik} - \lambda) - R = 0. \quad (\text{A.5})$$

Efectuando el producto indicado y asociando términos llegamos a la siguiente ecuación

$$-T - \lambda (i\sqrt{T} e^{ik} + i\sqrt{T} e^{-ik}) + \lambda^2 - R = 0. \quad (\text{A.6})$$

Conmutando términos y factorizando, obtenemos

$$\lambda^2 - i\sqrt{T} (e^{ik} + e^{-ik}) \lambda - (R + T) = 0. \quad (\text{A.7})$$

Aplicando la fórmula de Euler en la Ec.(A.7) se obtiene la ecuación

$$\lambda^2 - i\sqrt{T} 2 \cos k \lambda - 1 = 0, \quad (\text{A.8})$$

que es una ecuación algebraica de segundo grado, cuya solución está dada de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{i\sqrt{T} 2 \cos k \pm \sqrt{-T 4 \cos^2 k + 4}}{2} = i\sqrt{T} \cos k \pm \sqrt{1 - T \cos^2 k} \\ &= i\sqrt{T} \cos k \pm \frac{i}{1} \sqrt{1 - T \cos^2 k}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

factorizando (A.9) tenemos:

$$\lambda_{\pm}(k) = i \left[\sqrt{T} \cos k \pm i \sqrt{1 - T \cos^2 k} \right]. \quad (\text{A.10})$$

Que es un eigenvalor complejo de magnitud unitaria. Esto está en completo acuerdo con el hecho de que U es una matriz unitaria.

Simplificando la Ec.(A.10), obtenemos los eigenvalores de la matriz U, que están dados de la siguiente manera

$$\lambda_{\pm} \equiv i e^{\pm i\theta(k)}. \quad (\text{A.11})$$

Considerando que:

$$\begin{aligned} \lambda_+ \lambda_- &= -1 \\ \lambda_+ + \lambda_- &= 2 i\sqrt{T} \cos k \\ \lambda_+ - \lambda_- &= -2 \sqrt{1 - T \cos^2 k}, \end{aligned}$$

se sigue que

$$\tilde{G}(k,N) = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+ - \lambda_-} = \frac{(i)^N \left[e^{iN\theta} - e^{-iN\theta} \right]}{(i) \left[e^{i\theta} - e^{-i\theta} \right]} \quad (\text{A.12})$$

Aplicando nuevamente la fórmula de Euler, se obtiene finalmente

$$\tilde{G}(k,N) = (i)^{N-1} \frac{\text{sen } N\theta(k)}{\text{sen } \theta(k)} = [i]^{N-1} U_{N-1} [\text{cos}\theta(k)] \quad (\text{A.13})$$

donde U_N es un polinomio de Chebyshev de segundo orden [2].

Nótese que

$$\text{cos } \theta(k) = \sqrt{T} \text{cos} k$$

$$\text{sen } \theta(k) = \sqrt{1 - T \text{cos}^2 k}$$

APENDICE 2.B

Lista de Propiedades de los Polinomios de Chebyshev $U_n(x)$ [2]

Ortogonalidad

$$\left. \begin{aligned} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} U_n(x) U_m(x) dx &= 0 \\ \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} U_n^2(x) dx &= \pi/2 \end{aligned} \right\} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} U_n(x) U_m(x) dx = \delta_{n,m} \pi/2 \quad (\text{B.1})$$

Forma analítica explícita

$$U_n(x) = \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \frac{(n-m)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} = (2x)^n + k_{n-1} x^{n-1} + \dots \quad (\text{B.2})$$

donde el término general $(2x)^n$ es mucho menor que uno.

$$U_n(\cos \theta) = \frac{\text{sen}(n+1)\theta}{\text{sen}\theta} \quad (\text{B.3})$$

$$U_n(x) = \frac{\text{sen}[(n+1)\cos^{-1}x]}{\text{sen}(\cos^{-1}x)} \quad (\text{B.4})$$

Valores particulares

$$U_n(-x) = (-1)^n U_n(x)$$

$$U_n(1) = n + 1$$

$$U_n(0) = \begin{cases} (-1)^m & n = 2m \\ 0 & n = 2m + 1 \end{cases}$$

$$U_0(x) = 1$$

$$U_1(x) = 2x$$

Ecuación diferencial satisfecha

$$(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} U_n(x) - 3x \frac{d}{dx} U_n(x) + n(n + 2) U_n(x) = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$(1 - x^2) \frac{d}{dx} U_n(x) = -nx U_n(x) + (n + 1) U_{n-1}(x) \quad (\text{B.6})$$

Relaciones de recurrencia

$$U_{n+1}(x) = 2 U_n(x) - 1 U_{n-1}(x) \quad (\text{B.7})$$

$$U_0(x) = 1$$

$$U_1(x) = 2x$$

Función generadora

$$\frac{1}{1 - 2xz + z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(x) z^n \quad -1 < x < 1 \quad |z| < 1 \quad (\text{B.8})$$

Representación integral

$$U_n = \frac{1}{2\pi i} \int_c \frac{1}{z^n} \frac{1}{z(1 - 2xz + z^2)} dz \quad (\text{B.9})$$

$$U_n(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{1}{z^{n+1}} \frac{1}{1 - 2xz + z^2} dz \quad (\text{B.10})$$

donde C es cualquier contorno cerrado alrededor del origen.

Desigualdades

$$|U_n(x)| \leq n + 1 \quad -1 \leq x \leq 1 \quad (\text{B.11})$$

Ceros de $U_n(x)$

denotando el m-ésimo cero de U_n por $\chi_m^{(n)}$ se tiene que

$$\chi^{(n)} < \chi^{(n)} < \chi^{(n)} < \dots \quad (\text{B.12})$$

$$\chi_m^{(n)} = \cos \left[\frac{m}{2n+1} \pi \right] \quad (\text{B.13})$$

$$T_n(x) = \cos \left[n \cos^{-1} x \right] \quad (\text{B.14})$$

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x) T_m(x) dx = \frac{\pi}{2} \delta_{nm} \quad n, m \neq 0 \quad (\text{B.15})$$

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_0(x) T_0(x) dx = \pi \quad (\text{B.16})$$

$$\begin{aligned} T_n(x) &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{[n/2]} (-1)^m \frac{(n-m-1)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} \\ &= \frac{n(n-1)!}{2n!} (2x)^n + a_{n-2} (2x)^{n-2} + \dots = 2^{n-1} x^n + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Relación de recurrencia

$$T_{n+1}(x) = T_n(x) - T_{n-1}(x) \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{1 - xz}{1 - 2xz + z^2} = \sum_{n=0}^{\infty} T_n(x) z^n \quad (\text{B.18})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{1 - 2xz + z^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{T_n(x)}{1 - xz} z^n = \sum_n T_n(x) \sum_m (xz)^m z^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} x^m T_n(x) z^{n+m} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

CAPITULO III

COEFICIENTE DE DIFUSION

3.1 La corriente de difusión $J(M,N)$

Con el objeto de encontrar el coeficiente de difusión, calculemos primero la densidad de corriente de probabilidad cuántica en cada celda de la red $x = M$, para tiempos discretos $t = N$ (por simplicidad usaremos $\ell \equiv \tau \equiv 1$),

$$J(M,N) \equiv \int_{\text{celda } M} \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] dx, \quad (3.1)$$

esta corriente se puede calcular de la siguiente manera: suponiendo en cada celda M una función de onda $\Psi_M(x,t)$ descrita por la Ec.(2.16), tenemos entonces

$$\Psi_M(x,N) = \Psi_M^+(x,N) + \Psi_M^-(x,N) = A(x) e^{ikx} G(x) + B(x) e^{-ikx} G(x) \quad (3.2)$$

donde

$$G(x) \equiv \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \exp \left[-\frac{(x-M)^2}{4\sigma^2} \right]. \quad (3.3)$$

Tomando a continuación el gradiente (unidimensional) de Ψ y Ψ^* tenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_M}{dx} &= A e^{ikx} G \left[ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + B e^{-ikx} G \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \\ &= \psi_M^+ \left[ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + \psi_M^- \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\frac{d\psi_M^*}{dx} = \psi_M^{+*} \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + \psi_M^{-*} \left[+ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \quad (3.4)$$

Multiplicando cada expresión por ψ y ψ^* tenemos

$$\begin{aligned} \psi_M^* \nabla \psi_M &= |\psi_M^+|^2 \left[ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + \psi_M^{+*} \psi_M^- \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \\ &\quad + |\psi_M^-|^2 \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + \psi_M^{-*} \psi_M^+ \left[+ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} \psi_M \nabla \psi_M^* &= |\psi_M^+|^2 \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + \psi_M^+ \psi_M^{-*} \left[+ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \\ &\quad + |\psi_M^-|^2 \left[+ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] + \psi_M^- \psi_M^{+*} \left[-ik - \frac{(x-M)}{2\sigma^2} \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

De donde se sigue que:

$$\psi_M^* \nabla \psi_M - \psi_M \nabla \psi_M^* = 2ik |\psi_M^+|^2 - 2ik |\psi_M^-|^2. \quad (3.7)$$

Así como

$$\frac{\hbar}{2mi} [\psi_M^* \nabla \psi_M - \psi_M \nabla \psi_M^*] = \frac{\hbar k_0}{m} [|\psi_M^+|^2 - |\psi_M^-|^2]. \quad (3.8)$$

Por lo tanto, sustituyendo la Ec.(3.8) en la Ec.(3.1) tenemos finalmente

$$J(M,N) = \frac{\hbar k_0}{m} \int_M [|\Psi_M^+|^2 - |\Psi_M^-|^2] dx \quad (3.9)$$

y ahora utilizamos el resultado

$$\int_M G(x)^2 dx = 1.$$

obtenemos finalmente

$$J(M,N) = \frac{\hbar k_0}{m} \left[|A(M,N)|^2 - |B(M,N)|^2 \right]. \quad (3.10)$$

La explicación de este resultado, es que la corriente total en cada celda es simplemente, la corriente a la derecha menos la corriente a la izquierda. Dependiendo de los paquetes presentes en una celda, podemos tener corrientes positivas o negativas.

Substituyendo ahora las Ecs.(2.23) en (3.10), tenemos

$$J(M,N) = v_0 \left[T [P_+(M-1,N-1) - P_-(M+1,N-1)] - R[P_+(M,N-1) - P_-(M,N-1)] \right] + \\ + i \sqrt{TR} v_0 \left[A(M-1,N-1) B^*(M,N-1) - A^*(M,N-1) B(M+1,N-1) - c.c. \right] \quad (3.11)$$

3.2 EL límite hidrodinámico

A continuación para poder calcular el coeficiente de difusión, el cual es derivable de acuerdo a la definición de la primera ley de Fick, tenemos que tomar el límite cerca del equilibrio esto es el límite hidrodinámico: primero, vamos al continuo espacial, en consecuencia suponemos que la distancia ℓ entre celdas adyacentes es muy pequeña, por tanto podemos hacer una expansión en series de Taylor a primer orden, en las funciones que dependan más allá de la posición de $x = M$, esto es $P(M \pm \ell, N)$, $A(M \pm \ell, N)$, y $B(M \pm \ell, N)$. Segundo, debemos tomar un límite de tiempos largos, que es el régimen temporal donde el

coeficiente de difusión dado por la primera ley de Fick está definido; en el cálculo de este límite suponemos que un estado cuasiestacionario ha sido alcanzado, o sea $P(M,N) \cong P(M,N-1)$. Bajo estas dos suposiciones obtenemos

$$\begin{aligned}
 J(M) = & -v_0 \ell \left[\frac{T}{2R} \right] \frac{d}{dM} \left[|A(M)|^2 + |B(M)|^2 \right] - \\
 & -v_0 \ell \left[\frac{T}{R} \right]^{1/2} \frac{i}{2} \left[A^*(M) \frac{dB(M)}{dM} + B^*(M) \frac{dA(M)}{dM} - \text{c.c.} \right] + \\
 & + v_0 \left[\frac{T}{R} \right]^{1/2} i \left[A(M) B^*(M) - \text{c.c.} \right].
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

De la deducción de esta ecuación (3.12) vemos que: el primer término fué derivable exclusivamente de las contribuciones incoherentes de la corriente. El segundo término en (3.12) es consecuencia de los términos de interferencia cuánticos y por tanto son de origen estrictamente cuántico, es decir, no son derivables de una teoría incoherente (clásica).

3.3 Los coeficientes de difusión Clásico y Cuántico.

De la última ecuación (3.12) podemos ver que hemos obtenido la generalización cuántica de la corriente de difusión. El primer término, da la contribución incoherente (sin interferencia) a la corriente de difusión, y es nada menos que la ley de Fick propuesta hace cien años por Fick. Este término muestra visualmente, que el coeficiente de difusión incoherente, es nada menos que el resultado de Landauer [3]:

$$D = v_0 \ell \frac{T}{2R}. \tag{3.13}$$

De aquí podemos entender que la ley de Fick es la contribución incoherente, esto es clásica, a la corriente de difusión. Por lo tanto entendemos que toda referencia al coeficiente de difusión en la forma definida por la ley de Fick, debe ser evaluada por

una teoría clásica, como son la ecuación de Boltzmann o una ecuación de tipo Fokker-Planck [1]. En consecuencia el uso de una teoría cuántica es absolutamente superflua. La razón de ésto es que ambas teorías, la clásica y la cuántica, darán la misma descripción a la corriente incoherente de probabilidad. Sin embargo el cálculo analítico de la ley de Fick es mucho más fácil en el marco de una teoría incoherente (clásica).

El segundo término en la Ec.(3.12), probablemente la contribución más importante de esta tesis, es una corrección a la corriente de difusión, debida exclusivamente a la interferencia cuántica. Esta corriente coherente, es semejante en estructura a la contribución incoherente. Lo nuevo de esta corriente, es que no es proporcional al gradiente de la densidad de probabilidad, sino que es proporcional al gradiente de la densidad de *amplitud* de probabilidad. Esta contribución no tiene análogo, ni manera de obtenerla en una teoría clásica. El coeficiente de proporcionalidad de la corriente coherente, define un nuevo coeficiente de difusión coherente, el cual denotamos por la letra C, y mirando la Ec.(3.12) vemos que

$$C = v_0 \ell \left\{ \frac{T}{R} \right\}^{1/2}. \quad (3.14)$$

Este coeficiente es, para valores razonables de T y R, del mismo orden de magnitud como el coeficiente de difusión incoherente (clásico) de Landauer (3.13). En la próxima sección demostraremos que el coeficiente coherente (3.14) tiende a cero cuando la red es de tamaño macroscópico.

El último término en la Ec.(3.12) es una contribución convectiva que depende de la presencia simultánea de ambos paquetes de onda en la misma celda de la red.

CAPITULO IV

CONCLUSIONES

4.1 Difusión macroscópica.

La teoría anteriormente presentada representa una teoría de difusión microscópica. Sin embargo en el contexto experimental, la razón R/T de dos cantidades referidas a la celda microscópica, tiene sólo un significado técnico, ya que esta razón no es una cantidad físicamente medible. A continuación, procedemos a demostrar cómo los coeficientes microscópicos T y R están relacionados a los coeficientes de transmisión y reflexión de una muestra *macroscópica* de longitud total L , donde si cada celda tiene una longitud ℓ y en la muestra hay un total de N celdas unitarias, entonces $L = N \ell$. De mecánica cuántica elemental, sabemos que, suponiendo flujos cuánticos incoherentes a tiempos diferentes (nuestro caso), la relación entre los coeficientes macroscópicos y microscópicos está dado por

$$\mathcal{T} = \frac{T}{1 + (N-1)R}, \quad \mathcal{R} = \frac{NR}{1 + (N-1)R}. \quad (4.1)$$

La demostración de estas ecuaciones se muestra a continuación: consideremos primero el caso más elemental de un sólido construido con sólo dos barreras como muestra la Fig. 4.1, en esta figura vemos que el coeficiente de reflexión \mathcal{R}_2 está dado por

$$\mathcal{R}_2 = R + T^2 R (1 + R^2 + R^4 + R^6 + \dots) \quad (4.2)$$

El cual se puede reescribir efectuando la serie armónica como

$$\mathcal{R}_2 = R + \frac{T^2 R}{1 - R^2} \quad (4.3)$$

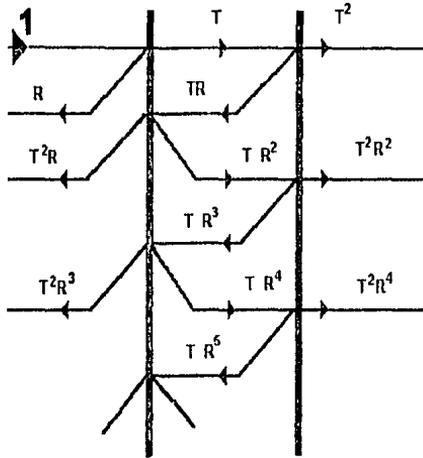


Fig. 4.1 Árbol de probabilidad para un sólido compuesto de únicamente dos barreras.

La cual todavía se puede simplificar utilizando la relación $T + R = 1$ dando como resultado final,

$$\mathcal{R}_2 = \frac{2R}{1+R} \quad (4.4)$$

De igual manera, de la misma Fig. 4.1, podemos ver que el coeficiente de transmisión \mathcal{T}_2 está dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_2 &= T^2 (1 + R^2 + R^4 + R^6 + \dots) \\ &= \frac{T^2}{1 - R^2} = \frac{T}{1 + R} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Podemos checar que nuestros coeficientes \mathcal{T}_2 y \mathcal{R}_2 satisfacen la condición de normalización de $\mathcal{T}_2 + \mathcal{R}_2 = 1$. De hecho, pudimos haber encontrado \mathcal{T}_2 del puro conocimiento de \mathcal{R}_2 y la

normalización misma. A continuación, tomamos el caso de un sólido con $N = 3$. Esto es, un sólido construido con sólo tres celdas. En este caso de la Fig. 4.2 vemos que el coeficiente de reflexión \mathcal{R}_3 está dado por

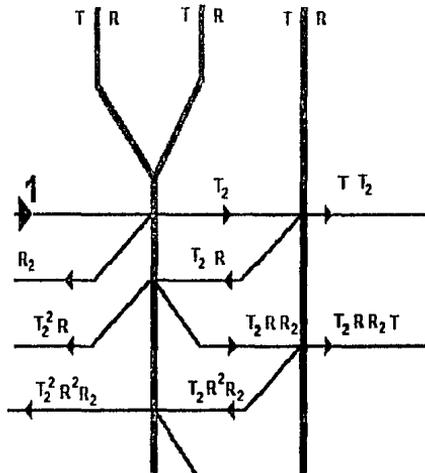


Fig. 4.2 Árbol de probabilidad para un sólido compuesto de únicamente tres barreras.

$$\mathcal{R}_3 = R_2 + T_2^2 R (1 + R R_2 + (R R_2)^2 + \dots). \quad (4.6)$$

La cual después de sustituir para R_2 dado por la Ec. (4.4) se simplifica a

$$\mathcal{R}_3 = \frac{3R}{1 + 2R}. \quad (4.7)$$

Utilizando a continuación la relación de normalización, encontramos el coeficiente \mathcal{T}_3 dado por

$$\mathcal{T}_3 = 1 - \mathcal{R}_3$$

$$= \frac{T}{1 + 2R} \quad (4.8)$$

Por inducción, generalizamos ahora para el caso de un sólido con un número N arbitrario de celdas. En este caso obtenemos las ecuaciones

$$T = \frac{T}{1 + (N-1)R}, \quad R = \frac{NR}{1 + (N-1)R}. \quad (4.9)$$

Lo cual demuestra la relación básica (4.1) que buscábamos.

A continuación, tomando la razón de ambas Ecs.(4.9), obtenemos

$$\frac{T}{R} = N \frac{T}{R}. \quad (4.10)$$

Sustituyendo la Ec.(4.10) en los coeficientes de difusión (2.41) y (2.42), obtenemos

$$D = \frac{v_0}{2} (N\ell) \frac{T}{R}$$

$$\boxed{D = \frac{v_0}{2} L \frac{T}{R}} \quad (4.11)$$

$$C = v_0 \sqrt{N\ell} \left(\frac{T}{R} \right)^{1/2} = \frac{v_0 (N\ell)}{\sqrt{N}} \left(\frac{T}{R} \right)^{1/2}$$

$$\boxed{C = \frac{v_0}{\sqrt{N}} L \left(\frac{T}{R} \right)^{1/2}} \quad (4.12)$$

Lo cual nos demuestra cómo depende cada coeficiente de difusión de los correspondientes coeficientes macroscópicos del sólido. En particular vemos que el coeficiente incoherente (clásico) D no es otra cosa que el mismo coeficiente reportado por Landauer en 1970 [3].

4.2 Límites de validez

Ahora podemos tomar el límite macroscópico (bulk limit), esto es, el límite donde el número de celdas en el sólido es muy grande. Por tanto tomamos el límite $N \rightarrow \infty$, haciendo simultáneamente el tamaño de cada celda tendiendo a cero ($\ell \rightarrow 0$), de tal manera que el tamaño del sólido $L = N \ell$ se mantenga constante. Siendo este parámetro L de tamaño macroscópico.

En este límite, de acuerdo con la Ec.(4.11), vemos que el coeficiente incoherente D , *permanece intacto*, mostrando en consecuencia, que el coeficiente de Landauer es el coeficiente correcto para un sólido macroscópico. Pero la conclusión fundamental de nuestra derivación, es que dicho coeficiente, por ser incoherente (clásico), *no precisa* para su deducción de una teoría cuántica. Cualquier método cuántico también dará este coeficiente, al precio de un cálculo muchísimo más tedioso. En cambio, una teoría clásica como la Ec.(2.24), da el mismo resultado sin la complicación matemática de la teoría coherente. De nuestro aprendizaje en esta derivación, se desprende que la ley de Fick, es una *descripción incoherente* (clásica), y por tanto, cualquier teoría o hipótesis que haga uso de esta ley como descripción fundamental de difusión, tiene que ser, por consistencia, una teoría o hipótesis clásica. Demostramos que la ley de Fick, sólo se puede utilizar en un sólido macroscópico. Esto es debido, a que sólo en este tamaño de sólido, la difusión clásica es válida.

En este mismo límite macroscópico de $N \rightarrow \infty$, de acuerdo con la Ec. (4.12), vemos que el coeficiente coherente C , *tiende a cero*. El significado físico de este resultado es, como esperábamos, que los efectos de interferencia cuántica en difusión, son despreciables en un sólido macroscópico. En otras palabras, la contribución coherente a la corriente de difusión, nunca va a ser observada en un sólido macroscópico.

Existe evidentemente, un sólido donde la teoría coherente muestra su total plenitud. Este sólido, es el sólido *mesoscópico*, donde el número N de celdas, es tan pequeño que los efectos cuánticos no se pueden despreciar. Es en este sólido mesoscópico, donde la nueva ley de difusión debe incluir la contribución coherente a la corriente. En estos materiales las nuevas leyes de transporte deben ser redefinidas. Predecimos, al menos

para difusión, que nuestra corrección a la ley de Fick jugará un papel fundamental en la descripción de los microcircuitos que ya se están produciendo para las computadoras.

BIBLIOGRAFIA

1. P. G. Shewmon, *Diffusión in Solids* (McGraw-Hill, New York, 1963).
2. T. J. Rivlin, *The Chebyshev Polinomials* (Wiley, New York, 1974).
3. R. Landauer, *Philos. Mag.*, **21**, 863 (1970).
4. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1970).
5. P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958); *Phys. Rev. B* **23**, 4828 (1981);
E. Abrahams, P.W. Anderson, D. C. Licciardello, y T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett* **42**, 673 (1979).
6. P.W. Anderson, D. J. Thoules, E. Abrahams, y D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).
7. S. Godoy, *J. Chem. Phys.* **94**, 6214 (1991).
8. E.N. Economu y C. M. Sokoulis, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 618 (1981).
9. D. S. Fisher y E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **24**, 2978 (1981).
10. D.C. Langreth y E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **24**, 2978 (1981).
11. O. N. Bleinstein and R. A. Handelsman, *Asymptotic Expansions of Integrals* (Dover, New York, 1986).
12. *Handbook of Mathematical Functions*, editado por M. Abramowitz y J. A. Stegun (Dover, New York, 1968).
13. P. A. Mello *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1089 (1988).
14. Manning, J. R., *Diffusión Kinetics for Atoms in Crystals*. D. Van Nostrand Company, Inc. Princeton, Toronto, 1968.
15. Tijonov A., Samarski A., *Ecuaciones de la Física Matemática*. Moscú, Ed. Mir, 1972.
16. Carslaw, H. S., Yaeger, Y.C.. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford, Cralendon Press, 1959.
17. Creanc J.. *Mathematics of Diffusion*. Oxford, Univ. Press, 1956.
18. Mc Quarrie, *Statistical Mechanics*. Harper and Row, N. Y. 1976.
19. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantum Mechanics*, vol. 1, Jhon Wiley, 1977.