00382

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

DIFUSION CUANTICA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADEMICO DE

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A

FRANCISCO ESPINOSA MAGAÑA

DIRECTOR DE TESIS: DR. SALVADOR GODOY SALAS

1996

2
2e J

VNIVERSIDAD NACIONAL
AVTONOMA DE
MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS
Divisiòn de Estudios
de Posgrado

Of. nùm. P-461

DR. SALVADOR GODOY SALAS
P r e s e n t e .

Por este conducto, me permito comunicarle que ha sido ratificado como Director de Tesis del M. EN C. FRANCISCO ESPINOSA MAGAÑA quien desarrollò el trabajo de Tesis titulado: Difusiòn Cuàntica.

Asi mismo le comunico, que la Direcciòn de la Facultad ha designado a los siguientes miembros como jurado para dictaminar si el trabajo que ha desarrollado como tesis del alumno arriba mencionado tiene los méritos para obtener el grado del DOCTORADO EN CIENCIAS (FISICA).

PRESIDENTE	: DR. SALVADOR GODOY SALAS
PRIMER VOCAL	: DR. LEOPOLDO GARCIA COLIN SCHERER
SEGUNDO VOCAL	: DR. ROSALIO FERNANDO RODRIGUEZ ZEPEDA
TERCER VOCAL	: DR. THOMAS HENRY SELIGMAN SCHURCH
SECRETARIO	: DR. HORACIO MARTINEZ VALENCIA
SUPLENTE	: DR. GERARDO CARMONA RUIZ
SUPLENTE	: DR. ARMANDO ORTIZ REBOLLO

En espera de su respuesta,quedo de ustedes.

A T E N T A M E N T E
Cd. Universitaria, D. F., 05 de Marzo de 1996.
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"
JEFE DE LA DIVISION

DRA. MARGARITA COLLAZO ORTEGA

MCO/AGL/ipp**

TITULO DE LA TESIS:

DIFUSION CUANTICA

GRADO Y NOMBRE DEL ASESOR O DIRECTOR DE TESIS:
Dr. SALVADOR GODOY SALAS

INSTITUCION DE ADSCRIPCION DEL ASESOR O DIRECTOR DE TESIS:
Facultad de Ciencias UNAM

RESUMEN DE LA TESIS: (Favor de escribir el resumen de su tesis a máquina en 25 renglones a un espacio como máximo, sin salir del extensión de este cuadro.

El objetivo principal de este trabajo consiste en desarrollar un modelo para la difusión de partículas en redes cristalinas unidimensionales en un intervalo muy amplio que comprende los regímenes microscópico, mesoscópico y macroscópico, partiendo de un modelo desarrollado por S. Godoy llamado camino aleatorio cuántico.

En este modelo se considera a las partículas representadas por paquetes de ondas que satisfacen la ecuación de Schrodinger. De esta manera se calcula la amplitud de probabilidad de encontrar a un paquete de ondas en cierta celda, distinguiendo entre las amplitudes de probabilidad de moverse hacia la derecha o hacia la izquierda. Así la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t es igual a la magnitud al cuadrado de la suma de las amplitudes de probabilidad que describen a los paquetes de ondas moviéndose hacia la derecha y hacia la izquierda. De esta manera se introduce un nuevo elemento que no aparece en el camino aleatorio clásico: interferencia cuántica.

Las contribuciones de investigación hechas se pueden resumir en los siguientes puntos:

1) Extender el modelo de camino aleatorio cuántico para incluir condiciones a la frontera. Con la finalidad de considerar eventualmente un gas ideal cuántico de Lorentz, se resuelve el problema de condiciones de frontera periódicas.

2) Se introduce, por primera vez en la literatura, el problema de la indistinguibilidad de las partículas en caminos aleatorios. Para resolver este problema de difusión, se aplica la estadística correspondiente para Fermiones y Bosones.

3) Se discuten las consecuencias físicas que se derivan del modelo en el límite mesoscópico clásico. En particular, se muestra que este modelo se puede utilizar para describir el fenómeno de difusión en todos los regímenes, desde el microscópico hast a el macroscópico.

LOS DATOS ASENTADOS EN ESTE DOCUMENTO CONCUERDAN FIELMENTE CON LOS REALES Y QUEDO ENTERADO QUE EN CASO DE CUALQUIER DISCREPANCIA QUEDARA SUSPENDIDO EL TRAMITE DEL EXAMEN.

FECHA DE SOLICITUD 25-04-96

FIRMA DEL ALUMNO

Acompaño los siguientes documentos:

- *Nombramiento del jurado del examen de grado*
- *Aprobación del trabajo escrito por cada miembro del jurado.*
- *Copia de la última revisión de estudios*

THESIS ABSTRACT

The purpose of this work is to develop a model to study the diffusion of particles in a one-dimensional periodic lattice in a wide range, covering the microscopic, mesoscopic and macroscopic regimes, with a theory created by S. Godoy and named Quantum Random Walk.

In this model the particles are treated as wave packets, satisfying the Schrodinger equation. In this way we compute the probability amplitude for finding the wave packet in a given cell in terms of the probability amplitudes for moving forward and backwards. So the probability for finding a particle in position x at time t is computed as the squared modulus of the sum of probabilities describing the right and left moving wave packets. In this way, it is introduced a new element not appearing in classical random walks: quantum interference.

The main research contributions made in this work are:

1) To extend the quantum random walk model to include boundary conditions. To the end of eventually consider an ideal Lorentz quantum gas, we solve the problem of periodic boundary conditions.

2) We introduce, for the first time in the literature, the problem of indistinguible particles in random walks. To solve the diffusion problem, we apply the corresponding statistics for Fermions and Bosons.

3) We discuss the physical consequencies derived from this model in the classical mesoscopic limit. It is shown that this model can be used to describe diffusion in all regimes, from microscopic to mesoscopic.

A mi esposa

Lucía

A mis hijos

Francisco y Ricardo

Deseo expresar mi sincero agradecimiento
al Dr. SALVADOR GODOY SALAS
por su apoyo y dirección durante
el desarrollo de este trabajo.

DIFUSION CUANTICA

PHYSICAL REVIEW E VOLUME 52, NUMBER 4 OCTOBER 1995

One-dimensional quantum random walk for fermions and bosons

Salvador Godoy
Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, México 04510, Distrito Federal, México

Francisco Espinosa
Instituto Technológico y de Estudios Superiores de Monterrey, Campus Ciudad de México, México 14380, Distrito Federal, México

(Received 6 April 1995)

With the help of quantum-scattering-theory methods and the approximation of the stationary phase, we propose a one-dimensional quantum-random-walk (QRW) model, which describes for both tunneling and scattering above the potential, the coherent diffusion of independent particles described by wave packets in a periodic one-dimensional lattice. The QRW model describes for each lattice cell the time evolution of modulating amplitudes of two opposite-moving wave packets as they are scattered by periodic potential barriers. Since the QRW model is a coherent process, interference contributions in the probabilities bring about strong departures from classical results. For many identical free particles we obtain the theoretical and graphical Bose and Fermi two-body QRW probability distribution. The result is generalized to N identical free particles and we obtain the N-body Bose and Fermi QRW probability distribution.

PACS number(s): 05.40.+j

I. INTRODUCTION

Tunneling diffusion for mesoscopic materials has been studied extensively [1]. The diffusion coefficient in a system of noninteracting electrons, which was first found by Landauer [2], has been indirectly studied by several authors. In particular, since diffusion and conductivity are connected by the Einstein relation, the Landauer conductivity has been a fertile ground to *quantum* theoretical calculations [3–5].

It is well known that classical (*incoherent*) random walks have been used as simple mathematical models to study the microscopic theory of diffusion [6,7]. An example of quantum-random-walk theory for a single particle is known in the literature [8]. However, as far as we know, nobody has found a *coherent* random-walk process in position space for a system of identical free particles. The main purpose in this paper is to propose a quantum-random-walk (QRW) model for diffusion of Bose and Fermi free particles in a one-dimensional (1D) periodic lattice. The model is based in the following set of Markovian equations for the *amplitudes* of moving wave packets, which are scattered in a periodic lattice:

$$\begin{bmatrix} B[Ml,N\tau] \\ A[(M+1)l,N\tau] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{R}\,e^{i2kMl} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R}\,e^{-i2kMl} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A[Ml,(N-1)\tau] \\ B[(M+1)l,(N-1)\tau] \end{bmatrix} . \quad (1.1)$$

Here $A(Ml,N\tau)$ and $B(Ml,N\tau)$ are the position- and time-dependent modulating *amplitudes* of two wave packets moving freely in each valley, moving toward the right and left, respectively. With M an integer number $(0,\pm1,\pm2,\ldots)$, Ml denotes ~~the~~ discrete coordinates of any midpoint of a valley in the lattice (lattice constant l), and with N a positive integer number, $N\tau$ denotes the *discrete times* at which the centroid of any packet arrives at the coordinates of a midvalley. The parameter τ, called the jump time, is a fixed time associated with the scattering process. Be aware that, in this model, Eq (1.1) describes the amplitudes only at specific discrete coordinates and discrete times. In Eq. (1.1), R and T are the reflection and transmission coefficients of the microscopic potential barriers ($T+R=1$). Depending on the energy of the particle, walk (1.1) describes both a tunneling or scattering above the potential diffusion process in a 1D lattice.

This is a coherent model, with the one-body QRW probability density P at any midvalley, with coordinates $x=Ml$ and time $t=N\tau$ given, respectively, by (for simplicity we will use $l=1$ and $\tau=1$)

$$P(M,N)=|A(M,N)|^2+|B(M,N)|^2 . \quad (1.2)$$

Since A and B are given by the addition of complex numbers, we expect in (1.2) to have interference terms which will produce a strong departure from classical results.

In Secs. II–IV, using the quantum theory of scattering and the approximation of the stationary phase, a heuristic derivation of the above equations will be given. In Sec. V, for some specific initial conditions, we obtain the exact analytic solution for the amplitude equations $A(M,N)$ and $B(M,N)$. In Sec. VI we find that for a system of identical free particles the two-body Bose and Fermi QRW probability distribution is obtained. The result is generalized to the N free-body QRW Bose and Fermi probability distribution.

II. MICROSCOPIC DIFFUSION OF AMPLITUDES

Let us consider two arbitrary, opposite-moving, plain waves incoming upon a symmetric potential barrier at the origin. This potential barrier may be though of as the boundary between two adjacent cells of lattice constant l. In the stationary state for $k \geq 0$, the incoming wave functions are given by

$$\psi_{\pm}^{\rm inc}(x) = \begin{cases} ae^{+ikx}, & x<0 \\ be^{-ikx}, & x>0, \end{cases} \tag{2.1}$$

where a and b are arbitrary amplitudes. From elementary 1D quantum-scattering theory, the stationary outgoing solutions are given by

$$\psi_{\pm}^{\rm out}(x) = \begin{cases} [S_{11}(k)a + S_{12}(k)b]e^{-ikx}, & x<0 \\ [S_{21}(k)a + S_{22}(k)b]e^{+ikx}, & x>0. \end{cases} \tag{2.2}$$

Here $S_{ij}(k)$ are the matrix elements of the 2×2 scattering matrix S of the barrier at the origin.

Assuming the symmetries and invariance properties of (1) conservation of probability, (2) time-reversal invariance, and (3) invariance of the potential barrier under mirror reflections (symmetric about the origin), the S matrix has to be unitary and symmetric, with symmetry $S_{11}=S_{22}$, and $S_{12}=S_{21}$. S can then be parametrized in the general form [9]

$$S(k) = e^{i\alpha(k)} \begin{bmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{bmatrix}, \tag{2.3}$$

where $T(k)$ and $R(k)$ are the transmission and reflection coefficients, respectively. They satisfy $T+R=1$. The common phase $\alpha(k)$ may be neglected later on in the probability, as we will see in Sec. IV.

The above plane waves (2.1) and (2.2) leave the positions of the particles entirely unspecified. In order to describe a mass transport phenomenon, we need some localization in position. So, instead of plane waves, we choose to describe our diffusion model by localized wave packets which by assumption are scattered only at the cell's boundaries in a 1D lattice.

In the general case, the incoming wave packets are given by

$$\psi_{\pm}^{\rm inc}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{-i\omega(k)t} \begin{bmatrix} ae^{+ikx} \\ be^{-ikx} \end{bmatrix} dk, \quad \begin{matrix} x<0 \\ x>0. \end{matrix} \tag{2.4}$$

Here $\omega(k) \equiv \hbar k^2/2m$, and $g(k)$ is an arbitrary peaked function with spreading Δk, and with the maximum at $k=k_0$ (the average) which is associated with the particle velocities $v_0 = \pm\hbar k_0/m$ and energy $\epsilon_0 = \hbar\omega(k_0)$. The incoming packets (2.4), which are valid only for negative times, can be rewritten as

$$\psi_{\pm}^{\rm inc}(x,t) = \begin{bmatrix} ae^{+ik_0x} \\ be^{-ik_0x} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} g(k)e^{-i\omega(k)t} \begin{bmatrix} e^{+i(k-k_0)x} \\ e^{-i(k-k_0)x} \end{bmatrix} dk, \quad \begin{matrix} x<0 \\ x>0, \end{matrix} \tag{2.5}$$

or, in short notation,

$$\psi_{\pm}^{\rm inc}(x,t<0) = \begin{cases} ae^{+ik_0x}G(+x,t), & x<0 \\ be^{-ik_0x}G(-x,t), & x>0, \end{cases} \tag{2.6}$$

where we have defined the complex G function as

$$G(x,t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k)e^{-i\omega(k)t}e^{+i(k-k_0)x}. \tag{2.7}$$

The modulating $G(x,t)$ function depends on the particular form of $g(k)$. It is well known, for example, that if $|g(k)|^2$ is a Gaussian, then $G(x,t)$ is a spreading moving Gaussian [10]. $G(x,t)$ has the property that, if in k space, $|g(k)|^2$ is normalized to 1, then $|G(x,t)|^2$ in x space is also normalized to 1 [Bessel-Parseval relation]. Under time reversal and space reflection G satisfies $G(-x,-t)=G(x,t)^*$.

It is well known in quantum mechanics [10] that for a peaked function $g(k)$, the position of the maximum of the packet [centroid of $G(x,t)$] is well approximated by the requirement of the stationary phase [11] evaluated at $k=k_0$. Using this method of stationary phase for the two incoming waves in Eq. (2.5), we have the two incoming centroids moving according to the relation $x_i = \pm\omega'(k_0)t = \pm\hbar k_0 t/m$ (with $t<0$). If we choose both incoming centroids to be located exactly at the middle of their respective lattice valleys $x_i \equiv \mp l/2$, we have the same initial time $t_i = -lm/2\hbar k_0$. Just there, at the middle of their valleys, the wave functions of the incoming packets are given exactly by

$$\psi_{\pm}^{\rm inc}(x,t_i) = \begin{cases} A(x_i<0,t_i)e^{+ik_0x}G(+x,t_i), & x<0 \\ B(x_i>0,t_i)e^{-ik_0x}G(-x,t_i), & x>0, \end{cases} \tag{2.8}$$

where

$$\begin{bmatrix} A(x_i<0,t_i) \\ B(x_i>0,t_i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}. \tag{2.9}$$

Similarly, both outgoing wave packets are given by

$$\Psi_{\mp}^{\text{out}}(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\, g(k)e^{-i\omega(k)t}\begin{bmatrix}[aS_{11}(k)+bS_{12}(k)]e^{-ikx} & x<0\\ [aS_{21}(k)+bS_{22}(k)]e^{+ikx} & x>0\end{bmatrix} . \tag{2.10}$$

This integral, valid only for positive times, cannot be done unless an explicit model for the S matrix (or the potential barrier) is given. To avoid this, an approximation will be done. Since $g(k)$ is a sharp-peaked function centered at $k=k_0$, we can proceed to make a Taylor-series expansion of the matrix $\mathrm{S}(k)$ around k_0; we write

$$\mathrm{S}(k)=\mathrm{S}(k_0)+\frac{d\mathrm{S}}{dk_0}(k-k_0)+\cdots . \tag{2.11}$$

Next we go one step further in the approximation. Is it possible to make our approximation to zero order? That is, does $\mathrm{S}(k)\simeq\mathrm{S}(k_0)$? This will be true only if

$$|\mathrm{S}(k_0)|>>|d^n\mathrm{S}/dk_0^n| . \tag{2.12}$$

Certainly, Eq. (2.12) is not true for arbitrary values of k_0; however, just looking into any graph of the transmission coefficient $|S_{11}|^2$ vs energy in any particular model [10] will convince us that we can find such points in which Eq. (2.12) holds. Indeed, choosing large values for k_0, or points standing about the middle of resonant energies where the transmission coefficient $|S_{11}(k_0)|^2\equiv T(k_0)$ is almost flat, condition (2.12) is well satisfied. Under this smooth varying S-matrix condition, and assuming a peaked function $g(k)$, we can approximate the outgoing wave packet (2.10) as

$$\Psi_{\mp}^{\text{out}}(x,t)\simeq\begin{bmatrix}[aS_{11}(k_0)+bS_{12}(k_0)]e^{-ik_0x}\\ [aS_{21}(k_0)+bS_{22}(k_0)]e^{+ik_0x}\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}g(k)e^{-i\omega(k)t}e^{\mp i(k-k_0)x}dk\ , \quad \begin{matrix}x<0\\ x>0\end{matrix} , \tag{2.13}$$

or, in terms of the G function, we have

$$\Psi_{\mp}^{\text{out}}(x,t>0)\simeq\begin{cases}[aS_{11}(k_0)+bS_{12}(k_0)]e^{-ik_0x}G(-x,t)\ , & x<0\\ [aS_{21}(k_0)+bS_{22}(k_0)]e^{+ik_0x}G(+x,t)\ , & x>0 .\end{cases} \tag{2.14}$$

For the outgoing packets, both centroids will arrive at the midvalley positions $x_f=\mp l/2$ at the same time $t_f=+lm/2\hbar k_0=-t_i$ (notice that Wigner's time delay is neglected in this approximation). Therefore the outgoing wave functions at midvalleys will be given by

$$\Psi_{\mp}^{\text{out}}(x,t_f)\simeq\begin{cases}B(x_f<0,t_f)e^{-ik_0x}G(-x,t_f)\ , & x<0\\ A(x_f>0,t_f)e^{+ik_0x}G(+x,t_f)\ , & x>0 .\end{cases} \tag{2.15}$$

According to (2.14), the relation between the new (outgoing) and old (incoming) modulating amplitudes becomes

$$\begin{bmatrix}B(x_f<0,t_f=t_i+\tau)\\ A(x_f>0,t_f=t_i+\tau)\end{bmatrix} =\begin{bmatrix}S_{11}(k_0) & S_{12}(k_0)\\ S_{21}(k_0) & S_{22}(k_0)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}A(x_i<0,t_i)\\ B(x_i>0,t_i)\end{bmatrix} , \tag{2.16}$$

where we have defined τ, the jump time, as the time for the round trip $\tau\equiv2|t_i|=l/\omega_0'=lm/\hbar k_0$. Notice that, in this approximation, at each cell the outgoing packets have different amplitudes and directions of motion compared with the incoming packets. However according to (2.15), the outgoing packets have the same form and centroid position (the middle of the valley) as the incoming ones. Thus in turn these outgoing packets will become incoming packets for the next scattering process at the two adjacent barriers, and the whole scattering process repeats itself. A recursive diffusion process will be carried out this way. Equations (2.16) are the basic recursive partial difference equations upon which we will build our quantum-random-walk (QRW) model.

III. QRW ONE-BODY WAVE FUNCTION

In this section we apply the results of Sec. II to a periodic crystal lattice (Kronig-Penney model), in which free particles described by wave packets move in the potential valleys, and from each valley to the next by quantum tunneling (or scattering above the potential). As in Sec. II, for mathematical simplicity, we have the origin at a potential barrier. In order to discuss our QRW diffusion model for an arbitrary cell, let us denote cell M as the valley bounded by two potential barriers at $(M-1)l$ and $Ml(M\equiv0, \pm1, \pm2, \dots)$. We also shift the time to $t=N\tau$, such that for arbitrary multiples ($N\equiv0$, 1, 2, . . .) of the jump time τ, the centroids are located at midvalley positions. In this proposed QRW model of diffusion, we generalize the results of Sec. II in such a way that *at every lattice valley M* we have both right- and left-moving packets, each of whose wave function at a fixed discrete time $t=N\tau$ is given by

$$\Psi_M(x,N\tau)=[A(Ml,N\tau)e^{+ik_0x}$$
$$+B(Ml,N\tau)e^{-ik_0x}]G(x,N\tau,M) \quad (3.1)$$

$$\equiv \Psi_M^+(x,N\tau)+\Psi_M^-(x,N\tau) . \quad (3.2)$$

Here the coordinates $(Ml,N\tau)$ denote the cell-position (Ml) and discrete-time $(N\tau)$ dependence of the modulating amplitudes A and B for right- and left-moving packets, respectively.

In this QRW model, by assumption, we neglect more than one cell spreading of the packets. That is, at all times the wave packets are assumed to be bounded to a *single cell*. The function $G(x,N\tau,M)$ is centered at the midvalley M, and we assume that $G(x,N\tau,M)\neq 0$, only if $(M-1)l<x<Ml$. Therefore in the QRW model we neglect the time dispersion of the packets beyond a single cell of size l. Under this assumption every wave packet has no overlapping to neighboring cells. This assumption limits, for *short times only*, the validity of our solution as a true Schrödinger wave packet. Clearly this prevents us from finding, for long times, the correct stationary solution (Bloch's wave functions).

The normalization requires

$$\int_{\text{cell}M} dx\,|G(x,N,M)|^2=1$$

and

$$\int_{\text{cell}\neq M} dx\,|G(x,N,M)|^2=0 . \quad (3.3)$$

The amplitudes A and B satisfy, for arbitrary lattice valleys M and $M+1$, the same recursive equations (2.16). That is, for a scattering at the potential barrier at $x=Ml$, we have the relations (for simplicity $l=\tau\equiv 1$ from now on)

$$\begin{bmatrix} B[M,N+1] \\ A[M+1,N+1] \end{bmatrix}=S(k_0,M)\begin{bmatrix} A[M,N] \\ B[M+1,N] \end{bmatrix} . \quad (3.4)$$

Here the right-hand side at time N has incoming amplitudes for right-moving $A(M,N)$ and left-moving $B(M+1,N)$ packets. The left-hand side has the corresponding outgoing amplitudes, one jump time later $N+1$. $S(k_0,M)$ denotes the S matrix associated with the barrier located at $x=M$. Notice that for the single fact of having the barrier shifted at $x=M$, the S matrix now has the mathematical structure [9]

$$S(k_0,M)=US(k_0,0)U^T$$
$$=\begin{bmatrix} e^{ik_0M} & 0 \\ 0 & e^{-ik_0M} \end{bmatrix}$$
$$\times S(k_0,0)\begin{bmatrix} e^{+ik_0M} & 0 \\ 0 & e^{-ik_0M} \end{bmatrix} . \quad (3.5)$$

Therefore the general S matrix located at $x=M$ is parametrized as

$$S(k_0,M)=e^{i\alpha(k_0)}\begin{bmatrix} \sqrt{R}\,e^{+ik_02M} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R}\,e^{-ik_02M} \end{bmatrix} . \quad (3.6)$$

Equation (3.4) which *for amplitudes* has the same mathematical structure of a Markovian random-walk process, defines the basic equations of our QRW model.

IV. ONE-BODY QRW PROBABILITY

We want the conditional, one-body probability of finding a particle at an arbitrary lattice cell M. It is conditional because it depends strongly on the initial conditions. Since the packets do not overlap, we can integrate the one-body probability density for a single $\Psi_M(x,N)$ along a cell M:

$$P(M,N)\equiv \int_{\text{cell}M} |\Psi_M(x,N)|^2 dx$$

$$=\int_M |\Psi_M^+(x,N)+\Psi_M^-(x,N)|^2 dx . \quad (4.1)$$

Substituting from Eq. (3.1), we have

$$P(M,N)=|A(M,N)|^2+|B(M,N)|^2$$
$$+\left[\int_M \Psi_M^+(x,N)\Psi_M^-(x,N)^* dx+\text{c.c.}\right] . \quad (4.2)$$

Here the integral is an interference contribution produced by the total superposition, at the same cell M, of two packets moving in *opposite* directions. After some elementary integrations the explicit value of this integral is given by

$$\int_M \Psi_M^+(x,N)\Psi_M^-(x,N)^* dx = AB^*\int_M dx\, e^{i2k_0x}|G(x,N,M)|^2$$
$$=AB^*\exp(i2\hbar k_0^2 t/m)\int_{-\infty}^{\infty} dk\, g(k)g^*(k+2k_0)e^{i\hbar 2k_0kt/m} . \quad (4.3)$$

The last integral has two $g(k)$ functions, $g(k)$ centered at k_0 and the other $g(k+2k_0)$ centered at $-k_0$. Since by hypothesis we have a sharp distribution of momenta around k_0 so that $\Delta k \ll k_0$, the two g functions do not overlap in k space and the integral is negligible. Two wave packets traveling in opposite directions are orthogonal. The only interference will come from packets superposing in the same valley and traveling in the *same* direction. The final result for (4.2) is that the total probability at each lattice cell is an incoherent superposition of two wave packets moving in opposite directions:

$$P(M,N)=|A(M,N)|^2+|B(M,N)|^2$$
$$\equiv P_+(M,N)+P_-(M,N) . \qquad (4.4)$$

So far this looks like a classical result. However, notice that according to Eq. (3.4) both $A(M,N)$ and $B(M,N)$ are made of a coherent superposition of two amplitudes, currently traveling in the *same* direction, but evaluated at a previous time. This will produce quantum interference, as we show next. Substituting Eq. (3.4) into Eq. (4.4), we find

$$P_+(M,N)\equiv|A(M,N)|^2$$
$$=TP_+(M-1,N-1)+RP_-(M,N-1)$$
$$+\sqrt{TR}\,[iA(M-1,N-1)B^*(M,N-1)$$
$$\times e^{+ik_0 2M}+\text{c.c.}] , \qquad (4.5a)$$

$$P_-(M,N)\equiv|B(M,N)|^2$$
$$=RP_+(M,N-1)+TP_-(M+1,N-1)$$
$$+\sqrt{TR}\,[iA^*(M,N-1)B(M+1,N-1)$$
$$\times e^{-ik_0 2(M+1)}+\text{c.c.}] . \qquad (4.5b)$$

The existence of these interference terms makes the great difference between classical (incoherent) and quantum (coherent) random processes. Notice that if we arbitrarily neglect the interference terms in Eqs. (4.5), we recover the classical (incoherent) correlated walk equations of Ref. [7], namely

$$P_+(M,N)=TP_+(M-1,N-1)+RP_-(M,N-1) , \qquad (4.6a)$$

$$P_-(M,N)=RP_+(M,N-1)+TP_-(M+1,N-1) . \qquad (4.6b)$$

From these classical (incoherent) equations, the Landauer diffusion coefficient $D_1=(v_0 l)T/2R$ has been readily derived [7]. However, in Ref. [8] it was proved that if the full interference contributions are taken into account, then we have an additive quantum correction to the diffusion coefficient $D_2=(v_0 l)\sqrt{T/R}$.

V. ONE-BODY QRW ANALYTIC SOLUTION FOR AN INFINITE LATTICE

The set of finite difference Eqs. (3.4) can, in principle, be solved for any arbitrary set of initial and boundary conditions. For simplicity we take an infinite lattice, and choose an initial single wave packet at arbitrary cell m moving to the right:

$$A(M,N=0)=\delta_{M,m} , \quad B(M,N=0)=0 . \qquad (5.1)$$

Given these initial conditions, the solution of Eq. (3.4) is obtained as follows: we first define the characteristic functions $\tilde{A}(s,N)$ and $\tilde{B}(s,N)$ by a finite Fourier transform

$$\begin{bmatrix}\tilde{A}(s,N)\\ \tilde{B}(s,N)\end{bmatrix}\equiv\sum_{M=-\infty}^{\infty}e^{isM}\begin{bmatrix}A(M,N)\\ B(M,N)\end{bmatrix} . \qquad (5.2)$$

Neglecting common phase $[\alpha(k)]$ and Fourier transforming Eq. (3.4), we obtain a Markov chain equation

$$\begin{bmatrix}\tilde{A}(s,N)\\ \tilde{B}(s-2k,N)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}i\sqrt{T}e^{is} & \sqrt{R}\\ \sqrt{R}e^{i2k} & i\sqrt{T}e^{-i(s-2k)}\end{bmatrix}\times\begin{bmatrix}\tilde{A}(s,N-1)\\ \tilde{B}(s-2k,N-1)\end{bmatrix} , \qquad (5.3)$$

where for simplicity we have dropped the subindex from k_0. From now on, every equation which depends on the central momentum of the packet will be denoted just by k.

Equation (5.3) is a first-order difference equation in variable N, and has the formal solution

$$\begin{bmatrix}\tilde{A}(s,N)\\ \tilde{B}(s-2k,N)\end{bmatrix}=\mathrm{P}(s,k)^N\begin{bmatrix}\tilde{A}(s,0)\\ \tilde{B}(s-2k,0)\end{bmatrix} , \qquad (5.4)$$

where we have defined the $\mathrm{P}(s,k)$ matrix as

$$\mathrm{P}(s,k)\equiv\begin{bmatrix}i\sqrt{T}e^{is} & \sqrt{R}\\ \sqrt{R}e^{i2k} & i\sqrt{T}e^{-i(s-2k)}\end{bmatrix} . \qquad (5.5)$$

Using the standard methods of linear algebra, we obtain

$$\mathrm{P}(s,k)^N=g(s,N)\mathrm{P}(s,k)+g(s,N-1)e^{i2k}\mathrm{I} . \qquad (5.6)$$

Here the scalar function $g(s,N)$ is the Green's function of the problem, and is given by

$$g(s,N)\equiv\frac{\lambda_+^N-\lambda_-^N}{\lambda_+-\lambda_-} ; \qquad (5.7)$$

where λ_+ and λ_- are the unitary eigenvalues of the P matrix, given by

$$\lambda_\pm=ie^{ik}e^{\mp i\theta(s,k)}$$

$$\text{with } \tan\theta=\frac{\sqrt{1-T\cos^2(s-k)}}{\sqrt{T}\cos(s-k)} . \qquad (5.8)$$

Substituting Eqs. (5.6), (5.7), and (5.1) into Eq. (5.4), we obtain

$$\begin{bmatrix}\tilde{A}(s,N)\\ \tilde{B}(s-2k,N)\end{bmatrix}=g(s,N)\begin{bmatrix}i\sqrt{T}e^{is(m+1)}\\ \sqrt{R}e^{i(2k+sm)}\end{bmatrix}+g(s,N-1)\begin{bmatrix}e^{i(2k+s)}\\ 0\end{bmatrix} . \qquad (5.9)$$

Next, taking the inverse Fourier series

$$\mathcal{G}(M,N)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}e^{-isM}g(s,N)ds , \qquad (5.10)$$

we finally arrive at—

$$A(M,N)=i\sqrt{T}\,\mathcal{G}(M-m-1,N)+e^{2ik}\mathcal{G}(M-m,N-1)\,, \tag{5.11a}$$

$$B(M,N)=\sqrt{R}\,e^{2ik(M+1)}\mathcal{G}(M-m,N)\,. \tag{5.11b}$$

In Appendix A we explicitly calculate the Green's function $\mathcal{G}(M,N)$, and the result is given by

$$\mathcal{G}(M,N+1)=i^{N}e^{i(N-M)k}\sum_{j=0}^{[(N-M)/2]}(-1)^{j}\left[\sqrt{T}\right]^{N-2j}\frac{(N-j)!}{j!\left[\dfrac{N-M-2j}{2}\right]!\left[\dfrac{N+M-2j}{2}\right]!}\,. \tag{5.12}$$

This Green's function is different from zero only if the coordinate M has the same parity as N.

Finally the one-body QRS probability distribution (4.4) then becomes

$$P(M,N)=T|\mathcal{G}(M-1,N)|^2+R|\mathcal{G}(M,N)|^2+|\mathcal{G}(M,N-1)|^2+\left[i\sqrt{T}e^{-2ik}\mathcal{G}^{*}(M,N-1)\mathcal{G}(M-1,N)+\text{c.c.}\right]\,. \tag{5.13}$$

In Fig. 1 we show an example of the one-body QRW probability distribution as a function of cell position M, and compare it with the classical probability distribution obtained with Eqs. (4.6) in Ref. [7]. From Fig. 1 we notice that the most important distinction between QRW and classical distributions is that the QRW shows the following:

(a) At any arbitrary time, there are well defined destructive and constructive interference points.

(b) There is an unexpected localization of the probability. The probability is conserved, so almost all probability lost in destructive interference points appears to be concentrated in the neighborhood of a single point where the probability has a big spike. This spike is a consequence of initially having the particle moving toward the right; see Eq. (5.1).

(c) The position of this localization overshoots by far the classical average value. Interference makes quantum particles diffuse faster.

(d) At fixed times, the QRW probability fluctuates very strongly between neighboring points, and also for fixed points the probability fluctuates very strongly between successive times. The cause of these fluctuations is nothing but interference.

(e) Notice also that, in clear distinction with classical diffusion theory, in the QRW diffusion process the values of the first few moments lose any physical meaning.

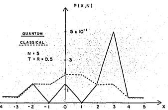


FIG. 1. Quantum and classical one-body probability distribution $P(M,t=5)$. Initial conditions: $A(M,0)=\delta_{M,0}$ and $B(M,0)=0$. The continuous line is a coherent QRW theory; the dashed line is incoherent.

VI. N-BODY QRW PROBABILITY FOR FERMIONS AND BOSONS

From Sec. III we have obtained, neglecting the spin wave function, for discrete times $t=N(N=1,2,\ldots)$, a one-particle QRW wave function $\phi^{(1)}(x_1,t)$. The superindex is to denote the initial condition (1) of that particle:

$$\phi^{(1)}(x_1,t)=\sum_{M=-\infty}^{+\infty}[A(M,t)e^{ik_0x_1}+B(M,t)e^{-ik_0x_1}]G(x_1,t,M)\,. \tag{6.1}$$

For our QRW function (6.1) with bounded packets, the state of the single free particle is determined at every cell M by the specification of the two central values $\pm k_0$ (times $2s+1$ for spin s). In the same cell M, two fermions with the same spin can only occupy two states of different central momentum $\pm k_0$. Full constructive (destructive) statistical interference for bosons (fermions) will come, at the same cell, only by having the same central momentum k_0. We choose the case of maximum statistical interference to present in this section.

As previously proved in (5.4), the modulating amplitudes $[A(M,t),B(M,t)]$ depend strongly on the specific initial conditions $[A(M,0),B(M,0)]$. Having a second particle with the same energy, if different initial conditions are given, QRW equations (3.4) generate different amplitudes, say $[C(M,t),D(M,t)]$, and therefore a different one-particle QRW wave function $\phi^{(2)}(x_2,t)$:

$$\phi^{(2)}(x_2,t)=\sum_{M=-\infty}^{+\infty}[C(M,t)e^{ik_0x_2}+D(M,t)e^{-ik_0x_2}]G(x_2,M,t)\ . \qquad (6.2)$$

In the case of two *identical* free particles diffusing in the same lattice, we have to introduce the correct symmetry under permutation operators [10]. For bosons and fermions we have the two-body QRW wave function, having one particle described by $\phi^{(1)}$ and the other by $\phi^{(2)}$:

$$\Psi(x_1,x_2,t)\equiv\tfrac{1}{2}[\phi^{(1)}(x_1,t)\phi^2(x_2,t)\pm\phi^{(1)}(x_2,t)\phi^2(x_1,t)]\ . \qquad (6.3)$$

The + sign is for bosons, the − for fermions.

Using this wave function we can obtain the *conditional* two-body QRW probability density $P(m,n,t|)$ for finding particle 1 on cell m and particle 2 simultaneously on cell n:

$$P(m,n,t|\phi^{(1)}(0),\phi^{(2)}(0))=\int_{\text{cell } m}dx_1\int_{\text{cell } n}dx_2|\Psi(x_1,x_2,t)|^2\ . \qquad (6.4)$$

Since we have a particle permutation symmetry (antisymmetry), we clearly have $P(n,m,t|)=P(m,n,t|)$. The quantum probability $\mathcal{P}(m,n,t|)$ of finding one (any) particle at cell m and the other one simultaneously at cell $n\neq m$ is

$$\mathcal{P}(m,n,t|)=P(m,n,t|)+P(n,m,t|)=2P(m,n,t|)\ . \qquad (6.5)$$

Normalization demands that

$$\sum_m\sum_n P(m,n,t|)=1\ . \qquad (6.6)$$

Symmetry and antisymmetry are conserved over time [10]. So for simplicity we neglect time notation, and from (6.3) and (6.4) we have

$$P(m,n|\phi^{(1)},\phi^{(2)})=\frac{1}{2}\left\{\int_m dx_1|\phi^{(1)}(x_1)|^2\int_n dx_2|\phi^{(2)}(x_2)|^2+\int_m dx_1|\phi^{(2)}(x_1)|^2\int_n dx_2|\phi^{(1)}(x_2)|^2\pm\left[\int_m dx_1\phi^{(1)}(x_1)\phi^{(2)*}(x_1)\int_n dx_2\phi^{(2)}(x_2)\phi^{(1)*}(x_2)+\text{c.c.}\right]\right\}\ . \qquad (6.7)$$

Since wave packets centered at different cells do not overlap, we have

$$P(m,n|\phi^{(1)},\phi^{(2)})=\tfrac{1}{2}\{[|A(m)|^2+|B(m)|^2]\times[|C(n)|^2+|D(n)|^2]+[|C(m)|^2+|D(m)|^2]\times[|A(n)|^2+|B(n)|^2]\pm[[A(m)C^*(m)+B(m)D^*(m)]\times[C(n)A^*(n)+D(n)B^*(n)]+\text{c.c.}\}\ . \qquad (6.8)$$

Defining the row-vector amplitudes $\phi_m^{(1)}$ and $\phi_m^{(2)}$ for each lattice cell m,

$$\phi_m^{(1)}(t)\equiv[A(m,t),B(m,t)]\ ,\quad \phi_m^{(2)}(t)\equiv[C(m,t),D(m,t)]\ , \qquad (6.9)$$

we have finally a condensed notation for (6.8):

$$P(m,n,t|\phi^{(1)},\phi^{(2)})=\tfrac{1}{2}\{|\phi_m^{(1)}|^2|\phi_n^{(2)}|^2+|\phi_m^{(2)}|^2|\phi_n^{(1)}|^2\pm[\phi_m^{(1)}\phi_m^{(2)\dagger}\times\phi_n^{(2)}\phi_n^{(1)\dagger}+\text{c.c.}]\}\ , \qquad (6.10)$$

where $\phi_m^{(1)\dagger}$ defines the adjoint of the vector $\phi_m^{(1)}$.

As an example, consider two identical particles having different initial conditions $\phi^{(1)}(0)$ and $\phi^{(2)}(0)$. Suppose the case in which, at some time later and at the *same* cell $(m=n)$, we have the two particles with different amplitudes but the same (right) direction of motion:

$$\phi_m^{(1)}=[A(m),0],\quad \phi_m^{(2)}=[C(m),0]\ . \qquad (6.11)$$

Substituting (6.11) into (6.10), we have

$$P(m,m|\phi^{(1)},\phi^{(2)})=\tfrac{1}{2}\{|A(m)|^2|C(m)|^2+|A(m)|^2|C(m)|^2\pm[A(m)C^*(m)C(m)A^*(m)+\text{c.c.}]\} \qquad (6.12)$$

or

$$P(m,m|\phi^{(1)},\phi^{(2)})=\begin{cases}2|A(m)|^2|C(m)|^2\ , & \text{Bose}\\ 0, & \text{Fermi}\ .\end{cases} \qquad (6.13)$$

As expected, the example shows that no matter what the values of the amplitudes $A(m)$ and $C(m)$, as long as $A(m)$ or $C(m)$ are not zero, two bosonic wave packets with the same position and momentum will have maximum constructive interference. This is the well known tendency for bosons to clump together in position. On the other hand, two fermionic packets with the same position and momentum will have, in space, maximum destructive interference (statistical repulsion). The 3D plot of Eq. (6.10) is shown in Fig. 2.

In the case of N *identical* free particles having the same energy and diffusing in the same lattice, the generalization is straightforward. We have now N initial conditions, and therefore N one-body QRW wave functions $\phi^{(j)}(j=1,2,\ldots,N)$. The N-body wave function Ψ is given by

$$\Psi(x_1,x_2,\ldots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P (\pm 1)^P P\phi^{(1)}(x_1,t) \times\phi^{(2)}(x_2,t)\cdots\phi^{(N)}(x_N,t)\,, \tag{6.14}$$

where P is the permutation operator of the states $(1),(2),\ldots,(N)$. If we define, for the one-body wave function j, the row vector $\phi_m^{(j)}(t)$ at cell m,

$$\phi_m^{(j)}(t)\equiv[A^{(j)}(m,t),B^{(j)}(m,t)]\,, \tag{6.15}$$

then the conditional N-body QRW probability density of finding particle 1 at cell s_1, particle 2 at cell s_2, etc., is given by

$$P(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|)=\frac{1}{N!}\sum_{PP'}(\pm 1)^{P+P'}PP'\phi_{s_1}^{(1)}\phi_{s_2}^{(2)}\cdots\phi_{s_N}^{(N)}\phi_{s_1}^{(1')\dagger}\phi_{s_2}^{(2')\dagger}\cdots\phi_{s_N}^{(N')\dagger}\,. \tag{6.16}$$

For symmetry in (6.16), all permutations of $\{s_1,s_2,\ldots,s_N\}$ give the same probability. The quantum probability $\mathcal{P}(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|)$ of finding one (any) particle at cell s_1, any other particle simultaneously at cell s_2, etc., is given by

$$\mathcal{P}(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|)=N!P(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|)\,. \tag{6.17}$$

Normalization demands that

$$\sum_{s_1}\sum_{s_2}\cdots\sum_{s_N}P(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|)=1\,. \tag{6.18}$$

ACKNOWLEDGMENT

The authors are particularly indebted to Dr. P. A. Mello for his serious interest and clever opinions of this work.

APPENDIX: ANALYTIC EXPRESSIONS FOR GREEN'S FUNCTION

In this appendix we derive an exact expression for the Green's function $\mathcal{G}(x,t)$ defined in (5.7) and (5.10):

$$\mathcal{G}(x,t)\equiv\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}e^{-isx}g(s,t)ds \quad \text{with } g(s,t)\equiv\frac{\lambda_+^N-\lambda_-^N}{\lambda_+-\lambda_-}\,. \tag{A1}$$

We want the exact solution. First we note that the function $g(s,t)$ is proportional to a Chebyshev polynomial of the second kind, $U_{t-1}(z)$. This is so because we can rewrite the eigenvalues λ as follows:

$$\lambda_\pm=ie^{ik}e^{\mp i\theta(s,k)} \quad \text{with } \tan\theta(s,k)\equiv\frac{\sqrt{1-T\cos^2(s-k)}}{\sqrt{T}\cos(s-k)}\,. \tag{A2}$$

Substituting Eq. (A2) into Eq. (A1), we obtain [12]

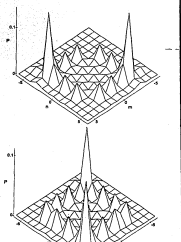


FIG. 2. Two-body QRW probability distribution $P(m,n,t=6)$. (a) is for fermions, (b) is for bosons. Initial conditions: $A(m,0)=\delta_{m,0}$, $B(m,0)=0$, $C(n,0)=0$, and $D(n,0)=\delta_{n,1}$. Notice the region $m=n$; fermions show statistical repulsion, bosons show clumping.

$$g(s,t)=i^{t-1}e^{ik(t-1)}\frac{\sin(t\theta)}{\sin\theta}$$
$$=(i)^{t-1}e^{ik(t-1)}\begin{cases}0, & t=0\\ U_{t-1}(z), & t\geq 1\ .\end{cases} \tag{A3}$$

Next the Chebyshev polynomial $U_t(z)$ can be written as [13]

$$U_t(z)=\sum_{j=0}^{[t/2]}\frac{(-1)^j(t-j)!}{j!(t-2j)!}(2z)^{t-2j}\ , \tag{A4}$$

and using the binomial theorem

$$(2z)^{t-2j}=\left[\sqrt{T}\right]^{t-2j}[e^{i(s-k)}+e^{-i(s-k)}]^{t-2j}$$
$$=(\sqrt{T})^{t-2j}\sum_{n=0}^{t-2j}\frac{(t-2j)!}{n!(t-2j-n)!}$$
$$\times e^{i(s-k)(t-2j-2n)}\ . \tag{A5}$$

If we substitute Eqs. (A4) and (A5) into Eq. (A1), and make an elementary integration, we have an expression for the Green's function as follows:

$$\mathcal{G}(x,t+1)=(i)^t\sum_{j=0}^{[t/2]}(-1)^j\left[\sqrt{T}\right]^{t-2j}\sum_{n=0}^{t-2j}\frac{e^{ik(2j+2n)}(t-j)!\delta(t-x,2j+2n)}{j!t!(t-2j-n)!}\ . \tag{A6}$$

Kronecker's delta implies that $\mathcal{G}(x,t+1)$ is different from zero only if $t-x=2(j+n)$. Since j and n are positive integers, then $t-x$ must be a positive even integer. Therefore t and x must have the same parity. Under these conditions $n=(t-x-2j)/2$ will be a positive integer only if $2j<t-x$. Therefore from (A6) we have the final result for $G(x,t+1)$:

$$\mathcal{G}(x,t+1)=(i)^te^{i(t-x)k}\sum_{j=0}^{[(t-x)/2]}(-1)^j\left[\sqrt{T}\right]^{t-2j}\frac{(t-j)!}{j!\left[\dfrac{t-x-2j}{2}\right]!\left[\dfrac{t+x-2j}{2}\right]!}\ . \tag{A7}$$

Notice that $\mathcal{G}(x,t+1)$ has even parity in the x variable.

[1] P. W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958); Phys. Rev. B 23, 4828 (1981); E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardelo, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).
[2] R. Landauer, Philos. Mag. 21, 863 (1970).
[3] P. W. Anderson, D. J. Thoules, E. Abrahams, and D. S. Fisher, Phys. Rev. B 22, 3519 (1980).
[4] E. N. Economu and C. M. Sokoulis, Phys. Rev. Lett. 46, 618 (1981).
[5] D. S. Fisher and E. Abrahams, Phys. Rev. B 24, 2978 (1981).
[6] P. G. Shewmon, *Diffusion in Solids* (McGraw-Hill, New York, 1963); *The Wonderful World of Stochastics*, edited by M. F. Shlesinger and G. H. Weiss (North-Holland, Amsterdam, 1985).
[7] S. Godoy, J. Chem. Phys. 94, 6214 (1991).
[8] S. Godoy and S. Fujita, J. Chem. Phys. 97, 5148 (1992).
[9] P. A. Mello, Phys. Rev. Lett. 60, 1089 (1988).
[10] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1963).
[11] O. N. Bleistein and R. A. Handelsman, *Asymptotic Expansions of Integrals* (Dover, New York, 1986).
[12] T. J. Rivlin, *The Chebyshev Polynomials* (Wiley, New York, 1974).
[13] *Handbook of Mathematical Functions*, edited by M. Abramowitz and J. A. Stegun (Dover, New York, 1968).

CONTENIDO

INTRODUCCION *i*

1 DIFUSION DE PARTICULAS EN UNA RED UNIDIMENSIONAL INFINITA 1

1.1 Dispersión de ondas planas por un potencial 1

1.2 Dispersión de paquetes de ondas por un potencial 10

1.3 Difusión en una red periódica infinita 15

1.4 Solución analítica en una red infinita 16

1.5 Cálculo de la probabilidad 26

1.6 Corrección cuántica a la corriente de difusión 34

1.7 El límite macroscópico 38

2 DIFUSION CUANTICA CON CONDICIONES A LA FRONTERA PERIODICAS 39

2.1 Difusión en una red con condiciones de frontera periódicas 40

2.2 Condiciones iniciales inhomogeneas 44

2.3 Condiciones iniciales homogeneas 55

2.4 Cálculo de la corriente de probabilidad 62

3 DIFUSION CUANTICA DE PARTICULAS INDISTINGUIBLES 65

3.1 QRW para un sistema de dos partículas indistinguibles 65

3.2 Cálculo de la probabilidad 67

3.3 QRW para un sistema de N partículas idénticas 78

4 DIFUSION MESOSCOPICA CLASICA 80

4.1 Difusión macroscópica 80

4.2 Difusión mesoscópica clásica 82

CONCLUSIONES 100

APENDICE: CALCULO DE LOS COEFICIENTES MACROSCOPICOS DE TRANSMISION Y REFLEXION 102

REFERENCIAS 106

INTRODUCCION

El fenómeno de la difusión de partículas en el regimen hidrodinámico clásico, puede modelarse a partir de dos ecuaciones: (*i*) conservación de la masa y (*ii*) Ley de Fick. De estas dos ecuaciones se deriva la ecuación de difusión clásica, que es una ecuación diferencial de tipo parabólico.

Si se considera la difusión en una red periódica unidimensional, la ecuación de difusión hidrodinámica puede deducirse también a partir de un modelo cinético, usando un proceso estocástico discreto llamado *camino aleatorio* (random walk) [1]. En este proceso estocástico, se logra el límite continuo cuando la duración de cada salto y la longitud del correspondiente desplazamiento tienden a cero. Es bien sabido que las ecuaciones de tipo parabólico implican una velocidad de propagación infinita y en el problema de la difusión, se ha sugerido que, para soslayar este inconveniente, se utilice en su lugar una ecuación hiperbólica, que es precisamente la *Ecuación del Telegrafista*, de tal manera que las ecuaciones constitutivas que dan lugar a esta descripción son: (*i*) conservación de la masa y (*ii*) la ecuación de Maxwell-Cattaneo. En el límite de tiempos grandes (comparados con el tiempo de relajación), la ecuación de Maxwell-Cattaneo se reduce a la Ley de Fick y por tanto, la ecuación del telegrafista a la ecuación de difusión clásica.

Sin embargo, para tiempos pequeños, la ecuación correcta debe ser la del telegrafista y la escala de tiempos donde ésta es aplicable define al regimen mesoscópico clásico en el fenómeno de la difusión. La pregunta que surge en este punto es: ¿cuál será el proceso estocástico asociado a la difusión mesoscópica?. La respuesta se puede encontrar utilizando un proceso cuántico dependiente del tiempo, llamado *camino aleatorio cuántico*, desarrollado por S. Godoy [3].

En este modelo de camino aleatorio cuántico, en adelante QRW, se considera a las partículas representadas por paquetes de ondas que satisfacen la ecuación de Schrödinger. De esta manera, se calcula la amplitud de probabilidad de encontrar a un paquete de ondas en cierta celda, distinguiendo entre las amplitudes de probabilidad de moverse hacia la derecha o hacia la izquierda. Como es general en Mecánica Cuántica, se interpreta a la probabilidad como el cuadrado hermitiano de la amplitud de probabilidad. En este modelo, la probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t es igual a la magnitud al cuadrado de la suma de las amplitudes de probabilidad que describen a los paquetes de ondas moviéndose hacia la derecha y hacia la izquierda. De esta manera se introduce un nuevo elemento que no aparece en el camino aleatorio clásico: *interferencia cuántica*.

En este trabajo de tesis, se toma como punto de partida el modelo de QRW con el fin de extenderlo a otros problemas de investigación en el tema de la difusión cuántica de partículas en redes. Las contribuciones de investigación hechas se pueden resumir en los siguientes puntos:

1) Extender el modelo de QRW para incluir condiciones a la frontera.

Con la finalidad de considerar eventualmente un gas ideal cuántico de Lorentz [4], se resuelve el problema de condiciones de frontera periódicas.

2) Se introduce, por vez primera en la literatura, el problema de la indistinguibilidad de las partículas en caminos aleatorios. Para resolver este problema de difusión cuántica, se aplica la estadística correspondiente para Fermiones y Bosones [5].

3) Finalmente, se discuten las *consecuencias físicas* que se derivan de este modelo. En particular, se muestra que el modelo de QRW se puede utilizar para describir el fenómeno de difusión en el regimen mesoscópico clásico.

La distribución del trabajo está constituída de la siguiente manera: en el capítulo uno se revisa, como antecedente, el modelo de QRW y su aplicación en el problema de la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional infinita.

En el capítulo dos, inicia propiamente el trabajo de esta tesis al introducir condiciones a la frontera. Utilizando el modelo de QRW se resuelve el problema de la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional *finita* con condiciones de frontera *periódicas*. Aquí se analizan dos tipos de condiciones iniciales: *homogéneas e inhomogéneas*. A las condiciones iniciales se les llama homogéneas si al tiempo inicial (t = 0), todas las celdas de la red tienen la misma probabilidad de estar ocupadas.

A las condiciones iniciales se les llama inhomogéneas si al tiempo inicial la función de distribución es diferente de cero sólo en una celda (distribución delta de Dirac).

Al resolver las ecuaciones con las dos condiciones iniciales propuestas y con condiciones de frontera periódicas, se encuentra que al transcurrir el tiempo, la densidad de probabilidad alcanza una distribución homogénea, independientemente de las condiciones iniciales. Sin embargo, no se alcanza el equilibrio en el sentido estricto, pues al calcular las corrientes de probabilidad a derecha e izquierda se observa que éstas fluctúan en ambos casos y, solamente cuando el tamaño de la muestra es grande, las fluctuaciones cuánticas de las corrientes tienden a cero, entendiéndose por equilibrio la situación donde la distribución adquiere un valor constante e igual para todos los puntos del espacio fase (*equal a priori probabilities*).

En el capítulo tres se resuelve el problema de la difusión cuántica de un sistema de partículas indistinguibles, en una red unidimensional infinita, introduciendo ahora la *estadística* correspondiente. Se resuelve primero en forma explícita, el problema de dos partículas difundiéndose en la red, considerando que éstas son *fermiones* o *bosones* y se calcula la probabilidad de encontrar simultáneamente a las dos partículas en dos celdas cualesquiera a un tiempo arbitrario. Al graficar estas soluciones se muestra la tendencia de los fermiones a separarse (repulsión estadística) y de los bosones a concentrarse (atracción estadística). A continuación se muestra el tratamiento a seguir en el caso de N partículas idénticas.

En el capítulo cuatro, se discute la física involucrada en estos procesos y se aplican los resultados al problema de la difusión en materiales *mesoscópicos clásicos* [6], encontrándose la ecuación de difusión generalizada para la función de distribución en este regimen. A continuación se pasa al límite continuo, donde se satisfacen dos ecuaciones cinéticas simultáneas para la densidad y la corriente: (i) conservación local de la masa y (ii) la ecuación de Maxwell-Cattaneo [7]. Separando las variables se encuentra que cada función individual, densidad y corriente, satisfacen la ecuación del telegrafista.

Finalmente se hace ver que el origen de la segunda derivada en el tiempo, en la ecuación de difusión mesoscópica proviene del carácter no Markoviano de la densidad.

Francisco Espinosa Magaña
Enero de 1996

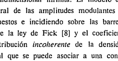
CAPITULO I

DIFUSION DE PARTICULAS EN UNA RED UNIDIMENSIONAL INFINITA

En este capítulo se revisará el modelo de Camino Aleatorio Cuántico, en adelante QRW (Quantum Random Walk), desarrollado por S. Godoy [3] para estudiar la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional infinita. El modelo describe, para cada celda de la red, la evolución temporal de las amplitudes modulantes de dos paquetes de ondas, moviéndose en sentidos opuestos e incidiendo sobre las barreras de potencial de la red. En particular se muestra que la ley de Fick [8] y el coeficiente de difusión de Landauer [2] se obtienen de la contribución *incoherente* de la densidad de corriente cuántica y aparece un término adicional que se puede asociar a una contribución *coherente* de estos procesos de interferencia.

1.1. DISPERSION DE ONDAS PLANAS POR UN POTENCIAL

Consideremos un potencial de forma arbitraria localizado en una región finita del eje x, sobre el cual incide una partícula libre representada por una onda plana, como se muestra en la siguiente figura.



La solución general de la ecuación de Schrödinger para este potencial es de la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} a\ e^{ikx} + b\ e^{-ikx} & , \quad x \to -\infty \\ c\ e^{ikx} + d\ e^{-ikx} & , \quad x \to +\infty \end{cases} \tag{1.1}$$

que describe a dos ondas planas incidiendo sobre la barrera de potencial con amplitudes de probabilidad (a,d) y dos ondas planas *salientes* cuyas amplitudes de probabilidad son (b,c). Podemos relacionar estas amplitudes de probabilidad a través de la llamada *matriz de dispersión* [9], definida de la siguiente manera:

$$b = S_{11}\, a + S_{12}\, d \tag{1.2a}$$

$$c = S_{21}\, a + S_{22}\, d \tag{1.2b}$$

que se puede escribir en forma matricial

$$\begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \mathsf{S} \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} \quad , \quad \mathsf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

A S se le llama la *matriz de dispersión* y depende de la forma del potencial particular que se esté utilizando. Sin embargo, podemos deducir para esta matriz algunas propiedades que no dependen del modelo particular. Debe ser unitaria, lo cual se demuestra si pedimos conservación de la probabilidad. Es bien sabido [9] que para un estado estacionario unidimensional la densidad de corriente de probabilidad

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\, \psi\right) \tag{1.4}$$

debe ser independiente de x. Al calcular j con las funciones de onda dadas en la ec.(1.1) y pedir que su valor sea el mismo a la derecha y a la izquierda del potencial se obtiene

$$|b|^2 + |c|^2 = |a|^2 + |d|^2 \tag{1.5}$$

Usando notación matricial, la ecuación anterior se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} b^* & c^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & d^* \end{pmatrix} \mathsf{S}^\dagger \mathsf{S} \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^* & d^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

donde $S^{\dagger}$ denota a la transpuesta conjugada de la matriz S. Por lo tanto $S^{\dagger}S = \mathbb{1}$, lo que prueba que S es una matriz unitaria. Esto significa que los elementos de matriz de S deben estar sujetos a las siguientes restricciones:

$$|S_{11}| = |S_{22}| \quad y \quad |S_{12}| = |S_{21}| \tag{1.7}$$

además,

$$|S_{11}|^2 + |S_{12}|^2 = 1 \quad y \quad S_{11}S_{12}^* + S_{21}S_{22}^* = 0 \tag{1.8}$$

Por otro lado, como el potencial es real, la ecuación de Schrödinger debe ser invariante ante inversiones en el tiempo [9]. Esto significa que la función

$$\psi'(x) = \begin{cases} a^* e^{-ikx} + b^* e^{+ikx}, & x \to -\infty \\ c^* e^{-ikx} + d^* e^{+ikx}, & x \to +\infty \end{cases} \tag{1.9}$$

también es una solución, lo cual a su vez implica que podemos escribir la siguiente relación entre las amplitudes:

$$\begin{pmatrix} a^* \\ d^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b^* \\ c^* \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

Combinando las ecs. (1.10) y (1.3) obtenemos

$$S^* S = \mathbb{1} \tag{1.11}$$

y esta condición, junto con la condición de unitariedad implica que la matriz S debe ser simétrica:

$$S_{12} = S_{21} \tag{1.12}$$

Ahora impongamos, por el momento, una condición adicional sobre el potencial: que sea una función par de la posición x. De esta forma se obtiene otra solución de la ecuación de Schrödinger al sustituir $x \to -x$ en la ec. (1.1):

$$\psi''(x) = \begin{cases} a\,e^{-ikx} + b\,e^{+ikx}, & x \to +\infty \\ c\,e^{-ikx} + d\,e^{+ikx}, & x \to -\infty \end{cases} \tag{1.13}$$

de donde obtenemos otra relación entre las amplitudes

$$\begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ a \end{pmatrix} \tag{1.14}$$

que se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{22} & S_{21} \\ S_{12} & S_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} \tag{1.15}$$

Comparando nuevamente con la ec. (1.3) vemos que se deben satisfacer las siguientes relaciones

$$S_{11} = S_{22} \quad \text{y} \quad S_{12} = S_{21} \tag{1.16}$$

En resumen, con las tres condiciones impuestas sobre la matriz S: *unitariedad, simetría y paridad*, ésta debe tener la forma

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{12} & S_{11} \end{pmatrix} \tag{1.17}$$

Ahora expresaremos esta matriz en términos de los coeficientes de reflexión y transmisión R y T. Volviendo a las ecs. (1.2a) y (1.2b), se pueden despejar los coeficientes a y b en términos de c y d, es decir, expresar los coeficientes de las ondas planas a la izquierda del potencial en términos de los coeficientes de las ondas planas a la derecha, en cuyo caso podemos escribir:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mathtt{M} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}, \text{ con } \mathtt{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \tag{1.18}$$

A $\mathtt{M}$ se le llama la *Matriz de Transición* y los coeficientes de transmisión y reflexión se expresan fácilmente en términos de los elementos de esta matriz, pues si se conside una onda plana incidente sobre la barrera de potencial por la izquierda y se hace $d = 0$, podemos escribir:

$$a = M_{11}c \tag{1.19a}$$

$$b = M_{21}c \tag{1.19b}$$

de donde se obtienen los coeficientes de transmisión y reflexión:

$$T = \left| \frac{c}{a} \right|^2 = \frac{1}{|M_{11}|^2} \tag{1.20a}$$

$$R = \left| \frac{b}{a} \right|^2 = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 \tag{1.20b}$$

Para expresar los elementos de la matriz de dispersión en términos de estos coeficientes, encontraremos la relación que existe entre los elementos de las matrices $\mathtt{S}$ y $\mathtt{M}$. Para ello, recordemos que

$$b = S_{11}\ a + S_{12}\ d \tag{1.21a}$$

$$c = S_{21}\ a + S_{22}\ d \tag{1.21b}$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones para a y b, encontramos:

$$a = \frac{1}{S_{12}} c - \frac{S_{22}}{S_{12}} d \tag{1.22a}$$

$$b = \frac{S_{11}}{S_{12}} c + \frac{S_{12}^2 - S_{11}S_{22}}{S_{12}} d \tag{1.22b}$$

Por tanto, podemos escribir en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{S_{12}} & -\frac{S_{22}}{S_{12}} \\ \frac{S_{11}}{S_{12}} & \frac{S_{12}^2 - S_{11}S_{22}}{S_{12}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \tag{1.23}$$

pero,

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \tag{1.24}$$

y comparando las dos expresiones anteriores, vemos que

$$M_{11} = \frac{1}{S_{12}} \qquad y \qquad M_{21} = \frac{S_{11}}{S_{12}} \tag{1.25}$$

por lo tanto

$$T = |S_{12}|^2 \qquad y \qquad R = |S_{11}|^2 \tag{1.26}$$

de donde podemos despejar a S_{12} y S_{11}:

$$S_{12} = \sqrt{T}\, e^{i\alpha} \tag{1.27a}$$

$$S_{11} = \sqrt{R}\, e^{i\beta} \tag{1.27b}$$

pero la ec. (1.8) nos muestra que las fases α y β no son independientes y la relación que existe entre ellas es:

$$\alpha = \beta + \pi/2 \tag{1.28}$$

y las ecs. (1.27a) y (1.27b) se pueden reescribir de la siguiente forma:

$$S_{11} = \sqrt{R}\, e^{i\beta} \tag{1.29a}$$

$$S_{12} = i\sqrt{T}\, e^{i\beta} \tag{1.29b}$$

Sustituyendo estas expresiones en la matriz S podemos expresarla únicamente en términos de la fase β:

$$S(k,0) = e^{i\beta(k)} \begin{pmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{pmatrix} \tag{1.30}$$

En esta última expresión se ha escrito, en forma explícita, la dependencia de la matriz de dispersión con la energía a través de k ($E = \hbar^2 k^2/2m$) y el segundo argumento en S indica que ésta se calculó para $x = 0$ y, por lo tanto, este resultado es válido sólo para un potencial simétrico, por ejemplo, un potencial rectangular o un potencial delta de Dirac centrados en el origen. Si la barrera de potencial se encuentra centrada en otra posición $x \neq 0$, entonces la ec. (1.30) ya no se cumple, pues en general $S_{11} \neq S_{22}$.

Para aplicar estos resultados en el problema de la difusión de partículas en una red periódica, en algún momento necesitaremos la expresión general de la matriz de dispersión, cuando el potencial no se encuentre en el origen. Supongamos entonces que el potencial se encuentra desplazado a la posición $x = x_0$ y definamos un nuevo eje coordenado x', de tal manera que el potencial esté centrado en $x' = 0$, es decir, hacemos una traslación de tal manera que $x' = x - x_0$. En este nuevo eje la solución general de la ecuación de Schrödinger será:

$$\psi(x') = \begin{cases} a' e^{ikx'} + b' e^{-ikx'} , & x' \to -\infty \\ c' e^{ikx'} + d' e^{-ikx'} , & x' \to +\infty \end{cases} \tag{1.31}$$

La matriz de dispersión, en este nuevo eje coordenado, se define de acuerdo a la siguiente relación:

$$\begin{pmatrix} b' \\ c' \end{pmatrix} = S(x'=0) \begin{pmatrix} a' \\ d' \end{pmatrix} \tag{1.32}$$

En realidad, lo único que hicimos fue cambiar de base: $(e^{ikx}, e^{-ikx}) \to (e^{ikx'}, e^{-ikx'})$ y si reescribimos la ec. (1.31) en términos de la base original tendremos:

$$\psi(x) = \begin{cases} a' e^{ik(x-x_0)} + b' e^{-ik(x-x_0)} , & x \to -\infty \\ c' e^{ik(x-x_0)} + d' e^{-ik(x-x_0)} , & x \to +\infty \end{cases}$$

$$= \begin{cases} a' e^{ikx} e^{-ikx_0} + b' e^{-ikx} e^{ikx_0} , & x \to -\infty \\ c' e^{ikx} e^{-ikx_0} + d' e^{-ikx} e^{ikx_0} , & x \to +\infty \end{cases} \tag{1.33}$$

Comparando las ecs. (1.1) y (1.33) vemos que los coeficientes en las dos bases están relacionados de una manera muy simple:

$$a = a' e^{-ikx_0}, \quad b = b' e^{ikx_0}, \quad c = c' e^{-ikx_0}, \quad d = d' e^{ikx_0} \tag{1.34}$$

Ahora, en la base (e^{ikx}, e^{-ikx}), la matriz de dispersión en $x=x_0$ está definida por medio de la ecuación:

$$\begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = S(x=x_0) \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix} \tag{1.35}$$

y si expresamos estos coeficientes en términos de a', b', c' y d', ec. (1.34), obtenemos:

$$\begin{pmatrix} b' e^{ikx_0} \\ c' e^{-ikx_0} \end{pmatrix} = S(x=x_0) \begin{pmatrix} a' e^{-ikx_0} \\ d' e^{ikx_0} \end{pmatrix} \tag{1.36}$$

Esta ecuación se puede escribir de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b' \\ c' \end{pmatrix} = S(x=x_0) \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ d' \end{pmatrix} \tag{1.37}$$

pero, por otro lado

$$\begin{pmatrix} b' \\ c' \end{pmatrix} = S(x'=0) \begin{pmatrix} a' \\ d' \end{pmatrix} \tag{1.38}$$

con

$$S(x'=0) = e^{i\beta(k)} \begin{pmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{pmatrix} \tag{1.39}$$

y la ec. (1.37) queda:

$$\begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} e^{i\beta(k)} \begin{pmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ d' \end{pmatrix} = S(x=x_0) \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' \\ d' \end{pmatrix} \tag{1.40}$$

de donde podemos despejar a $\mathsf{S}(x=x_0)$:

$$\mathsf{S}(x=x_0) = \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} e^{i\beta(k)} \begin{pmatrix} \sqrt{R} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \tag{1.41}$$

Finalmente,

$$\mathsf{S}(x=x_0) = e^{i\beta(k)} \begin{pmatrix} \sqrt{R}\, e^{2ikx_0} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R}\, e^{-2ikx_0} \end{pmatrix} \tag{1.42}$$

donde se ve claramente que la matriz de dispersión depende de la posición de la barrera de potencial.

Nótese que la transformación mostrada en la ec. (1.41) no es unitaria, a menos que se intercambien los dos renglones en las matrices de dispersión. La ec. (1.41) puede escribirse en la forma equivalente:

$$\begin{pmatrix} S_{21}(x_0) & S_{22}(x_0) \\ S_{11}(x_0) & S_{12}(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{-ikx_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{21}(0) & S_{2}(0) \\ S_{11}(0) & S_{12}(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ikx_0} & 0 \\ 0 & e^{ikx_0} \end{pmatrix} \tag{1.43}$$

que sí es una transformación unitaria.

1.2. DISPERSION DE PAQUETES DE ONDAS POR UN POTENCIAL

En la sección anterior se utilizaron ondas planas para calcular la matriz de dispersión, pero para describir un fenómeno de transporte de masa se requiere de cierta localización en el espacio y una onda plana es por definición, infinita en extensión. A continuación se supondrá que las partículas están descritas por paquetes de ondas más o menos localizados, los cuales serán dispersados sólo en las fronteras de cada celda. De esta manera se tendrá un modelo microscópico para describir la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional, partiendo de la ecuación de Schrödinger y suponiendo que la difusión tiene lugar por efectos de tunelaje cuántico y dispersión sobre las barreras de potencial.

Primero, consideremos dos ondas planas monoenergéticas moviéndose en sentidos opuestos e incidiendo ambas sobre un potencial dispersor en el origen. Las ondas incidentes por la izquierda y la derecha se escribirán como

$$\psi_+^{inc}(x) = a\, e^{ikx} \tag{2.1a}$$

$$\psi_-^{inc}(x) = b\, e^{-ikx} \tag{2.1b}$$

y las ondas dispersadas, en términos de los elementos de la matriz de dispersión, estarán dadas por las siguientes expresiones

$$\psi_-^{out}(x) = \Big[a\, S_{11}(k) + b\, S_{12}(k)\Big] e^{-ikx} \tag{2.2a}$$

$$\psi_-^{out}(x) = \Big[a\, S_{21}(k) + b\, S_{22}(k)\Big] e^{+ikx} \tag{2.2b}$$

Ahora construyamos los paquetes de ondas incidentes como una superposición lineal de ondas planas:

$$\psi_\pm^{inc}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{-i\omega(k)t} \begin{pmatrix} a\, e^{+ikx} \\ b\, e^{-ikx} \end{pmatrix} dk, \quad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0. \end{matrix} \tag{2.3}$$

En esta ecuación $\omega(k) \equiv \hbar k^2/2m$, y f(k) es una función arbitraria con un máximo pronunciado en $k=k_0$ y ancho Δk. Además, los paquetes se mueven con velocidades $v_0 = \pm\hbar k_0/m$ y tienen una energía $\varepsilon_0 = \hbar\omega(k_0)$. Las expresiones para los paquetes incidentes, que son válidas sólo para tiempos negativos (*suponemos que la interacción del paquete de ondas con el potencial ocurre a $t = 0$*), se pueden escribir de la siguiente manera

$$\psi_\pm^{inc}(x,t) = \begin{pmatrix} a\, e^{+ik_0x} \\ b\, e^{-ik_0x} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\, e^{-i\omega(k)t} \begin{pmatrix} e^{+i(k-k_0)x} \\ e^{-i(k-k_0)x} \end{pmatrix} dk \quad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0. \end{matrix} \tag{2.4}$$

o en notación más compacta

$$\psi_{\pm}^{inc}(x,t<0) = \begin{cases} a\ e^{+ik_0x}\ G(+x,t) & x < 0 \\ b\ e^{-ik_0x}\ G(-x,t) & x > 0. \end{cases} \qquad (2.5)$$

donde se ha definido la función compleja G(x,t) como

$$G(x,t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ f(k)\ e^{-i\omega(k)t}\ e^{i(k-k_0)x} \qquad (2.6)$$

y depende de la forma particular de $f(k)$.

Ahora supongamos que al tiempo inicial t_i se tienen dos paquetes de ondas en las posiciones $x_i = \mp l/2$ (l se identificará más adelante con la constante de la red) y moviéndose con velocidades $\pm\hbar k_0/m$, de tal manera que el tiempo inicial lo podemos escribir como $t_i = -lm/2\hbar k_0$ y las posiciones iniciales de los dos centroides están dadas por $x_i = \mp\hbar k_0 t/m$ (con $t < 0$). Justamente ahí, a la mitad de las celdas, las funciones de onda de los paquetes incidentes se pueden escribir como:

$$\psi_{\pm}^{inc}(x,t_i) = \begin{cases} A(x_i < 0,\ t_i)\ e^{+ik_0x}\ G(+x,t_i), & x < 0 \\ B(x_i > 0,\ t_i)\ e^{-ik_0x}\ G(-x,t_i), & x > 0 \end{cases} \qquad (2.7)$$

donde

$$\begin{bmatrix} A(x_i < 0,\ t_i) \\ B(x_i > 0,\ t_i) \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \qquad (2.8)$$

De igual forma, los dos paquetes de ondas salientes se pueden escribir de la siguiente manera

$$\psi_{\mp}^{out}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\ f(k)\ e^{-i\omega(k)t} \begin{cases} [a\ S_{11}(k) + b\ S_{12}(k)]\ e^{-ikx} & x < 0 \\ [a\ S_{21}(k) + b\ S_{22}(k)]\ e^{+ikx} & x > 0 \end{cases} \tag{2.9}$$

Esta integral, válida sólo para tiempos positivos, no se puede resolver analíticamente a menos que se tenga un modelo particular para la matriz S (o la barrera de potencial). Intentando llevar el análisis lo más lejos posible sin tener que recurrir a un potencial particular, podemos desarrollar la matriz $S(k)$ en serie de Taylor alrededor de k_0:

$$S(k) = S(k_0) + \frac{dS}{dk_0}(k - k_0) + \ldots \tag{2.10}$$

Además, supondremos que $S(k) \approx S(k_0)$, lo cual será cierto si

$$|S(k_0)| \gg |d^nS/dk_0^n| \qquad n \geq 1 \tag{2.11}$$

Es claro que la ec. (2.11) no es válida para valores arbitrarios de k_0; sin embargo, viendo una gráfica del coeficiente de transmisión $|S_{12}|^2$ vs. energía en cualquier modelo particular [9], es fácil convencerse de que siempre se pueden encontrar puntos donde la ec. (2.11) es válida. Escogiendo valores de k_0 correspondientes a energías altas o puntos entre dos energías de resonancia consecutivas donde el coeficiente de transmisión es casi plano, la condición anterior se satisface.

Bajo estas condiciones, las funciones de las ondas salientes (2.9) se pueden escribir como

$$\psi_{\mp}^{out}(x,t) \approx \begin{Bmatrix} [a\ S_{11}(k_0) + b\ S_{12}(k_0)]e^{-ik_0x} \\ [a\ S_{21}(k_0) + b\ S_{22}(k_0)]e^{+ik_0x} \end{Bmatrix}$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k)\ e^{-i\omega(k)t}\ e^{\mp i(k-k_0)x}\ dk \qquad \begin{matrix} x < 0 \\ x > 0 \end{matrix} \tag{2.12}$$

En términos de la función G(x,t):

$$\psi_{\mp}^{out}(x,t) \simeq \begin{cases} [a\ S_{11}(k_0) + b\ S_{12}(k_0)]\ e^{-ik_0x}\ G(-x,t) & x < 0 \\ [a\ S_{21}(k_0) + b\ S_{22}(k_0)]\ e^{+ik_0x}\ G(+x,t) & x > 0 \end{cases} \tag{2.13}$$

Para los paquetes de ondas salientes, ambos centroides llegarán a la mitad de las celdas, cuyas posiciones son $x_f = \pm l/2$, al mismo tiempo $t_f = +lm/2\hbar k_0 = -t_i$ (nótese que se despreció el tiempo de retardo). Por lo tanto, las funciones de las ondas salientes se pueden escribir como

$$\psi_{\mp}^{out}(x,t_f) = \begin{cases} B(x_f < 0,\ t_f)\ e^{-ik_0x}\ G(-x,t_f) & x < 0 \\ A(x_f > 0,\ t_f)\ e^{+ik_0x}\ G(+x,t_f) & x > 0. \end{cases} \tag{2.14}$$

De las ecs. (2.13) y (2.14) se ve que la relación entre las amplitudes modulantes de las ondas salientes e incidentes es

$$\begin{pmatrix} B(x_f < 0,\ t_f = t_i+\tau) \\ A(x_f > 0,\ t_f = t_i+\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}(k_0) & S_{12}(k_0) \\ S_{21}(k_0) & S_{22}(k_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(x_i < 0,\ t_i) \\ B(x_i > 0,\ t_i) \end{pmatrix} \tag{2.15}$$

donde se ha definido a $\tau \equiv lm/\hbar k_0$ como el "tiempo de salto". Nótese que en esta aproximación, en cada celda los paquetes de ondas salientes tienen diferentes amplitudes y direcciones de movimiento que los paquetes de ondas incidentes. Sin embargo, de acuerdo a la ec. (2.14) los paquetes de ondas salientes tienen la misma forma y posición del centroide (a la mitad de la celda) que los incidentes; a su vez, estos paquetes de ondas salientes serán paquetes de ondas incidentes para el siguiente proceso de dispersión en las barreras adyacentes y el proceso completo se repite nuevamente. De esta manera se genera un proceso recursivo de difusión. Las ecs. (2.15) son las ecuaciones en diferencias finitas sobre las cuales se construye el modelo de QRW.

1.3. DIFUSION EN UNA RED PERIODICA INFINITA

En esta sección se aplicarán los resultados anteriores a una red unidimensional periódica infinita (modelo de Kronig-Penney), en la cual las partículas libres descritas por paquetes de ondas se mueven en los valles entre dos potenciales y de un valle a otro por tunelaje cuántico o dispersión sobre el potencial. Para desarrollar el modelo de QRW para difusión en una celda arbitraria, se denotará por m al valle de la celda m-ésima limitada por dos barreras de potencial centradas en ml y $(m+1)l$, $(m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$. También, se escribirá $t = n\tau$, de tal manera que para múltiplos enteros del "tiempo de salto" $(n = 0, 1, 2, \ldots)$ los centroides se localicen en el punto medio de los valles. En este modelo de QRW para difusión cuántica, se generalizan los resultados de la sección anterior de tal manera que en cada valle m se tengan dos paquetes de onda moviéndose a derecha e izquierda, cuya función de onda a un tiempo fijo $t = n\tau$ está dada por

$$\Psi_m(x,n\tau) = [A(ml,n\tau)e^{+ik_0x} + B(ml,n\tau)e^{-ik_0x}]\ G_m(x,n)$$

$$\equiv \Psi_m^+(x,n\tau) + \Psi_m^-(x,n\tau) \tag{3.1}$$

Aquí las coordenadas $(ml,n\tau)$ denotan la dependencia de las amplitudes modulantes A y B en la posición de la celda (ml) y el tiempo $(n\tau)$ para paquetes moviéndose a derecha e izquierda, respectivamente. En este modelo se supone también y es tal vez la aproximación más fuerte, que *los paquetes de ondas están limitados por una sola celda a cualquier tiempo* y la función $G_m(x,n)$ se encuentra centrada en la mitad del valle m. En otras palabras, suponemos que $G_m(x,n) \neq 0$ sólo si $ml < x < (m+1)l$. Esto significa que *los paquetes no tienen ningún traslape con las celdas vecinas*. Esta suposición nos da la solución correcta sólo para tiempos pequeños y no nos serviría para calcular la solución estacionaria para tiempos grandes.

Finalmente, al requerir que la función de onda esté normalizada obtenemos una condición sobre $G_m(x,t)$, que más adelante será de gran utilidad:

$$\int_{\text{celda } m} dx\ |G_m(x,n)|^2 = 1 \qquad \text{y} \qquad \int_{\text{celda} \neq m} dx\ |G_m(x,n)|^2 = 0 \tag{3.2}$$

1.4. SOLUCION ANALITICA EN UNA RED INFINITA

Las amplitudes A y B satisfacen, para celdas arbitrarias m y m+1, las mismas ecuaciones recursivas dadas en las ecs. (2.15). Si por simplicidad hacemos $l = \tau = 1$, entonces para dispersión en la barrera de potencial en $x = ml$ se tienen las ecuaciones:

$$A(m,n) = S_{21}(m)\, A(m-1,n-1) + S_{22}(m)\, B(m,n-1) \tag{4.1a}$$

$$B(m-1,n) = S_{11}(m)\, A(m-1,n-1) + S_{12}(m)\, B(m,n-1) \tag{4.1b}$$

que son las ecuaciones básicas que constituyen este modelo. Aquí A(m,n) y B(m,n) representan las *amplitudes modulantes* del paquete de ondas en la celda m-ésima y las S_{ij} representan los elementos de la matriz

$$S_m(k_0) \equiv S(k_0, x=ml) = \begin{pmatrix} \sqrt{R}\, e^{2ik_0 m} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R}\, e^{-2ik_0 m} \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

donde se ha omitido el factor $e^{i\beta}$ pues se cancela al calcular probabilidades, como se verá más adelante.

Para resolver el sistema infinito de ecuaciones en diferencias parciales, ecs. (4.1a) y (4.1b), se utilizará el método de Transformadas de Fourier para la variable espacial, m. Reescribiendo las ecs. (4.1a) y (4.1b) con los valores de S_{ij} de la ec. (4.2) se tiene:

$$A(m,n) = i\sqrt{T}\, A(m-1,n-1) + \sqrt{R}\, e^{-2ik_0 m}\, B(m,n-1) \tag{4.3a}$$

$$B(m-1,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0 m}\, A(m-1,n-1) + i\sqrt{T}\, B(m,n-1) \tag{4.3b}$$

o, en forma matricial

$$\begin{pmatrix} B(m-1,n) \\ A(m,n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{R}\, e^{2ik_0 m} & i\sqrt{T} \\ i\sqrt{T} & \sqrt{R}\, e^{-2ik_0 m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(m-1,n-1) \\ B(m,n-1) \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

Definiendo entonces la Transformada de Fourier [10] de las amplitudes A y B de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix}\tilde{A}(s,n)\\ \tilde{B}(s,n)\end{pmatrix} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism}\begin{pmatrix}A(m,n)\\ B(m,n)\end{pmatrix} \tag{4.5}$$

Transformando las ecs. (4.3a) y (4.3b), se obtiene

$$\tilde{A}(s,n) = i\sqrt{T}\,e^{is}\,\tilde{A}(s,n-1) + \sqrt{R}\,\tilde{B}(s-2k_0,n-1) \tag{4.6a}$$

$$\tilde{B}(s,n)\,e^{is} = \sqrt{R}\,\tilde{A}(s+2k_0,n-1)e^{i(s+2k_0)} + i\sqrt{T}\,\tilde{B}(s,n-1) \tag{4.6b}$$

y la ecuación (4.6b) se puede escribir como

$$\tilde{B}(s-2k_0,n) = \sqrt{R}\,\tilde{A}(s,n-1)\,e^{2ik_0} + i\sqrt{T}\,e^{-i(s-2k_0)}\,\tilde{B}(s-2k_0,n-1) \tag{4.7}$$

Las ecuaciones (4.6a) y (4.7) pueden expresarse en forma matricial de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix}\tilde{A}(s,n)\\ \tilde{B}(s-2k_0,n)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sqrt{T}\,e^{is} & \sqrt{R}\\ \sqrt{R}\,e^{2ik_0} & i\sqrt{T}\,e^{-i(s-2k_0)}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\tilde{A}(s,n-1)\\ \tilde{B}(s-2k_0,n-1)\end{pmatrix}$$

que representa un sistema de ecuaciones recursivas en el tiempo n. Por lo tanto, podemos expresar a las amplitudes transformadas, al tiempo n, en términos de las correspondientes amplitudes al tiempo inicial n = 0:

$$\begin{pmatrix}\tilde{A}(s,n)\\ \tilde{B}(s-2k_0,n)\end{pmatrix} = \mathbb{P}^n(s,k_0)\begin{pmatrix}\tilde{A}(s,0)\\ \tilde{B}(s-2k_0,0)\end{pmatrix} \tag{4.8}$$

donde se ha definido a la matriz $\mathbb{P}$ como

$$\mathbb{P}(s,k_0) = \begin{pmatrix} i\sqrt{T}\, e^{is} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R}\, e^{2ik_0} & i\sqrt{T}\, e^{-i(s-2k_0)} \end{pmatrix} \tag{4.9}$$

Para resolver este sistema analíticamente y poder mostrar los resultados en forma gráfica, se escogerá por el momento, las condiciones iniciales de tal forma que la partícula se encuentre al tiempo inicial $n = 0$ en la celda m-ésima y moviéndose a la derecha:

$$A(m,0) = \delta(m,0) \tag{4.10a}$$

$$B(m,0) = 0 \tag{4.10b}$$

entonces,

$$\tilde{A}(s,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism} A(m,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism} \delta(m,0) = 1 \tag{4.11a}$$

$$\tilde{B}(s,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism} B(m,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism} (0) = 0 \tag{4.11b}$$

por lo tanto,

$$\mathbb{P}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{P}_{11} & \mathbb{P}_{12} \\ \mathbb{P}_{21} & \mathbb{P}_{22} \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbb{P}^n)_{11} \\ (\mathbb{P}^n)_{21} \end{pmatrix} \tag{4.12}$$

es decir

$$\tilde{A}(s,n) = (\mathbb{P}^n)_{11} \tag{4.13a}$$

$$\tilde{B}(s-2k_0,n) = (\mathbb{P}^n)_{21} \tag{4.13b}$$

Usando métodos de álgebra lineal, se puede demostrar que [11]:

$$\mathbb{P}^n = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}\,\mathbb{P} - \frac{\lambda_2\,\lambda_1^n - \lambda_1\,\lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}\,\mathbb{I} \tag{4.14}$$

donde λ_1 y λ_2 son los eigenvalores de $\mathbb{P}$, que pueden obtenerse de la ecuación:

$$\lambda^2 - \lambda\ \mathrm{traza}(\mathbb{P}) + \det(\mathbb{P}) = 0 \tag{4.15}$$

Sustituyendo de la ec. (4.9) las expresiones para la traza y el determinante de $\mathbb{P}$ obtenemos

$$\lambda^2 - i\sqrt{T}\,(e^{is} + e^{-is}\,e^{2ik_0})\,\lambda - e^{2ik_0} = 0 \tag{4.16}$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{i\sqrt{T}\,(e^{is} + e^{-is}\,e^{2ik_0}) \pm \sqrt{-T(e^{is} + e^{-is}\,e^{2ik_0})^2 + 4e^{2ik_0}}}{2}$$

$$= i\sqrt{T}\,e^{ik_0}\cos(s-k_0) \pm e^{ik_0}\sqrt{1 - T\cos^2(s-k_0)}$$

$$= i\left(\sqrt{T}\,e^{ik_0}\cos(s-k_0) \mp i\,e^{ik_0}\sqrt{1 - T\cos^2(s-k_0)}\right) \tag{4.17}$$

que se puede escribir como

$$\lambda_{1,2} = i\,e^{ik_0}\,e^{\mp i\theta(s,k_0)} \tag{4.18}$$

donde se ha definido:

$$\theta \equiv \tan^{-1}\frac{\sqrt{1 - T\cos^2(s-k_0)}}{\sqrt{T}\cos(s-k_0)} = \cos^{-1}\left(\sqrt{T}\cos(s-k_0)\right) \tag{4.19}$$

Nótese que los eigenvalores son unitarios, como debe ser, pues la matriz es unitaria. En este caso, como $\lambda_1 \lambda_2 = - e^{2ik_0}$, podemos escribir

$$\mathbb{P}^n = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2} \mathbb{P} + e^{2ik_0} \frac{\lambda_1^{n-1} - \lambda_2^{n-1}}{\lambda_1 - \lambda_2} \mathbb{I}$$

$$= \bar{g}(s,n) \mathbb{P} + \bar{g}(s,n-1) e^{2ik_0} \mathbb{I} \tag{4.20}$$

con

$$\bar{g}(s,n) = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

$$= i^{n-1} e^{ik_0(n-1)} \frac{e^{-in\theta} - e^{in\theta}}{e^{-i\theta} - e^{i\theta}}$$

$$= i^{n-1} e^{ik_0(n-1)} \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\theta} \tag{4.21}$$

Por lo tanto

$$(\mathbb{P}^n)_{11} = \bar{g}(s,n) \mathbb{P}_{11} + \bar{g}(s,n-1) e^{2ik_0}$$

$$= i^{n-1} e^{ik_0(n-1)} \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\theta} i \sqrt{T} e^{is} + i^{n-1} e^{ik_0(n-2)} \frac{\text{sen}[(n-1)\theta]}{\text{sen}\theta} \tag{4.22}$$

$$(\mathbb{P}^n)_{21} = \bar{g}(s,n) \mathbb{P}_{21} = i^{n-1} e^{ik_0(n-1)} \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\theta} \sqrt{R} e^{2ik_0} \tag{4.23}$$

Sustituyendo estos valores en la ec. (4.8), se obtiene

$$\bar{A}(s,n) = i^n \sqrt{T} e^{ik_0(n-1)} e^{is} \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\theta} + i^{n-2} e^{ik_0(n-2)} \frac{\text{sen}[(n-1)\theta]}{\text{sen}\theta} \tag{4.24}$$

$$\tilde{B}(s\text{-}2k_0,n) = i^{n-1}\sqrt{R}\, e^{ik_0(n+1)} \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\theta} \tag{4.25}$$

o bien,

$$\tilde{A}(s,n) = i\sqrt{T}\, e^{is}\, \tilde{g}(s,n) + e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n\text{-}1) \tag{4.26a}$$

$$\tilde{B}(s\text{-}2k_0,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n) \tag{4.26b}$$

Si ahora aplicamos la transformada inversa a las ecs. (4.26a) y (4.26b) obtenemos

$$A(m,n) = i\sqrt{T}\, g(m\text{-}1,n) + e^{2ik_0}\, g(m,n\text{-}1) \tag{4.27a}$$

$$B(m,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)}\, g(m,n) \tag{4.27b}$$

Aquí el problema es calcular

$$g(m,n) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\, \tilde{g}(s,n)\, dk \tag{4.28}$$

donde

$$\tilde{g}(s,n) = i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)} \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\theta} \tag{4.29}$$

y θ está definido en la ec. (4.19).

Para expresar en forma analítica a la función $g(m,n)$, notemos que $\tilde{g}(s,n)$ es proporcional al polinomio de Chebyshev de segunda clase:

$$U_n(z) = \frac{\text{sen}[(n+1)\cos^{-1} z]}{\text{sen}(\cos^{-1} z)} \tag{4.30}$$

pues $\tilde{g}(s,n)$ se puede escribir como

$$\bar{g}(s,n) = i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)} \frac{\operatorname{sen}\left[n \cos^{-1}\left(\sqrt{T} \cos(s-k_0) \right) \right]}{\operatorname{sen}\left[\cos^{-1}\left(\sqrt{T} \cos(s-k_0) \right) \right]}$$

$$= i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)}\, U_{n-1}\left(\sqrt{T} \cos(s-k_0) \right), \quad n \geq 1 \tag{4.31}$$

Por otro lado, los polinomios de Chebyshev $U_n(z)$ se pueden expresar de la siguiente manera [12]:

$$U_n(z) = \sum_{j=0}^{\left[n/2\right]} (-1)^j \frac{(n-j)!}{j!(n-j)!} (2z)^{n-2j} \;;\; \left[n/2\right] = \text{mayor entero} \leq \frac{n}{2} \tag{4.32}$$

y, por el teorema del binomio

$$(2z)^n = \left[2\sqrt{T} \cos(s-k_0) \right]^n$$

$$= \left(\sqrt{T}\right)^n \left[e^{i(s-k_0)} + e^{-i(s-k_0)} \right]^n$$

$$= \sum_{l=0}^{n} \frac{n!}{l!\,(n-l)!}\, e^{i(s-k_0)(n-1)}\, e^{-i(s-k_0)l}$$

$$= \sum_{l=0}^{n} \frac{n!}{l!\,(n-l)!}\, e^{i(s-k_0)(n-2l)} \tag{4.33}$$

así que

$$(2z)^{n-2j} = \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \sum_{l=0}^{n-2j} \frac{(n - 2j)!}{l!\ (n - 2j - l)!}\ e^{i(s - k_0)(n - 2j - 2l)} \tag{4.34}$$

entonces, la ec. (4.32) se puede escribir como

$$U_n(z) = \sum_{j=0}^{\left[n/2\right]} (-1)^j \frac{(n-j)!}{j!\ (n-2j)!} \sum_{l=0}^{n-2j} \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-2j)!}{l!\ (n-2j-l)!} e^{i(s-k_0)(n-2j-2l)} \tag{4.35}$$

por lo tanto

$$\tilde{g}(s,n+1) = i^n\ e^{ik_0 n} \sum_{j=0}^{\left[n/2\right]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \sum_{l=0}^{n-2j} \frac{(n-j)!\ e^{i(s-k_0)(n-2j-2l)}}{j!\ l!\ (n - 2j - l)!} \tag{4.36}$$

Sustituyendo esta expresión en la ec. (4.28), se obtiene

$$g(m,n+1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\ i^n\ e^{ik_0 n} \sum_{j=0}^{\left[n/2\right]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j}$$

$$\times \sum_{l=0}^{n-2j} \frac{(n - j)!\ e^{i(s-k_0)(n-2j-2l)}}{j!\ l!\ (n-2j-l)!}\ ds \tag{4.37}$$

pero

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\ e^{i(s - k_0)(n - 2j - 2l)}\ ds$$

$$= e^{-ik_0\ (n - 2j - 2l)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\ e^{is(n - 2j - 2l)}\ ds$$

y llevando a cabo la integral se tiene, finalmente

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\, e^{i(s - k_0)(n - 2j - 2l)}\, ds = e^{-ik_0(n - 2j - 2l)}\, \delta(n - m, 2j + 2l) \tag{4.38}$$

que sustituído en la ec. (4.37) da

$$g(m,n+1) = i^n e^{ik_0 n} \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j}$$

$$\times \sum_{l=0}^{n-2j} e^{-ik_0(n-2j-2l)} \frac{(n-j)!\, \delta(n - m, 2j + 2l)}{j!\, l!\, (n - 2j - l)!}$$

$$= i^n \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \sum_{l=0}^{n-2j} \frac{(n-j)!\, e^{ik_0(2j + 2l)}\, \delta(n - m, 2j + 2l)}{j!\, l!\, (n - 2j - l)!} \tag{4.39}$$

La delta de Kronecker indica que $g(m,n+1) \neq 0$ sólo si $n - m = 2(j+l)$, lo que implica que n-m es un número entero positivo par. Además,

$$l = \frac{n - m - 2j}{2} > 0 \quad \text{sólo si} \quad 2j < n - m \tag{4.40}$$

y entonces el valor de j está restringido a

$$j < \frac{n - |m|}{2} \tag{4.41}$$

Finalmente, podemos escribir

$$g(m,n+1) = i^n \sum_{j=0}^{\frac{n-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-j)!\, e^{i(n-m)k_0}}{j!\left(\frac{n-m-2j}{2}\right)!\left(\frac{n+m-2j}{2}\right)!}$$

$$= i^n e^{i(n-m)k_0} \sum_{j=0}^{\frac{n-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-j)!}{j!\left(\frac{n-m-2j}{2}\right)!\left(\frac{n+m-2j}{2}\right)!} \tag{4.42}$$

Resumiendo, se ha resuelto el sistema de ecuaciones

$$\begin{pmatrix} B(m-1,n) \\ A(m,n) \end{pmatrix} = \mathbf{S}_m \begin{pmatrix} A(m-1,n-1) \\ B(m,n-1) \end{pmatrix} \tag{4.43}$$

con condiciones iniciales $A(m,0) = \delta(m,0)$, $B(m,0) = 0$, y esta solución es de la forma

$$A(m,n) = i\sqrt{T}\, g(m-1,n) + e^{2ik_0}\, g(m,n-1) \tag{4.44a}$$

$$B(m,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)}\, g(m,n) \tag{4.44b}$$

con $g(m,n)$ expresada en la ec. (4.42).

En el tratamiento anterior, las condiciones iniciales se eligieron de tal manera que la partícula se encontraba inicialmente en $m = 0$ y moviéndose hacia la derecha, pero la generalización a condiciones iniciales arbitrarias es directa. Si la partícula se encuentra inicialmente en $m = x_0$ y moviéndose a la derecha, entonces

$$A(m,0) = \delta(m,x_0) \tag{4.45a}$$

$$B(m,0) = 0 \tag{4.45b}$$

y la solución es

$$A(m,n) = i\sqrt{T}\ g(m-x_0-1,n) + e^{2ik_0}\ g(m-x_0,n-1) \tag{4.46a}$$

$$B(m,n) = \sqrt{R}\ e^{2ik_0(m+1)}\ g(m-x_0,n) \tag{4.46b}$$

Por otro lado, si la partícula se encuentra inicialmente en $m = x_0$ pero moviéndose hacia la izquierda, tendremos

$$A(m,\ t = 0) = 0 \tag{4.47a}$$

$$B(m,\ t = 0) = \delta(m,x_0) \tag{4.47b}$$

y la solución de las ecs. (4.46a) y (4.46b) será

$$A(m,n) = \sqrt{R}\ e^{2ik_0(m+1)}\ g(m-x_0,n) \tag{4.48a}$$

$$B(m,n) = i\sqrt{T}\ g(m-x_0+1,n) + e^{2ik_0}\ g(m-x_0,n-1) \tag{4.48b}$$

Es esta solución analítica la que permitirá graficar la función de distribución de probabilidad, como se verá más adelante.

1.5. CALCULO DE LA PROBABILIDAD

En esta sección se calculará la *probabilidad condicional* de encontrar a la partícula en una celda arbitraria m al tiempo n, dado que se encontraba en x_0 al tiempo $n = 0$. Como los paquetes de ondas no se traslapan, se puede integrar la densidad de probabilidad en cada celda, ec. (3.1):

$$P(m,n) \equiv \int_{\text{celda } m} |\Psi_m(x,n)|^2\ dx = \int_m |\Psi_m^+(x,n) + \Psi_m^-(x,n)|^2\ dx \tag{5.1}$$

y en términos de la amplitudes A(m,n) y B(m,n) se puede escribir como

$$P(m,n) = |A(m,n)|^2 + |B(m,n)|^2 + [\int_m \psi_m^+(x,n)\psi_m^-(x,n)^* \, dx + c.c.] \tag{5.2}$$

La integral que aparece en el último término de la ec. (5.2) es una contribución de interferencia producida por la superposición total en la misma celda m, de dos paquetes de ondas moviéndose en direcciones opuestas. Esta integral puede escribirse como

$$\int_m \psi_m^+(x,n)\psi_m^-(x,n)^* \, dx = AB^* \int_m dx \, e^{2ik_0x} |G(x,n)|^2$$

$$= AB^* \exp(2i\hbar k_0^2 t/m) \int_{-\infty}^{\infty} dk \, f(k) \, f^*(k + 2k_0) \, e^{2i\hbar k_0 kt/m} \tag{5.3}$$

La última integral tiene dos funciones f(k), una centrada en k_0 y la otra en $-k_0$. Ya que, por hipótesis, se tiene una distribución con un máximo pronunciado en k_0 de tal forma que $\Delta k \ll k_0$, la integral es despreciable. El resultado final es que la probabilidad total en cada celda de la red es producida por la superposición de dos paquetes moviéndose en direcciones opuestas

$$P(m,n) = |A(m,n)|^2 + |B(m,n)|^2 \equiv P_+(m,n) + P_-(m,n) \tag{5.4}$$

Aunque ésto se parece a un resultado clásico, nótese que de acuerdo a las ecs. (4.1a) y (4.1b) las amplitudes A(m,n) y B(m,n) se forman a su vez por la superposición coherente de dos amplitudes viajando en la misma dirección, pero evaluadas en un tiempo anterior y ésto producirá interferencia cuántica como se muestra a continuación.

Si sustituímos las ecs. (4.3a) y (4.3b) en la ec. (5.4) tendremos

$$P_+(m,n) \equiv |A(m,n)|^2 = T\, P_+(m-1,n-1) + R\, P_-(m,n-1)$$
$$+ \sqrt{TR}\, [iA(m-1,n-1)B^*(m,n-1)e^{+2ik_0m} + c.c.] \tag{5.5a}$$

$$P_-(m,n) \equiv |B(m,n)|^2 = R\, P_+(m,n-1) + T\, P_-(m+1,n-1) +$$
$$+ \sqrt{TR}\, [iA^*(m,n-1)B(m+1,n-1)e^{-2ik_0(m+1)} + c.c.] \tag{5.5b}$$

En este punto conviene hacer un paréntesis y analizar lo que sucedería si despreciáramos, arbitrariamente, los términos de interferencia en las ecuaciones anteriores. En este caso, las ecs. (5.5a) y (5.5b) se reducirían al siguiente sistema de ecuaciones:

$$P_+(m,n) = T\,P_+(m-1,n-1) + R\,P_-(m,n-1) \tag{5.6a}$$

$$P_-(m,n) = R\,P_+(m,n-1) + T\,P_-(m+1,n-1) \tag{5.6b}$$

que definen un proceso aleatorio irreversible, conocido en la literatura como *Camino Aleatorio Persistente* (PRW) [13]. Es importante recalcar que éste es un proceso clásico, pues se eliminaron los términos de interferencia cuántica. En el capítulo cuatro volveremos a hablar de este proceso con más detalle.

Por el momento, volvamos a las ecuaciones cuánticas (con los términos de interferencia). Con el fin de mostrar gráficamente el comportamiento de la probabilidad, tomemos como caso particular la difusión cuántica de una partícula que al tiempo inicial se encuentra en el origen, $x_0 = 0$, y moviéndose a la derecha. La solución en este caso está dada por las ecs. (4.44a) y (4.44b), de donde obtenemos

$$|A(m,n)|^2 = T|g(m-1,n)|^2 + |g(m,n-1)|^2 + i\sqrt{T}\,e^{-2ik_0}\,g(m-1,n)g^*(m,n-1)$$
$$- i\sqrt{T}\,e^{2ik_0}\,g(m,n-1)g^*(m-1,n) \tag{5.7a}$$

$$|B(m,n)|^2 = R|g(m,n)|^2 \tag{5.7b}$$

por lo tanto, al sustituir las ecs. (5.7a) y (5.7b) en la ec. (5.4) obtenemos para la probabilidad

$$P(m,n) = T|g(m-1,n)|^2 + |g(m,n-1)|^2 + R|g(m,n)|^2$$
$$+ i\sqrt{T}\,e^{-2ik_0}\,g(m-1,n)g^*(m,n-1) - i\sqrt{T}\,e^{2ik_0}\,g(m,n-1)g^*(m-1,n) \tag{5.8}$$

donde la función g(m,n) está dada por la ec. (4.42):

$$g(m,n+1) = i^n\, e^{ik_0(n-m)} \sum_{j=0}^{\frac{n-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-j)!}{j!\left(\frac{n-2j+m}{2}\right)!\left(\frac{n-2j-m}{2}\right)!} \qquad (5.9)$$

Para simplificar los cálculos, se puede definir una nueva función real $\mathcal{G}$:

$$g(m,n+1) = i^n\, e^{ik_0(n-m)}\, \mathcal{G}(m,n+1) \qquad (5.10)$$

con

$$\mathcal{G}(m,n+1) \equiv \sum_{j=0}^{\frac{n-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-j)!}{j!\left(\frac{n-2j+m}{2}\right)!\left(\frac{n-2j-m}{2}\right)!} \qquad (5.11)$$

Finalmente, se puede escribir la ec. (5.8) en términos de la función $\mathcal{G}$:

$$P(m,n) = T\, \mathcal{G}^2(m-1,n) + \mathcal{G}^2(m,n-1) + R\, \mathcal{G}^2(m,n) - 2\sqrt{T}\, \mathcal{G}(m-1,n)\mathcal{G}(m,n-1) \qquad (5.12)$$

En las Figs. 1.1 a 1.4 se muestran las gráficas de P(m,n) Vs. m, para valores constantes de n, junto con la gráfica de la probabilidad clásica, obtenida al eliminar los términos de interferencia, ecs. (5.6). En las Figs. 1.5 a 1.8 se muestran gráficas de P(m,n) Vs. n, tomando ahora valores constantes de m. En todas las gráficas las condiciones iniciales son: $A(m,0)=\delta(m,0)$ y $B(m,0)=0$.

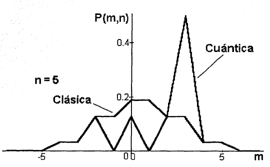


Figura 1.1

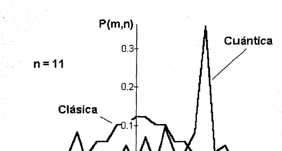


Figura 1.2

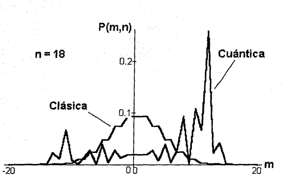


Figura 1.3

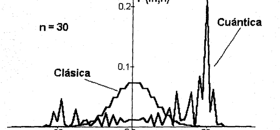


Figura 1.4

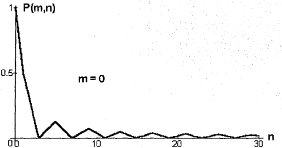


Figura 1.5

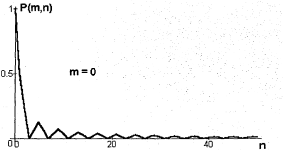


Figura 1.6

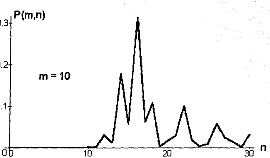


Figura 1.7

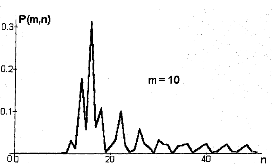


Figura 1.8

Al analizar estas gráficas se observa que la diferencia entre las distribuciones clásicas y cuánticas radica en que las últimas poseen las siguientes características:

a) A cualquier tiempo arbitrario la probabilidad cuántica presenta puntos de interferencia constructiva y destructiva bien definidos.

b) La probabilidad cuántica presenta picos muy bien localizados. Ya que la probabilidad se conserva, casi toda la probabilidad perdida por efectos de interferencia destructiva se concentra alrededor de un punto donde la probabilidad tiene un máximo.

c) La posición del pico (máximo) rebasa con mucho al valor promedio clásico. Esto significa que los efectos de interferencia cuánticos hacen que las partículas se difundan más rápidamente.

d) Para tiempos fijos, la probabilidad cuántica fluctúa fuertemente entre puntos sucesivos y para puntos fijos, la probabilidad fluctúa para tiempos sucesivos.

1.6. CORRECCION CUANTICA A LA CORRIENTE DE DIFUSION

En esta sección se calculará el coeficiente de difusión obtenido con el modelo de QRW y se comparará con el coeficiente de Landauer. Para ésto, nótese que la densidad de corriente de probabilidad j(m,n) en cada celda m se puede calcular de la siguiente forma

$$j(m,n) = \int_{\text{celda } m} \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \Psi_m^*(x,n) \frac{d\Psi_m(x,t)}{dx} - \Psi_m(x,n) \frac{d\Psi_m^*(x,n)}{dx} \right\} dx \tag{6.1}$$

que se puede escribir, utilizando la ec. (3.1) de la siguiente forma

$$j(m,n) = \frac{\hbar k_0}{m} \left\{ |A(m,n)|^2 - |B(m,n)|^2 \right\} = v_0[P_+(m,n) - P_-(m,n)] \tag{6.2}$$

Como era de esperarse, la corriente de probabilidad en cada celda es justamente la densidad de corriente moviéndose a la derecha menos la densidad de corriente moviéndose a la izquierda. Si ahora sustituimos las expresiones para P_+ y P_- de las ecs. (5.5a) y (5.5b), la ec. (6.2) queda como

$$j(m,n)/v_0 = \{T\ [P_+(m-1,n-1) - P_-(m+1,n-1)] + R\ [P_-(m,n-1) - P_+(m,n-1)]\}$$

$$+\ i\sqrt{TR}\ \{A(m-1,n-1)B^*(m,n-1)e^{+2ik_0m} - A^*(m,n-1)B(m+1,n-1)e^{-2ik_0(m+1)} - c.c.\} \quad (6.3)$$

Para interpretar físicamente los términos de la ecuación anterior, conviene expresar a la corriente total j(m,n) como la suma de dos componentes: $j_{coh}(m,n)$ y $j_{inc}(m,n)$, que llamaremos las corrientes *coherente e incoherente* respectivamente

$$j(m,n) \equiv j_{inc}(m,n) + j_{coh}(m,n) \quad (6.4)$$

donde

$$j_{inc}(m,n) \equiv v_0\ \{T\ [P_+(m-1,n-1) - P_-(m+1,n-1)] + R\ [P_-(m,n-1) - P_+(m,n-1)]\} \quad (6.5a)$$

$$j_{coh}(m,n) \equiv i\ v_0\ \sqrt{TR}\ \{A(m-1,n-1)B^*(m,n-1)\ e^{+2ik_0m} - A^*(m,n-1)B(m+1,n-1)\ e^{-2ik_0(m+1)} - c.c.\} \quad (6.5b)$$

Nótese que en la corriente coherente, j_{coh}, en la ec. (6.5b) aparecen únicamente términos que provienen de la interferencia cuántica en la probabilidad. En otras palabras, el término j_{coh} contiene la fuente de las fluctuaciones cuánticas. Por otro lado, la corriente incoherente J_{inc} contiene sólo la adición de probabilidades sin términos de interferencia. La corriente incoherente se pudo haber derivado de una teoría clásica y el resultado sería el mismo.

Con el fin de calcular el coeficiente de difusión, se tomará el *límite cercano al equilibrio*. Primero, se supondrá que el parámetro de la red l es muy pequeño, de tal manera que se pueda hacer un desarrollo en serie de Taylor alrededor de m, de las funciones $P(m+l,n)$, $A(m+l,n)$ y $B(m+l,n)$. Segundo, se supondrá un *límite de tiempos largos*, que es el regimen de tiempos donde el coeficiente de difusión está definido. Aquí se supone que se ha alcanzado un estado cuasi estacionario, esto es, que $P(m,n) \cong P(m,n-\tau) \equiv P(m)$ y que por comodidad escribimos independiente del tiempo. Con estas suposiciones la ec. (6.5a) queda, después de desarrollar en serie de Taylor, a primer orden en la posición x:

$$j_{inc}(m)/v_0 \cong (T - R)[P_+(m) - P_-(m)] - lT\ \frac{d}{dm}[P_+(m) + P_-(m)]$$

$$j_{inc}(m)/v_0 \cong (T - R)\ J(m)/v_0 - lT\ \frac{d}{dm}P(m) \tag{6.6}$$

y la ec. (6.5b) como

$$j_{coh}(m)/v_0 \cong -\sqrt{TR}\ i\ e^{+2ik_0m}\ \{A^*(m)l\ \frac{d}{dm}B(m) + B^*(m)l\ \frac{d}{dm}A(m) - c.c.\}$$

$$+\ i\ \sqrt{TR}\ 2\ \{e^{+2ik_0m}\ A(m)B^*(m) - c.c.\} \tag{6.7}$$

Sustituyendo estos dos resultados en la ec. (6.3) y después de un poco de álgebra se tiene:

$$j(m) \cong -\ v_0\ \frac{Tl}{2R}\ \frac{d}{dm}P(m) - \frac{v_0 l}{2}\sqrt{\frac{T}{R}}\ i\ \{e^{-2ik_0m}\ A^*(m)\ \frac{d}{dm}B(m) +$$

$$+\ e^{+2ik_0m}\ B^*(m)\ \frac{d}{dm}\ A(m) - c.c.\} + v_0\sqrt{\frac{T}{R}}\ i\ \{e^{+2ik_0m}\ A(m)B^*(m) - c.c.\} \tag{6.8}$$

Con esto se puede identificar los coeficientes de difusión, pues se ve claramente que existe una contribución incoherente:

$$j_{inc}(m) \cong -\ v_0 l\ \frac{T}{2R}\ \frac{d}{dm}P(m) \tag{6.9}$$

Como era de esperarse, esta corriente difusiva no es más que la ley de Fick. El modelo de QRW muestra que el coeficiente de difusión está dado por el resultado microscópico de Landauer [2]:

$$D = v_0 l\ \frac{T}{2R} = v_0^2\ \frac{T}{2R}\ \tau \tag{6.10}$$

Es importante recalcar que la ec. (6.9) se obtuvo utilizando únicamente la corriente incoherente, ec. (6.6). De hecho, si en lugar de utilizar las ecuaciones de QRW, ecs.(5.5), se toman las ecuaciones de PRW, ecs. (5.6), se tendría el mismo resultado.

Esto sugiere que la ley de Fick es un resultado clásico (incoherente). Tal parece que no se necesita una teoría cuántica para obtener el resultado de Landauer. Una teoría incoherente adecuada como la ecuación de Boltzmann o la de Fokker-Planck daría el mismo resultado con menos esfuerzo [14].

El otro término que se identificó como una corriente coherente, es decir, el segundo término en la ec. (6.8):

$$j_{coh}(m) = -v_0 l \sqrt{\frac{T}{R}}\,\frac{i}{2}\,\{e^{-2ik_0 m} A^*(m)\frac{d}{dm}B(m) + e^{+2ik_0 m} B^*(m)\frac{d}{dm}A(m) - c.c.\} \qquad (6.11)$$

es una corriente difusiva y es de origen puramente cuántico. Esta depende del gradiente de *amplitudes complejas* y no hay forma de obtener este resultado de una teoría clásica. Al coeficiente asociado que depende de las propiedades microscópicas de la red se le llamará *coeficiente de difusión coherente* C:

$$C \equiv v_0 l \sqrt{\frac{T}{R}} \qquad (6.12)$$

Como se muestra más adelante, este coeficiente tiende a cero conforme el tamaño de la muestra se incrementa.

Finalmente, se tiene otra contribución coherente, que corresponde al último término de la ec. (6.7):

$$j(m) = v_0 l \sqrt{\frac{T}{R}}\, i\, \{e^{+2ik_0 m} A(m)B^*(m) - c.c.\} \qquad (6.13)$$

y ya que esta NO es una corriente difusiva, se puede prescindir de ella en el presente contexto de transporte de masa. Este término corresponde al llamado *Transporte Balístico* y describe a las partículas que lograron moverse libremente sin colisiones.

1.7. EL LIMITE MACROSCOPICO

El modelo de QRW representa una teoría de difusión microscópica. Sin embargo, la razón R/T, conocida en la literatura como *Resistencia de Landauer* [6] no es una cantidad físicamente accesible. A continuación se mostrará cómo los coeficientes microscópicos T y R están relacionados a los correspondientes coeficientes medibles $\mathcal{T}$ y $\mathcal{R}$ de una muestra de longitud $L = Nl$ compuesta de N celdas idénticas sucesivas.

Si se supone que llega un paquete de ondas de amplitud de probabilidad uno a una muestra de longitud $L = Nl$ y se suma en forma incoherente la serie infinita de reflexiones y transmisiones parciales de las probabilidades salientes, se obtiene después de un poco de álgebra (ver apéndice):

$$\mathcal{T} = \frac{T}{1 + (N - 1)R}\,, \qquad \mathcal{R} = \frac{NR}{1 + (N - 1)R} \tag{7.1}$$

Ahora, si se toma el cociente de los coeficientes macroscópicos en la ec. (7.1) se tiene

$$\frac{T}{R} = N\,\frac{\mathcal{T}}{\mathcal{R}} \tag{7.2}$$

y sustituyendo la ec. (7.2) en los coeficientes de difusión D y C dados por las ecs. (6.10) y (6.12) se encuentra

$$D = v_0 l N\,\frac{\mathcal{T}}{2\mathcal{R}} = v_0 L\,\frac{\mathcal{T}}{2\mathcal{R}} \tag{7.3}$$

$$C = v_0 l\sqrt{\frac{N\mathcal{T}}{\mathcal{R}}} = v_0 l N\,\frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{\mathcal{T}}{\mathcal{R}}} = v_0 L\,\frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{\mathcal{T}}{\mathcal{R}}} \tag{7.4}$$

En el límite macroscópico, donde $l \le 1$ y $N \ge 1$, de tal forma que $Nl = L \to$ constante, se ve que el coeficiente de difusión de Landauer (incoherente) D en la ec. (7.3) permanece sin cambio. Sin embargo, el coeficiente de difusión coherente C en la ec. (7.4) tiende a cero como $(N)^{-1/2}$.

Esto muestra que en el fenómeno de la difusión cuántica en nanoestructuras las *fluctuaciones cuánticas* tienden a cero conforme el tamaño del cristal (y por lo tanto de los tiempos de difusión) aumenta.

CAPITULO II

DIFUSION CUANTICA CON CONDICIONES A LA FRONTERA PERIODICAS

En el capítulo anterior se revisó, con el modelo de QRW, el problema de la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional *infinita*. La primera extensión natural del modelo es la consideración de otro tipo de condiciones de frontera. En este capítulo se abandonará la idea de una red infinita y en su lugar se considerará una situación en la cual el tamaño del material pueda tener alguna relevancia. Con la idea de considerar un sistema de partículas confinadas y eventualmente un gas cuántico de Lorentz [4], se tratará el problema de la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional finita.

Considérese entonces una red cristalina formada por N celdas unitarias e igualmente espaciadas y separadas por barreras de potencial de forma arbitraria pero finitas en extensión, de tal manera que la longitud de la red sea $L = Nl$. Una posibilidad de abordar el problema sería suponer la existencia de fronteras reflectoras en los extremos de la red; sin embargo, esta condición se vuelve enormemente complicada desde el punto de vista matemático. Para evitar esta dificultad, se ignorará la presencia de estas fronteras, lo cual implica suponer que la red unidimensional de longitud L, con las barreras de potencial en las posiciones $m = 0, l, 2l, \ldots, (L-1)l$, forma parte de un conjunto infinito de réplicas idénticas a la red de longitud L. Es importante aclarar que la frase *réplicas idénticas* significa que lo que ocurre en una celda arbitraria de la red principal se repite en todas las demás réplicas. Entonces, cuando una partícula que se encuentra en la celda L-1 de la *red principal* experimenta un salto hacia la derecha, la partícula sale de la red, pero simultáneamente otra partícula entra a la celda $m = 0$, proveniente de la réplica que se encuentra a la izquierda. De esta manera se simula un sistema con condiciones a la frontera periódicas.

2.1. DIFUSION EN UNA RED CON CONDICIONES DE FRONTERA PERIODICAS

Si, como en el capítulo anterior, se supone que cada punto de la red está representado por un potencial centrado en ese punto, entonces las amplitudes deben satisfacer las relaciones (suponiendo $l=\tau=1$):

$$A(m,n) = i\sqrt{T}\,A(m-1,n-1) + \sqrt{R}\,e^{-2ik_0 m}\,B(m,n-1) \tag{1.1a}$$

$$B(m-1,n) = \sqrt{R}\,e^{2ik_0 m}\,A(m-1,n-1) + i\sqrt{T}\,B(m,n-1) \tag{1.1b}$$

o, en notación matricial

$$\begin{pmatrix} B(m-1,n) \\ A(m,n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(m-1,n-1) \\ B(m,n-1) \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

donde S_{ij} son los elementos de la matriz de transición.

Por otro lado, las condiciones de frontera periódicas implican que las amplitudes A(m,n) y B(m,n) satisfacen la condición

$$A(m,n) = A(m+L,n) \quad \text{y} \quad B(m,n) = B(m+L,n) \tag{1.3}$$

Para resolver el sistema de ecuaciones, ecs. (1.1a) y (1.1b), se utilizará una vez más el método de las Transformadas de Fourier [10]:

$$\tilde{A}(s,n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} A(m,n)\,e^{ism} \tag{1.4a}$$

$$\tilde{B}(s,n) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} B(m,n)\,e^{ism} \tag{1.4b}$$

y sus correspondientes transformadas inversas

$$A(m,n) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{A}(s,n)\, e^{-ism}\, ds \tag{1.5a}$$

$$B(m,n) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{B}(s,n)\, e^{-ism}\, ds \tag{1.5b}$$

Aplicando esta transformación a las ecs. (1.1a) y (1.1b) obtenemos

$$\tilde{A}(s,n) = i\sqrt{T}\sum_{m=-\infty}^{\infty} A(m-1,n-1)e^{ism} + \sqrt{R}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-2ik_0 m}\, B(m,n-1)e^{ism}$$

$$= i\sqrt{T}\, e^{is}\sum_{m=-\infty}^{\infty} A(m-1,n-1)e^{is(m-1)} + \sqrt{R}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(s-2k_0)}\, B(m,n-1)$$

$$= i\sqrt{T}\, e^{is}\,\tilde{A}(s,n-1) + \sqrt{R}\,\tilde{B}(s-2k_0,n-1) \tag{1.6}$$

$$\tilde{B}(s,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0}\,\tilde{A}(s+2k_0,n-1) + i\sqrt{T}\, e^{-is}\,\tilde{B}(s,n-1) \tag{1.7}$$

o escrito en forma matricial

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}(s,n) \\ \tilde{B}(s-2k_0,n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sqrt{T}\, e^{is} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R}\, e^{2ik_0} & i\sqrt{T}\, e^{-i(s-2k_0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}(s,n-1) \\ \tilde{B}(s-2k_0,n-1) \end{pmatrix}$$

$$= \mathbb{P}^n(s,k_0) \begin{pmatrix} \tilde{A}(s,0) \\ \tilde{B}(s-2k_0,0) \end{pmatrix} \tag{1.8}$$

donde se ha definido

$$\mathbb{P}(s,k_0) \equiv \begin{pmatrix} i\sqrt{T}\, e^{is} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R}\, e^{2ik_0} & i\sqrt{T}\, e^{-i(s-2k_0)} \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

Siguiendo un procedimiento análogo al del capítulo anterior, se puede escribir

$$\mathbb{P}^n = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}\,\mathbb{P} - \frac{\lambda_2\,\lambda_1^n - \lambda_1\,\lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}\,\mathbb{I} \tag{1.10}$$

donde λ se obtiene de la ecuación

$$\lambda^2 - \lambda\ \mathrm{traza}(\mathbb{P}) + \det(\mathbb{P}) = 0 \tag{1.11}$$

cuyas soluciones son

$$\begin{aligned}\lambda_{1,2} &= i\left(\sqrt{T}\cos(s - k_0) \mp i\sqrt{1 - T\cos^2(s - k_0)}\right) e^{ik_0} \\ &= i\, e^{ik_0}\, e^{\mp i\theta(s,k_0)}\end{aligned} \tag{1.12}$$

con

$$\tan\theta = \frac{\sqrt{1 - T\cos^2(s - k_0)}}{\sqrt{T}\cos(s - k_0)} \tag{1.13}$$

Al sustituir (1.12) en (1.10), se obtiene

$$\begin{aligned}\mathbb{P}^n &= \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}\,\mathbb{P} + e^{2ik_0}\,\frac{\lambda_1^{n-1} - \lambda_2^{n-1}}{\lambda_1 - \lambda_2}\,\mathbb{I} \\ &\equiv \tilde{g}(s,n)\,\mathbb{P} + \tilde{g}(s,n-1)\,e^{2ik_0}\,\mathbb{I}\end{aligned} \tag{1.14}$$

y $\bar{g}(s,n)$ definido de la siguiente forma

$$\bar{g}(s,n) = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2}$$

que se puede escribir, con ayuda de la ec. (1.12) como

$$\bar{g}(s,n) = i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)}\, \frac{e^{-in\theta} - e^{in\theta}}{e^{-i\theta} - e^{i\theta}}$$

$$= i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)}\, \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\ \theta} \tag{1.15}$$

Por lo tanto, los elementos de la matriz $\mathbb{P}$ son

$$(\mathbb{P}^n)_{11} = \bar{g}(s,n)\, \mathbb{P}_{11} + \bar{g}(s,n-1)\, e^{2ik_0} \tag{1.16a}$$

$$(\mathbb{P}^n)_{12} = \bar{g}(s,n)\, \mathbb{P}_{12} \tag{1.16b}$$

$$(\mathbb{P}^n)_{21} = \bar{g}(s,n)\, \mathbb{P}_{21} \tag{1.16c}$$

$$(\mathbb{P}^n)_{22} = \bar{g}(s,n)\, \mathbb{P}_{22} + \bar{g}(s,n-1)\, e^{2ik_0} \tag{1.16d}$$

Sustituyendo estas expresiones en la ec. (1.8) queda

$$\begin{pmatrix} \bar{A}(s,n) \\ \bar{B}(s-2k_0,n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{g}(s,n)\mathbb{P}_{11}+\bar{g}(s,n-1)e^{2ik_0} & \bar{g}(s,n)\ \mathbb{P}_{12} \\ \bar{g}(s,n)\ \mathbb{P}_{21} & \bar{g}(s,n)\mathbb{P}_{22}+\bar{g}(s,n-1)e^{2ik_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{A}(s,0) \\ \bar{B}(s-2k_0,0) \end{pmatrix} \tag{1.17}$$

En este momento es necesario imponer condiciones iniciales y es en este punto donde el procedimiento se separa del seguido en el capítulo uno. A continuación se resolverán las ecuaciones anteriores para dos casos: condiciones iniciales inhomogéneas y homogéneas.

2.2. CONDICIONES INICIALES INHOMOGENEAS

Primero se resolverá el problema con las condiciones iniciales empleadas en el capítulo uno, esto es, supone que la partícula se encuentra en la celda m = 0 al tiempo t = 0 y moviéndose a la derecha. Pero si A(m,n) y B(m,n) deben de satisfacer las condiciones de periodicidad, ecs. (1.3), también deben hacerlo A(m,0) y B(m,0). Si, como se dijo en la introducción de este capítulo, se supone que la red se encuentra inmersa en un conjunto infinito formado por réplicas idénticas a la red original, entonces se debe suponer que inicialmente se encuentra una partícula en la primera celda de cada una de las réplicas y todas las partículas moviéndose a la derecha. Si la red original se encuentra entre x = 0 y x = Ll, entonces las L celdas que componen esta red se encuentran en las posiciones x = 0,..., (L-1)l, las siguientes celdas de la réplica que se encuentra a la derecha, en las posiciones x = Ll,...,(2L-1)l, las celdas de la réplica a la izquierda, en x = -l,...,-Ll, etc. Por lo tanto las condiciones iniciales se deben escribir de la siguiente forma:

$$A(m,0) = \delta(m+NL,0) \quad y \quad B(m,0) = 0 \qquad N = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{2.1}$$

Aplicando la transformada de Fourier a las ecuaciones anteriores, se tiene

$$\tilde{A}(s,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism} A(m,0) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ism} \delta(m+NL,0) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} \tag{2.2a}$$

y

$$\tilde{B}(s,0) = 0 \tag{2.2b}$$

que al ser sustituídas en la ec. (1.8) da

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}(s,n) \\ \tilde{B}(s-2k_0,n) \end{pmatrix} = \mathbb{P}^n(s,k_0) \begin{pmatrix} \sum\limits_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\mathbb{P}^n)_{11} \sum\limits_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} \\ (\mathbb{P}^n)_{21} \sum\limits_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

y con ayuda de las ecs. (1.16a) a (1.16d) la ec. (2.3) queda como

$$\tilde{A}(s,n) = \tilde{g}(s,n)\, i\sqrt{T}\, e^{is} \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} + \tilde{g}(s,n\text{-}1)\, e^{2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} \tag{2.4a}$$

$$\tilde{B}(s-2k_0,n) = \tilde{g}(s,n)\sqrt{R}\, e^{2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL} \tag{2.4b}$$

Aplicando la transformada inversa a las ecs. (2.4a) y (2.4b) se obtiene

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{A}(s,n)\, e^{-ims}\, ds = \frac{i\sqrt{T}}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{g}(s,n) e^{-ims}\, e^{is} \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL}\, ds$$

$$+ \frac{e^{2ik_0}}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{g}(s,n\text{-}1)\, e^{-ims} \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL}\, ds \tag{2.5}$$

y después de un poco de álgebra, la ec. (2.5) se reduce a la siguiente expresión

$$A(m,n) = i\sqrt{T} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m\text{-}1+NL,n) + e^{2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n\text{-}1) \tag{2.6}$$

Por otro lado, usando la ec.(2.4b),

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{B}(s-2k_0,n)\, e^{-ims}\, ds = \frac{e^{2ik_0}\sqrt{R}}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \tilde{g}(s,n) e^{-ims} \sum_{N=-\infty}^{\infty} e^{-isNL}\, ds \tag{2.7}$$

que se puede escribir como

$$B(m,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n) \tag{2.8}$$

Ahora, nótese que las ecs. (2.6) y (2.8) pueden expresarse de la siguiente forma:

$$A(m,n) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} A'(m+NL,n) \tag{2.9a}$$

$$B(m,n) = \sum_{N=-\infty}^{\infty} B'(m+NL,n) \tag{2.9b}$$

donde $A'(m,n)$ y $B'(m,n)$ son las amplitudes modulantes para una partícula en una red unidimensional *infinita* y son precisamente las funciones calculadas en el capítulo anterior, ecs. (4.44a) y (4.44b).

Las ecs. (2.6) y (2.8) representan la solución formal del problema y sólo resta calcular la función g(m,n). Tomando la Transformada inversa de la función $\tilde{g}(s,n)$:

$$g(m,n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{g}(s,n)\, e^{-ims}\, ds \tag{2.10}$$

donde $\tilde{g}(s,n)$ está dada por la ec. (1.15)

$$\tilde{g}(s,n) = \frac{\lambda_1^n - \lambda_2^n}{\lambda_1 - \lambda_2} = i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)}\, \frac{\operatorname{sen}(n\theta)}{\operatorname{sen}\theta} \tag{2.11}$$

y θ definido mediante la expresión:

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\sqrt{1 - T\cos^2(s-k_0)}}{\sqrt{T}\cos(s-k_0)} = \cos^{-1}\left(\sqrt{T}\cos(s-k_0) \right) \tag{2.12}$$

Nótese, una vez más, que la función $\tilde{g}(s,n)$ es proporcional al polinomio de Chebyshev de segunda clase

$$U_n(z) = \frac{\operatorname{sen}[(n+1)\cos^{-1} z]}{\operatorname{sen}(\cos^{-1} z)} \tag{2.13}$$

que se puede escribir como [12]:

$$U_n(z) = \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \frac{(n-j)!}{j!\,(n-2j)!} \sum_{l=0}^{n-2j} \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-2j)!}{l!\,(n-2j-l)!}$$

$$\times\, e^{i(s-k_0)(n-2j-2l)} \tag{2.14}$$

así que la ec. (2.11) queda de la siguiente forma

$$\tilde{g}(s,n+1) = i^n\, e^{ik_0 n} \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \sum_{l=0}^{n-2j} \frac{(n-j)!\, e^{i(s-k_0)(n-2j-2l)}}{j!\; l!\; (n-2j-l)!} \tag{2.15}$$

Sustituyendo esta expresión en la ec. (2.10), se tiene

$$g(m,n+1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\, i^n\, e^{ik_0 n} \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j}$$

$$\times \sum_{l=0}^{n-2j} \frac{(n-j)!\, e^{i(s-k_0)(n-2j-2l)}}{j!\; l!\; (n-2j-l)!}\, ds$$

$$= i^n\, e^{ik_0 n} \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \sum_{l=0}^{n-j} \frac{(n-j)!\; e^{-ik_0(n-2j-2l)}}{j!\; l!\; (n-2j-l)!} \times$$

$$\times \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\, e^{is(n-2j-2l)}\, ds \tag{2.16}$$

pero, por otro lado, la delta de Dirac se puede expresar como

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{-ism}\, e^{is(n - 2j - 2l)} = \delta(m - n + 2j + 2l) \tag{2.17}$$

que al sustituir en la ec. (2.16) da

$$g(m,n+1) = i^n \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j}$$

$$\times \sum_{l=0}^{n-2j} e^{ik_0(2j + 2l)} \frac{(n-j)!\, \delta(n - m ,2j + 2l)}{j!\, l!\, (n - 2j - l)!}$$

$$= i^n \sum_{j=0}^{[n/2]} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n - j)!\, e^{ik_0(n - m)}}{j! \left(\dfrac{n - 2j + m}{2}\right)! \left(\dfrac{n - 2j - m}{2}\right)!} \tag{2.18}$$

Por otro lado, la delta de Kronecker es diferente de cero sólo si n - m es un entero positivo par, lo que a su vez implica que m y n deben tener la misma paridad. Pero de la misma delta se desprende que

$$m - n + 2j + 2l = 0$$

de donde se puede despejar a l:

$$l = \frac{n - 2j - m}{2} \tag{2.19}$$

pero de la ec. (2.14) se ve que $l \geq 0$, lo que impone una cota superior para l:

$$l_{max} = \frac{n - |m|}{2}$$

Finalmente, la ec. (2.18) se reduce a

$$g(m,n+1) = i^n e^{ik_0(n-m)} \sum_{j=0}^{\frac{n-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-j)!}{j! \left(\frac{n-2j+m}{2}\right)! \left(\frac{n-2j-m}{2}\right)!} \tag{2.20}$$

y la probabilidad de encontrar a la partícula en $x = m$ al tiempo $t = n$ es, recordando del capítulo uno que los términos de interferencia se pueden despreciar,

$$P(m,n) = |A(m,n)|^2 + |B(m,n)|^2 \tag{2.21}$$

Con ayuda de las ecs. (2.6) y (2.8) obtiene

$$|A(m,n)|^2 = T\left|\sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m-1+NL,n)\right|^2 + \left|\sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n-1)\right|^2$$

$$+ i\sqrt{T}\, e^{-2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m-1+NL,n) \sum_{N=-\infty}^{\infty} g^*(m+NL,n-1)$$

$$- i\sqrt{T}\, e^{2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n-1)g^*(m-1+NL,n) \tag{2.22}$$

$$|B(m,n)|^2 = R\left|\sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n)\right|^2 \tag{2.23}$$

y al sustituir estas expresiones en la ec. (2.21) queda

$$P(m,n) = T \left| \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m-1+NL,n) \right|^2 + \left| \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n-1) \right|^2$$

$$+ R \left| \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n) \right|^2 + i\sqrt{T}\, e^{-2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m-1+NL,n) \sum_{N=-\infty}^{\infty} g^*(m+NL,n-1)$$

$$- i\sqrt{T}\, e^{2ik_0} \sum_{N=-\infty}^{\infty} g(m+NL,n-1) \sum_{N=-\infty}^{\infty} g^*(m-1+NL,n) \tag{2.24}$$

pero g(m,n) ya se calculó en la ec. (2.20) y la se puede escribir como

$$g(m,n+1) = i^n e^{ik_0(n-m)}\, \mathcal{g}(m,n+1) \tag{2.25}$$

donde se ha definido

$$\mathcal{g}(m,n+1) \equiv \sum_{j=0}^{\frac{n-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{n-2j} \frac{(n-j)!}{j! \left[\frac{n-2j+m}{2}\right]! \left[\frac{n-2j-m}{2}\right]!} \tag{2.26}$$

Finalmente, al sustituir la ec. (2.25) en la ec. (2.24) se tiene

$$P(m,n) = T \sum_{N=-\infty}^{\infty} \mathcal{g}^2(m-1+NL,n) + \sum_{N=-\infty}^{\infty} \mathcal{g}^2(m+NL,n-1) +$$

$$+ R \sum_{N=-\infty}^{\infty} \mathcal{g}^2(m+NL,n) - 2\sqrt{T} \sum_{N=-\infty}^{\infty} \mathcal{g}(m-1+NL,n) \sum_{N=-\infty}^{\infty} \mathcal{g}(m+NL,n-1) \tag{2.27}$$

Expresada la probabilidad de esta forma, se puede graficar como función de la posición para un tiempo fijo, lo que nos da una idea más clara de su comportamiento. En las Figs. 2.1 a 2.8 se muestra una secuencia de gráficas de P(m,n) Vs. m para algunos valores del tiempo n.

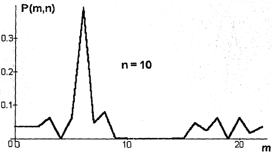


Figura 2.1

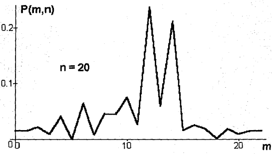


Figura 2.2

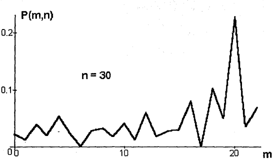


Figura 2.3

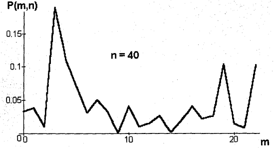


Figura 2.4

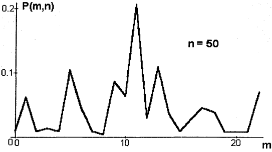


Figura 2.5

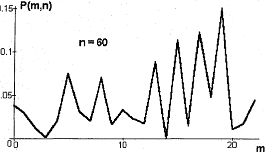


Figura 2.6

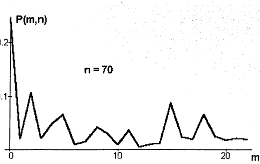


Figura 2.7

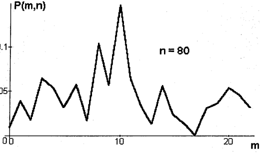


Figura 2.8

En este caso se ve que debido al tamaño finito de la red y a las condiciones de frontera periódicas, aparece más de un máximo; más aún, las posiciones de estos máximos recorren todas las celdas una y otra vez, como era de esperarse, pues cuando la partícula se encuentra en la posición m=L-1, por ejemplo, el siguiente salto puede ocurrir a la celda m=0.

2.3. CONDICIONES INICIALES HOMOGENEAS

Otra posible elección de condiciones iniciales que puede ser manejable en forma analítica corresponde a las condiciones iniciales homogéneas, que definen una situación en la cual la partícula tiene una probabilidad, diferente de cero, de encontrarse en cualquiera de las N celdas y todas las celdas tienen la misma probabilidad de estar ocupadas.

Supóngase que, al tiempo n=0, las amplitudes de probabilidad de encontrar a la partícula moviéndose a derecha e izquierda son, respectivamente:

$$A(m,n=0) = A_0 e^{-ik_0 m} \quad y \quad B(m,n=0) = B_0 e^{ik_0 m} \tag{3.1}$$

Nótese que aunque las probabilidades iniciales $|A(m,0)|^2 = |A_0|^2$ y $|B(m,0)|^2 = |B_0|^2$ son independientes de la celda m, las amplitudes de probabilidad difieren en la fase, lo cual es consecuencia de nuestra elección del origen de coordenadas y de que estamos usando una base fija en ese origen.

La condición de normalización impone una restricción sobre A_0 y B_0, pues la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier celda m al tiempo n = 0 es

$$P = \sum_{m=0}^{L-1} P(m,0) = \sum_{m=0}^{L-1} (|A(m,0)|^2 + |B(m,0)|^2) = (A_0^2 + B_0^2)\, L = 1 \tag{3.2}$$

por lo tanto

$$A_0^2 + B_0^2 = \frac{1}{L} \tag{3.3}$$

Obviamente, el punto de partida sigue siendo el sistema de ecuaciones (I.4.3), a las que reiteradamente se ha hecho referencia como las ecuaciones básicas que describen el modelo. Estas son

$$A(m,n) = i\,\sqrt{T}\,A(m-1,n-1) + \sqrt{R}\,e^{-2ik_0 m}\,B(m,n-1) \tag{3.4a}$$

$$B(m-1,n) = \sqrt{R}\,e^{2ik_0 m}\,A(m-1,n-1) + i\,\sqrt{T}\,B(m,n-1) \tag{3.4b}$$

En este caso, debido a la forma de las condiciones iniciales conviene utilizar, para resolver el sistema de ecuaciones anteriores, la Transformada de Fourier Finita [10] definida de la siguiente forma:

$$\tilde{A}(s,n) = \sum_{s=0}^{L-1} A(m,n)\,e^{2\pi i sm/L} \tag{3.5a}$$

$$\tilde{B}(s,n) = \sum_{s=0}^{L-1} B(m,n)\,e^{2\pi i sm/L} \tag{3.5b}$$

y sus correspondientes transformadas inversas

$$A(m,n) = \frac{1}{L}\sum_{s=0}^{L-1} \tilde{A}(s,n)\,e^{-2\pi i sm/L} \tag{3.6a}$$

$$B(m,n) = \frac{1}{L}\sum_{s=0}^{L-1} \tilde{B}(s,n)\,e^{-2\pi i sm/L} \tag{3.6b}$$

Al aplicar la transformada a las ecs. (3.4a) y (3.4b) se obtiene

$$\tilde{A}(s,n) = i\,\sqrt{T}\,\sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i ms/L}\,A(m-1,n-1) + \sqrt{R}\,\sum_{m=0}^{L-1} e^{-2ik_0 m}\,e^{2\pi i ms/L}\,B(m,n-1)$$

$$\tilde{A}(s,n) = i\sqrt{T}\, e^{2\pi i s/L} \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i s(m-1)/L} A(m-1,n-1) + \sqrt{R} \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i m(s-k_0L/\pi)/L} B(m,n-1)$$

$$= i\sqrt{T}\, e^{2\pi i s/L} \tilde{A}(s,n-1) + \sqrt{R}\, \tilde{B}(s-k_0L/\pi,n-1) \tag{3.7}$$

$$\tilde{B}(s,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0} \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i m s/L} e^{2ik_0 m} A(m,n-1) + i\sqrt{T} \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i m s/L} B(m+1,n-1)$$

$$= \sqrt{R}\, e^{2ik_0} \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i m(s+k_0L/\pi)/L} A(m,n-1) + i\sqrt{T}\, e^{-2\pi i s/L} \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i s(m+1)/L} B(m+1,n-1)$$

$$= \sqrt{R}\, e^{2ik_0}\, \tilde{A}(s+k_0L/\pi,n-1) + i\sqrt{T}\, e^{-2\pi i s/L} \tilde{B}(s,n-1) \tag{3.8}$$

que se puede escribir en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}(s,n) \\ \tilde{B}(s-k_0L/\pi,n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i\sqrt{T}\, e^{2\pi i s/L} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R}\, e^{2ik_0} & i\sqrt{T}\, e^{-2\pi i(s-k_0L/\pi)/L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{A}(s,n-1) \\ \tilde{B}(s-k_0L/\pi,n-1) \end{pmatrix}$$

$$\equiv \mathbb{P}^n(s,k_0) \begin{pmatrix} \tilde{A}(s,0) \\ \tilde{B}(s-k_0L/\pi,0) \end{pmatrix} \tag{3.9}$$

con

$$\mathbb{P}(s,k_0) = \begin{pmatrix} i\sqrt{T}\, e^{2\pi i s/L} & \sqrt{R} \\ \sqrt{R}\, e^{2ik_0} & i\sqrt{T}\, e^{-2\pi i(s-k_0L/\pi)/L} \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

y la ec. (3.9) se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}(s,n) \\ \tilde{B}(s-k_0L/\pi,n) \end{pmatrix} = \mathbb{P}^n(s,k_0) \begin{pmatrix} \tilde{A}(s,0) \\ \tilde{B}(s-k_0L/\pi,0) \end{pmatrix} \tag{3.11}$$

o bien

$$\tilde{A}(s,n) = (\mathbb{P}^n)_{11}\, \tilde{A}(s,0) + (\mathbb{P}^n)_{12}\, \tilde{B}(s-k_0L/\pi,n) \tag{3.12a}$$

$$\tilde{B}(s-k_0L/\pi,\ n) = (\mathbb{P}^n)_{21}\, \tilde{A}(s,0) + (\mathbb{P}^n)_{22}\, \tilde{B}(s-k_0L/\pi,0) \tag{3.12b}$$

Una vez más, se define una función $\tilde{g}(s,n)$ través de la relación

$$\mathbb{P}^n = \tilde{g}(s,n)\, \mathbb{P} + \tilde{g}(s,n-1)\, e^{2ik_0}\, \mathbb{I} \tag{3.13}$$

donde

$$\tilde{g}(s,n) = i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)}\, \frac{\text{sen}(n\theta)}{\text{sen}\ \theta} \tag{3.14}$$

y

$$\tan\theta = \frac{\sqrt{1 - T\cos^2(2\pi s/L - k_0)}}{\sqrt{T}\,\cos(2\pi s/L - k_0)} \tag{3.15}$$

Al sustituir estas expresiones en las ecs. (3.12a) y (3.12b) se obtiene

$$\tilde{A}(s,n) = i\sqrt{T}\, e^{2\pi is/L}\, \tilde{g}(s,n)\, \tilde{A}(s,0) + e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n-1)\, \tilde{A}(s,0) + \sqrt{R}\, \tilde{g}(s,n)\, \tilde{B}(s-k_0L/\pi,0) \tag{3.16}$$

$$\tilde{B}(s-k_0L/\pi,n) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n)\, \tilde{A}(s,0) + i\sqrt{T}\, e^{2ik_0}\, e^{-2\pi is/L}\, \tilde{g}(s,n)\, \tilde{B}(s-k_0L/\pi,0) + e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n-1)\, \tilde{B}(s-k_0L/\pi,0) \tag{3.17}$$

Aplicando la transformada de Fourier a las condiciones iniciales, ecs. (3.1), se tiene

$$\tilde{A}(s,0) = A_0 \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i m s/L}\, e^{-ik_0 m} = A_0\, L\, \delta(s - k_0L/2\pi) \tag{3.18a}$$

$$\tilde{B}(s,0) = B_0 \sum_{m=0}^{L-1} e^{2\pi i m s/L}\, e^{ik_0 m} = B_0\, L\, \delta(s + k_0L/2\pi) \tag{3.18b}$$

y sustituyendo estas expresiones en las ecs. (3.16) y (3.17) se obtiene

$$\tilde{A}(s,n) = L\, [iA_0\sqrt{T}\, e^{2\pi i s/L}\, \tilde{g}(s,n)\, \delta(s-k_0L/2\pi) + A_0 e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n-1)\, \delta(s-k_0L/2\pi)$$

$$+ B_0 \sqrt{R}\, \tilde{g}(s,n)\, \delta(s - k_0L/2\pi)] \tag{3.19}$$

$$\tilde{B}(s-k_0L/\pi,n) = L\, [A_0\sqrt{R}\, e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n)\, \delta(s-k_0L/2\pi) + iB_0\sqrt{T}\, e^{2ik_0}\, e^{-2\pi i s/L}$$

$$\times\, \tilde{g}(s,n)\, \delta(s-k_0L/2\pi) + B_0\, e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n-1)\, \delta(s-k_0L/\pi)] \tag{3.20}$$

Si ahora se toma la transformada inversa de las ecs. (3.19) y (3.20):

$$\frac{1}{L}\sum_{s=0}^{L-1} \tilde{A}(s,n)\, e^{-2\pi i m s/L} = \sum_{s=0}^{L-1} iA_0\sqrt{T}\, \tilde{g}(s,n) e^{2\pi i s/L} e^{-2\pi i m s/L}\, \delta(s-k_0L/2\pi) +$$

$$+ \sum_{s=0}^{L-1} A_0\, \tilde{g}(s,n-1)\, e^{2ik_0}\, e^{-2\pi i m s/L}\, \delta(s-k_0L/2\pi)$$

$$+ \sum_{s=0}^{L-1} B_0\, \sqrt{R}\, \tilde{g}(s,n)\, e^{-2\pi i m s/L}\, \delta(s-k_0L/2\pi) \tag{3.21}$$

de donde se obtiene

$$A(m,n) = iA_0 \sqrt{T}\, e^{-ik_0(m-1)}\, \tilde{g}(k_0L/2\pi,n)$$

$$+ A_0 e^{-ik_0(m-2)}\, \tilde{g}(k_0L/2\pi,n-1) + B_0 \sqrt{R}\, e^{-ik_0 m}\, \tilde{g}(k_0L/2\pi,n) \tag{3.22}$$

y para la ec. (3.20)

$$\frac{1}{L}\sum_{s=0}^{L-1} \tilde{B}(s-k_0L/\pi,\ n) e^{-2\pi i m s/L} = \sum_{s=0}^{L-1} \sqrt{R}\, A_0 e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n) e^{-2\pi i m s/L}\, \delta(s-k_0L/2\pi)$$

$$+ \sum_{s=0}^{L-1} i\sqrt{T}\, B_0\, e^{2ik_0}\, e^{-2\pi i s/L}\, e^{-2\pi i m s/L}\, \tilde{g}(s,n)\, \delta(s-k_0L/2\pi) +$$

$$\sum_{s=0}^{L-1} B_0\, e^{2ik_0}\, \tilde{g}(s,n-1)\, e^{-2\pi i m s/L}\, \delta(s-k_0L/2\pi) \tag{3.23}$$

de donde

$$e^{-2ik_0 m}\, B(m,n) = A_0 \sqrt{R}\, e^{-ik_0(m-2)}\, \tilde{g}(k_0L/2\pi,n)$$

$$+ iB_0 \sqrt{T} e^{-ik_0(m-1)}\, \tilde{g}(k_0L/2\pi,n) + B_0\, e^{-ik_0(m-2)}\, \tilde{g}(k_0L/2\pi,n-1) \tag{3.24}$$

Ahora, la ec. (3.14) se puede escribir como

$$\tilde{g}(s,n) = i^{n-1}\, e^{ik_0(n-1)}\, \tilde{\mathfrak{g}}(s,n) \tag{3.25}$$

donde se definió

$$\tilde{\mathfrak{g}}(s,n) \equiv \frac{\operatorname{sen}(n\theta)}{\operatorname{sen}\theta} \tag{3.26}$$

y de la definición de θ, ec. (3.15), se ve que para $s = k_0L/2\pi$:

$$\operatorname{sen}\theta = \sqrt{1-T} \quad \text{y} \quad \cos\theta = \sqrt{T} \tag{3.27}$$

es decir, $\tilde{g}$ no depende de k_0.

Además, como las funciones $\tilde{g}$ no dependen de m, no es necesario calcular la transformada inversa, pues sólo aparece $\tilde{g}(k_0L/2\pi,n)$ y su valor está dado por las ecs. (3.25) y (3.26). Se calcula entonces la probabilidad de encontrar a la partícula en la celda m-ésima al tiempo n en términos de las amplitudes A(m,n) y B(m,n), recordando que el término de interferencia se puede despreciar

$$P(m,n) = |A(m,n)|^2 + |B(m,n)|^2 \tag{3.28}$$

donde $|A(m,n)|^2$ y $|B(m,n)|^2$ representan las probabilidades de encontrar a la partícula en la celda m al tiempo n y moviéndose a derecha e izquierda, respectivamente. De las ecs. (3.22) y (3.24), se tiene

$$|A(m,n)|^2 = [A_0^2\,T + B_0^2\,R + i\,A_0B_0\,\sqrt{RT}\,e^{ik_0} - i\,A_0B_0\,\sqrt{RT}\,e^{-ik_0}]\,\tilde{g}^2(n)$$
$$+\,A_0^2\,\tilde{g}^2(n\text{-}1) + [-2A_0^2\,\sqrt{T} - iA_0B_0\,\sqrt{R}\,e^{ik_0} + i\,A_0B_0\,\sqrt{R}\,e^{-ik_0}]\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1) \tag{3.29}$$

$$|B(m,n)|^2 = [A_0^2\,R + B_0^2\,T - i\,A_0B_0\,\sqrt{RT}\,e^{-ik_0}]\,\tilde{g}^2(n) + B_0^2\,\tilde{g}^2(n\text{-}1)$$
$$+\,[i\,A_0B_0\,\sqrt{R}\,e^{ik_0} - B_0^2\,\sqrt{T} - iA_0B_0\,\sqrt{R}\,e^{-ik_0} - B_0^2\,\sqrt{T}\,]\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1) \tag{3.30}$$

Después de un poco de álgebra se obtiene

$$P(m,n) = (A_0^2\,T + B_0^2\,R + A_0^2\,R + B_0^2\,T)\,\tilde{g}^2(n) + (A_0^2 + B_0^2)\,\tilde{g}^2(n\text{-}1)$$
$$-\,(2A_0^2\,\sqrt{T} + 2B_0^2\,\sqrt{T})\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1)$$
$$= (A_0^2 + B_0^2)\,\tilde{g}^2(n) + (A_0^2 + B_0^2)\,\tilde{g}^2(n\text{-}1) - 2\sqrt{T}\,(A_0^2 + B_0^2)\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1) \tag{3.31}$$

Finalmente

$$P(m,n) = \frac{1}{L}\,[\tilde{g}^2(n) + \tilde{g}^2(n\text{-}1) - 2\,\sqrt{T}\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1)] \tag{3.32}$$

donde se utilizaron las igualdades

$$A_0^2 + B_0^2 = \frac{1}{L} \quad \text{y} \quad R + T = 1 \tag{3.33}$$

Sin embargo, la ec. (3.32) se puede simplificar aún más utilizando la definición de $\mathfrak{F}(n)$, ec. (3.26), obteniéndose

$$P(m,n) = \frac{1}{L} \tag{3.34}$$

Vemos pues que la probabilidad NO depende de m ni de n y ésto significa que si las condiciones iniciales son homogéneas, la distribución será homogénea para cualquier tiempo posterior, aún cuando las probabilidades de moverse a izquierda o derecha en cada celda sí dependen del tiempo y lo hacen de tal forma, que la suma de éstas da siempre una constante. Esto se analizará con más detalle en la siguiente sección.

Evidentemente, la densidad de probabilidad sigue normalizada pues la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier posición m y a cualquier tiempo n, será

$$P = \sum_{m=0}^{L-1} P(n) = \sum_{m=0}^{L-1} \frac{1}{L} = 1 \tag{3.35}$$

2.4. CALCULO DE LA CORRIENTE DE PROBABILIDAD

De particular interés resulta el cálculo de la corriente de probabilidad, debido al comentario hecho en el último párrafo de la sección (2.3). Partiendo de la ec. (I.6.2), que expresa la densidad de corriente en términos de las probabilidades de moverse a derecha e izquierda, se puede escribir

$$j(m,n) = \frac{\hbar k_0}{m} [P_+(m,n) - P_-(m,n)]$$

donde se utilizaron las igualdades

$$A_0^2 + B_0^2 = \frac{1}{L} \quad \text{y} \quad R + T = 1 \tag{3.33}$$

Sin embargo, la ec. (3.32) se puede simplificar aún más utilizando la definición de $\tilde{\mathfrak{F}}(n)$, ec. (3.26), obteniéndose

$$P(m,n) = \frac{1}{L} \tag{3.34}$$

Vemos pues que la probabilidad NO depende de m ni de n y ésto significa que si las condiciones iniciales son homogéneas, la distribución será homogénea para cualquier tiempo posterior, aún cuando las probabilidades de moverse a izquierda o derecha en cada celda sí dependen del tiempo y lo hacen de tal forma, que la suma de éstas da siempre una constante. Esto se analizará con más detalle en la siguiente sección.

Evidentemente, la densidad de probabilidad sigue normalizada pues la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier posición m y a cualquier tiempo n, será

$$P = \sum_{m=0}^{L-1} P(n) = \sum_{m=0}^{L-1} \frac{1}{L} = 1 \tag{3.35}$$

2.4. CALCULO DE LA CORRIENTE DE PROBABILIDAD

De particular interés resulta el cálculo de la corriente de probabilidad, debido al comentario hecho en el último párrafo de la sección (2.3). Partiendo de la ec. (I.6.2), que expresa la densidad de corriente en términos de las probabilidades de moverse a derecha e izquierda, se puede escribir

$$j(m,n) = \frac{\hbar k_0}{m} [P_+(m,n) - P_-(m,n)]$$

$$j(m,n) = \frac{\hbar k_0}{m}\left\{ |A(m,n)|^2 - |B(m,n)|^2 \right\}$$

$$= \frac{\hbar k_0}{m}[(A_0^2 - B_0^2)(T\text{-}R) - 4\,A_0B_0\sqrt{RT}\,\text{sen}k_0]\,\tilde{g}^2(n) + (A_0^2 - B_0^2)\,\tilde{g}^2(n\text{-}1)$$

$$+ [-2\sqrt{T}\,(A_0^2 - B_0^2) + 4\,A_0B_0\sqrt{R}\,\text{sen}k_0]\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1)] \qquad (4.1)$$

de donde se ve que la corriente de probabilidad no depende de la celda m aunque sí del tiempo n.

En este momento podemos considerar un caso particular con el fin de ilustrar la evolución en el tiempo de la corriente de probabilidad. Supóngase que

$$A_0 = \frac{1}{\sqrt{L}} \qquad \text{y} \qquad B_0 = 0$$

Esta situación representa a una partícula moviéndose inicialmente hacia la derecha siendo su posición independiente de m, es decir, todas las celdas son igualmente probables. En este caso, de la ec. (4.1) se tiene

$$j(m,n) = \frac{\hbar k_0}{m} A_0^2\,[(T\text{- }R)\,\tilde{g}^2(n) + \tilde{g}^2(n\text{-}1) - 2\sqrt{T}\,\tilde{g}(n)\,\tilde{g}(n\text{-}1)]$$

$$= \frac{\hbar k_0}{m} A_0^2\,[(T - R)\,\frac{\text{sen}^2(n\theta)}{\text{sen}^2\,\theta} + \frac{\text{sen}^2(n\theta - \theta)}{\text{sen}^2\,\theta} - \frac{2\sqrt{T}\,\text{sen}(n\theta)\,\text{sen}(n\theta - \theta)}{\text{sen}^2\,\theta}$$

$$= \frac{\hbar k_0}{m} A_0^2\,(\cos^2(n\theta) - \text{sen}^2(n\theta)) \qquad (4.2)$$

Finalmente

$$j(m,n) = \frac{\hbar k_0}{m} A_0^2 \cos(2n\theta) = \frac{\hbar k_0}{mL}\cos(2n\theta) \qquad (4.3)$$

De donde se ve claramente que la corriente no depende de la posición, pero oscila en el tiempo. Si se toma el promedio temporal de la ec. (4.3):

$$<j(m)>_n = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \int_0^n j(m)\, dn$$

$$= \frac{\hbar k_0}{m} A_0^2 \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \int_0^n \cos(2n\theta)\, dn$$

$$= \frac{\hbar k_0}{m} A_0^2 \lim_{n\to\infty} \frac{\operatorname{sen}(2\theta n)}{2n\theta} = 0 \tag{4.4}$$

Es decir, la corriente promedia a cero en el tiempo, así que la tendencia original de moverse hacia la derecha desaparece debido a las colisiones con la red.

Aún cuando la corriente promedie a cero, ésto no significa que se alcance un equilibrio termodinámico, pues si se calculan los promedios temporales de $P_+(m,n)$ y $P_-(m,n)$, se obtendrá

$$<P_+(m,n)>_n = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \int_0^n |A(m,n)|^2\, dn = \frac{1}{2}(A_0^2 + B_0^2) = \frac{1}{2L} \tag{4.5}$$

$$<P_-(m,n)>_n = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \int_0^n |B(m,n)|^2\, dn = \frac{1}{2}(A_0^2 + B_0^2) = \frac{1}{2L} \tag{4.6}$$

Esto significa que el promedio temporal de la corriente de partículas moviéndose hacia la derecha o hacia la izquierda nunca se hacen cero y vistas en forma individual nunca dejan de fluctuar. En todo caso podría hablarse de un *equilibrio estadístico*, pero no termodinádinámico.

CAPITULO III

DIFUSION CUANTICA DE PARTICULAS INDISTINGUIBLES

En el capítulo uno se describió el modelo de QRW y su aplicación en el estudio de la difusión cuántica de partículas en una red unidimensional infinita y en el capítulo dos se extendió este modelo a una red finita con condiciones de frontera periódicas. En ambos casos se calculó la probabilidad condicional y la corriente de probabilidad como función de la posición y el tiempo. Sin embargo, el término *corriente de probabilidad* se asocia inmediatamente con un flujo de partículas. Pensar en estos términos no presenta ninguna dificultad si se trata de partículas distinguibles, pero *si* éstas forman un sistema de partículas indistinguibles, es necesario incluir la estadística apropiada. En este capítulo se considerará el problema de la difusión cuántica de partículas idénticas e indistinguibles difundiéndose en una red unidimensional infinita y calcularemos la *densidad de probabilidad condicional* como función de la posición y el tiempo.

3.1. QRW PARA UN SISTEMA DE DOS PARTICULAS INDISTINGUIBLES

Se Considerá primero el caso más simple, que sería un sistema de dos partículas idénticas indistinguibles (fermiones o bosones). Con el fin de mantener el grado de dificultad matemática en un nivel manejable se supondrá que *no existe interacción entre las partículas*. El objetivo en este caso es calcular la función de distribución de probabilidad de encontrar a una de las partículas en la celda m y, simultáneamente, a la otra en la celda n al tiempo t. Si se expresa como Ψ (x_1, x_2, t) a la función de onda que describe a la partícula "1" en la posición x_1 y simultáneamente a la partícula "2" en la posición x_2 al tiempo t, entonces la probabilidad de encontrar a las partículas en las celdas m y n será:

$$P(m,n,t) = \int_m \int_n |\Psi_{\underset{a}{s}} (x_1, x_2, t)|^2 \, dx_1 dx_2 \qquad (1.1)$$

donde ψ_s denota la función de onda simétrica que describe a las partículas de spin entero (bosones) y ψ_a una función de onda antisimétrica para partículas de spin semientero (fermiones).

Para calcular esta probabilidad, se expresará primero la función de onda ψ_s (x_1, x_2, t) en términos de las funciones de ondas individuales de las partículas "1" y "2". Para la partícula "1" ésta se puede escribir de la siguiente manera:

$$\phi^{(1)}(x_1,t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [A(m,t)e^{ik_0x_1} + B(m,t)e^{-ik_0x_1}] \; G_m(x_1,t) \tag{1.2}$$

donde $G(x_1,t)$ es la función definida en la ec. (I.2.6). La suma sobre todas las celdas ($m = -\infty \cdots +\infty$) es necesaria pues el paquete de ondas que describe a cada partícula tiene una probabilidad finita de encontrarse en cada una de estas celdas. Como en los capítulos anteriores, A(m,t) y B(m,t) representan las amplitudes de probabilidad de encontrar a la partícula en la celda m moviéndose hacia la derecha e izquierda, respectivamente.

Para esta función de onda, el estado de una sola partícula libre queda determinado, en cada celda m, por la dirección: $\pm|k_0|$. Por otro lado, la máxima interferencia estadística ya sea constructiva o destructiva ocurrirá, en la misma celda, cuando las dos partículas tengan el mismo momento $|\hbar k_0|$, así que se supondrá que las partículas tienen la misma energía.

También, recuérdese que las amplitudes modulantes A(m,t) y B(m,t) dependen fuertemente de las condiciones iniciales A(m,0) y B(m,0). Entonces si la partícula "2" (que tiene la misma energía que la "1") tiene condiciones iniciales diferentes, estará descrita por amplitudes modulantes diferentes, que denotaremos por C(m,t) y D(m,t). Por lo tanto, la función de onda para la partícula "2" se puede escribir de la siguiente forma

$$\phi^{(2)}(x_2,t) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} [C(m,t)e^{ik_0x_2} + D(m,t)e^{-ik_0x_2}] \; G_m(x_2,t) \tag{1.3}$$

Por otro lado, en el caso de dos partículas *indistinguibles* difundiéndose en la misma red, se tiene que introducir la simetría correcta bajo permutaciones [9], así que para bosones y fermiones las funciones de onda deben tener la forma:

$$\Psi_{s}(x_1, x_2, t) = \frac{1}{2}[\phi^{(1)}(x_1,t)\phi^{(2)}(x_2,t) \pm \phi^{(1)}(x_2,t)\phi^{(2)}(x_1,t)] \tag{1.4}$$

que representa la función de onda de dos partículas descritas, una por la función de onda individual $\phi^{(1)}$ y la otra por $\phi^{(2)}$.

3.2. CALCULO DE LA PROBABILIDAD

Usando la función de onda de la ec. (1.4) se puede obtener la densidad de probabilidad *condicional* $P(m,n,t|\phi^{(1)}(0),\phi^{(2)}(0))$, de encontrar a la partícula "1" en la celda m y a la partícula "2" simultáneamente en la celda n, dadas ciertas condiciones iniciales

$$P(m,n,t|\phi^{(1)}(0),\phi^{(2)}(0)) = \int_{\text{celda m}} dx_1 \int_{\text{celda n}} dx_2 \, |\Psi(x_1,x_2,t)|^2 \tag{2.1}$$

Donde $\phi^{(1)}(0)$ y $\phi^{(2)}(0)$ denotan a las funciones de ondas que describen a las partículas "1" y "2" al tiempo inicial $t = 0$. Además, la normalización de la probabilidad requiere que

$$\sum_{m}\sum_{n} P(m,n,t|\phi^{(1)}(0),\phi^{(2)}(0)) = 1 \tag{2.2}$$

Ya que la propiedad de simetría y antisimetría de las partículas se conserva en el tiempo [9], por comodidad, en adelante se suprimirá la letra t en la expresión para la densidad de probabilidad, sobreentendiéndose que ésta depende del tiempo. Entonces, se puede escribir

$$P(m,n|\phi^{(1)},\phi^{(2)}) = \frac{1}{2}\Big(\int_m dx_1 |\phi^{(1)}(x_1)|^2 \int_n dx_2 |\phi^{(2)}(x_2)|^2 +$$

$$+ \int_m dx_1 |\phi^{(2)}(x_1)|^2 \int_n dx_2 |\phi^{(1)}(x_2)|^2 \pm$$

$$\pm \left[\int_m dx_1\ \phi^{(1)}(x_1)\phi^{(2)*}(x_1) \int_n dx_2\ \phi^{(2)}(x_2)\phi^{(1)*}(x_2) + \text{c.c.} \right] \Big) \tag{2.3}$$

y recordando que, de acuerdo a nuestro modelo los paquetes de ondas centrados en celdas diferentes no se traslapan, se tendrá

$$P(m,n|\phi^{(1)},\phi^{(2)}) = \frac{1}{2}\Big([|A(m)|^2 + |B(m)|^2]\ [|C(n)|^2 + |D(n)|^2]$$

$$+ [|C(m)|^2 + |D(m)|^2]\ [|A(n)|^2 + |B(n)|^2]$$

$$\pm \Big([A(m)C^*(m) + B(m)D^*(m)]\ [C(n)A^*(n) + D(n)B^*(n)] + \text{c.c.} \Big) \Big) \tag{2.4}$$

La probabilidad se puede escribir en forma más compacta si definimos los vectores renglón formados por las amplitudes, para cada celda m:

$$\phi_m^{(1)}(t) \equiv \left[A(m,t),\ B(m,t) \right] \tag{2.5a}$$

y

$$\phi_m^{(2)}(t) \equiv \left[C(m,t),\ D(m,t) \right] \tag{2.5b}$$

con lo que se obtiene finalmente, en forma condensada

$$P(m,n,t|\phi^{(1)},\phi^{(2)}) = \frac{1}{2}\Big(|\phi_m^{(1)}|^2 |\phi_n^{(2)}|^2 + |\phi_m^{(2)}|^2 |\phi_n^{(1)}|^2$$

$$\pm [\phi_m^{(1)}\phi_m^{(2)\dagger} \times \phi_n^{(2)}\phi_n^{(1)\dagger} + \text{c.c.}] \Big) \tag{2.6}$$

donde $\phi_m^{(1)\dagger}$ define el adjunto del vector $\phi_m^{(1)}$.

Como un ejemplo, considérense dos partículas idénticas, de igual energía, pero con condiciones iniciales diferentes $\phi^{(1)}(0)$ y $\phi^{(2)}(0)$ y supóngase el caso en que, en algún tiempo posterior y en la misma celda (m=n), se encuentren las dos partículas con diferentes amplitudes pero moviéndose en la misma dirección; a la derecha, por ejemplo:

$$\phi_m^{(1)} = \left[A(m), 0\right], \qquad \phi_m^{(2)} = \left[C(m), 0\right] \tag{2.7}$$

Sustituyendo (2.7) en (2.6) se tiene

$$P(m,m|\,) = \frac{1}{2}\Big(|A(m)|^2|C(m)|^2 + |A(m)|^2|C(m)|^2$$

$$\pm [A(m)C^*(m)\,C(m)A^*(m) + c.c.]\Big) \tag{2.8}$$

o bien

$$P(m,m|\phi^{(1)},\phi^{(2)}) = \begin{cases} 2|A(m)|^2|C(m)|^2 & \text{Bose} \\ 0 & \text{Fermi.} \end{cases} \tag{2.9}$$

Tal como se esperaba, el ejemplo muestra que no importa cuáles sean los valores de las amplitudes A(m) y B(m), mientras sean diferentes de cero, dos paquetes de ondas bosónicos con la misma posición y momento tendrán una interferencia constructiva máxima. Esta es la bien conocida tendencia de los bosones a condensarse. Por otro lado, dos paquetes fermiónicos con la misma posición y momento tendrán una interferencia destructiva máxima (repulsión estadística). Más adelante mostraremos unas gráficas que ilustran este comportamiento.

Ahora se calculará la probabilidad condicional $P(m,n|\phi^{(1)},\phi^{(2)})$ para el caso general. Primero recuérdese que las amplitudes A, B, C y D están asociadas a partículas individuales. Por tanto, de acuerdo al capítulo uno, estas amplitudes deben satisfacer las relaciones de recurrencia, ecs. (I.4.3):

$$A(m,t) = i\sqrt{T}\,A(m-1,t-1) + \sqrt{R}\,e^{-2ik_0 m}\,B(m,t-1) \tag{2.10a}$$

$$B(m,t) = \sqrt{R}\,e^{2ik_0(m+1)}\,A(m,t-1) + i\sqrt{T}\,B(m+1,t-1) \tag{2.10b}$$

para la partícula "1" y un par de ecuaciones similares para la partícula "2", pero con amplitudes modulantes diferentes:

$$C(m,t) = i\sqrt{T}\, C(m-1,t-1) + \sqrt{R}\, e^{-2ik_0 m}\, D(m,t-1) \qquad (2.10c)$$

$$D(m,t) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)} C(m,t-1) + i\sqrt{T}\, D(m+1,t-1) \qquad (2.10d)$$

La solución de estas ecuaciones depende fuertemente de las condiciones iniciales, pero no es necesario repetir toda el álgebra involucrada en la solución de éstas, ya que el proceso de dispersión de los paquetes de ondas en cada potencial está descrito por la misma matriz de dispersión, sin importar que se trate de la partícula "1" o "2". La matriz de dispersión relaciona los coeficientes asociados a las dos partículas en forma independiente: (A,B) y (C,D).

La solución del sistema de ecuaciones, ecs. (2.10) es, de los resultados del capítulo uno, ecs. (I.4.46):

$$A(m,t) = i\sqrt{T}\, g(m-x_{01}-1,t) + e^{2ik_0}\, g(m-x_{01},t-1) \qquad (2.11a)$$

$$B(m,t) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)}\, g(m-x_{01},t) \qquad (2.11b)$$

si se supone que la partícula "1" se encuentra inicialmente en la posición $m=x_{01}$ y moviéndose a la derecha, es decir, se están eligiendo las siguientes condiciones iniciales:

$$A(m,t=0) = \delta(m,x_{01}) \qquad (2.12a)$$

$$B(m,t=0) = 0 \qquad (2.12b)$$

Si la partícula "1" se encuentra inicialmente en $m=x_{01}$ y moviéndose hacia la izquierda, la solución para A(m,t) y B(m,t) es

$$A(m,t) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)}\, g(m-x_{01},t) \qquad (2.13a)$$

$$B(m,t) = i\sqrt{T}\, g(m-x_{01}+1,t) + e^{2ik_0}\, g(m-x_{01},t-1) \qquad (2.13b)$$

que corresponde a las condiciones iniciales

$$A(m,t=0) = 0 \tag{2.14a}$$

$$B(m,t=0) = \delta(m,x_{01}) \tag{2.14b}$$

Para la partícula "2", cuyo proceso de dispersión está descrito por las amplitudes modulantes C(m,t) y D(m,t), la solución de las ecs. (2.10) son, de acuerdo a las ecs. (I.4.46):

$$C(m,t) = i\sqrt{T}\, g(m-x_{02}-1,t) + e^{2ik_0}\, g(m-x_{02},t-1) \tag{2.15a}$$

$$D(m,t) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)}\, g(m-x_{02},t) \tag{2.15b}$$

si se mueve inicialmente hacia la derecha y partiendo de la posición $m=x_{02}$, lo que equivale a elegir las condiciones iniciales:

$$C(m,t=0) = \delta(m,x_{02}) \tag{2.16a}$$

$$D(m,t=0) = 0 \tag{2.16b}$$

pero si se encuentra inicialmente en $m=x_{02}$ y moviéndose hacia la izquierda, entonces de las ecs. (I.4.48) la solución es

$$C(m,t) = \sqrt{R}\, e^{2ik_0(m+1)}\, g(m-x_{02},t) \tag{2.17a}$$

$$D(m,t) = i\sqrt{T}\, g(m-x_{02}+1,t) + e^{2ik_0}\, g(m-x_{02},t-1) \tag{2.17b}$$

que corresponde a las condiciones iniciales

$$C(m,t=0) = 0 \tag{2.18a}$$

$$D(m,t=0) = \delta(m,x_{02}) \tag{2.18b}$$

En cualquier caso, la función g(m,t) está dada por la ec. (I.4.42):

$$g(m,t+1) = i^t e^{i(t-m)k_0} \sum_{j=0}^{\frac{t-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{t-2j} \frac{(t-j)!}{j! \left[\frac{t-m-2j}{2}\right]! \left[\frac{t+m-2j}{2}\right]!} \tag{2.19}$$

Esta última expresión se puede escribir como

$$g(x,t+1) = i^t e^{ik_0(t-x)} \mathfrak{g}(x,t+1) \tag{2.20}$$

donde se ha definido la función $\mathfrak{g}(x,t)$, como

$$\mathfrak{g}(x,t+1) = \sum_{j=0}^{\frac{t-|m|}{2}} (-1)^j \left(\sqrt{T}\right)^{t-2j} \frac{(t-j)!}{j! \left[\frac{t-m-2j}{2}\right]! \left[\frac{t+m-2j}{2}\right]!} \tag{2.21}$$

Utilizando estas expresiones en la ec. (2.4) se puede ahora calcular la probabilidad condicional, $P(m,n,t)$:

$$P(m,n,t) = \frac{1}{2} \Big([|A(m)|^2 + |B(m)|^2] [|C(n)|^2 + |D(n)|^2] +$$

$$+ [|C(m)|^2 + |D(m)|^2] \times [|A(n)|^2 + |B(n)|^2]$$

$$\pm \Big([A(m)C^*(m) + B(m)D^*(m)] \times [C(n)A^*(n) + D(n)B^*(n)] + \text{c.c.}\Big)\Big) \tag{2.22}$$

y esta densidad de probabilidad condicional NO depende del factor $e^{\pm 2ik_0}$. Para verlo, supóngase que las dos partículas se mueven inicialmente hacia la derecha, pero con posiciones iniciales x_{01} y x_{02}. Después de un poco de álgebra se obtiene

$$2\,P(m,n,t) = \Big(T\, \mathfrak{g}^2(m-x_{01}-1,t) + \mathfrak{g}^2(m-x_{01},t-1) - 2\sqrt{T}\, \mathfrak{g}(m-x_{01}-1,t) \times$$

$$
\times\ \mathcal{g}(m-x_{01},t-1) + R\mathcal{g}^2(m-x_{01},t)\Big]\Big[T\ \mathcal{g}^2(n-x_{02}-1,t) + \mathcal{g}^2(n-x_{02},t-1)
$$

$$
- 2\sqrt{T}\ \mathcal{g}(n-x_{02}-1,t)\ \mathcal{g}(n-x_{02},t-1) + R\ \mathcal{g}^2(n-x_{02},t)\Big] + \Big[T\ \mathcal{g}^2(m-x_{02}-1,t)
$$

$$
+ \mathcal{g}^2(m-x_{02},t-1) - 2\sqrt{T}\ \mathcal{g}(m-x_{02}-1,t) \times \mathcal{g}(m-x_{02},t-1) + R\ \mathcal{g}^2(m-x_{02},t)\Big]
$$

$$
\times\ \Big[T\ \mathcal{g}^2(n-x_{01}-1,t) + \mathcal{g}^2(n-x_{01},t-1) - 2\sqrt{T}\ \mathcal{g}(n-x_{01}-1,t)\ \mathcal{g}(n-x_{01},t-1)
$$

$$
+ R\mathcal{g}^2(n-x_{01},t)\Big] \pm \Big[T\ \mathcal{g}(m-x_{01}-1,t)\mathcal{g}(m-x_{02}-1,t) - \sqrt{T}\ \mathcal{g}(m-x_{01}-1,t)
$$

$$
\times\ \mathcal{g}(m-x_{02},t-1) - \sqrt{T}\ \mathcal{g}(m-x_{02}-1,t)\mathcal{g}(m-x_{01},t-1) + \mathcal{g}(m-x_{01},t-1)\mathcal{g}(m-x_{02},t-1)
$$

$$
+ R\ \mathcal{g}(m-x_{01},t)\mathcal{g}(m-x_{02},t)\Big]\Big[T\mathcal{g}(m-x_{02}-1,t)\mathcal{g}(m-x_{01}-1,t) + \mathcal{g}(m-x_{02},t-1)
$$

$$
\times\ \mathcal{g}(m-x_{01},t-1) - \sqrt{T}\ \mathcal{g}(m-x_{02}-1,t)\mathcal{g}(m-x_{01},t-1) - \sqrt{T}\ \mathcal{g}(m-x_{01}-1,t)
$$

$$
\times\ \mathcal{g}(m-x_{02},t-1) + R\ \mathcal{g}(m-x_{02},t)\mathcal{g}(m-x_{01},t) + \text{c.c.} \tag{2.23}
$$

donde se ve que el factor e^{2ik_0} se ha eliminado. Esto no significa que la probabilidad no dependa de la energía, pues P(m,n,t) es función de los coeficientes de transmisión y reflexión T y R, los que a su vez dependen de k_0 y del modelo particular que se esté usando al representar a las barreras de potencial.

Esta última expresión, ec. (2.23), junto con la ec. (2.21) nos permite graficar a la probabilidad como función de m,n. En las Figs. 3.1 a 3.8 se muestran algunas gráficas tridimensionales de P(m,n,t) como función de m y n para diferentes tiempos. Para todas las figuras, las condiciones iniciales son: $A(m,0) = \delta(m,0)$, $B(m,0) = 0$, $C(m,0) = 0$ y $D(m,0) = \delta(m,0)$.

En éstas gráficas se aprecia claramente la repulsión y atracción estadísticas de fermiones y bosones respectivamente, pues si m = n, P(m,n,t) = 0 para fermiones, mientras que para bosones siempre encontramos picos en la probabilidad, al menos para algunos valores de m = n.

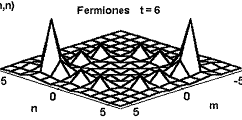


Figura 3.1

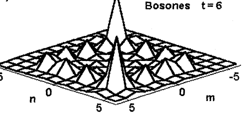


Figura 3.2

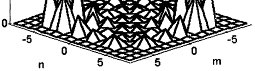


Figura 3.3

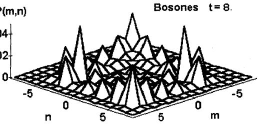


Figura 3.4

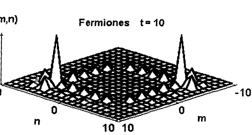


Figura 3.5

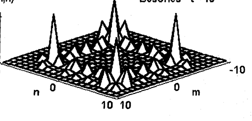


Figura 3.6

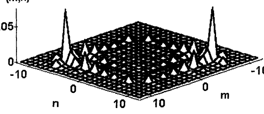


Figura 3.7

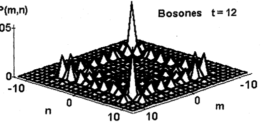


Figura 3.8

3.3. QRW PARA UN SISTEMA DE N PARTICULAS IDENTICAS

Si ahora se considera el caso de N partículas idénticas de la misma energía, que no interactúan entre sí y difundiéndose en la misma red, la generalización es directa. Se tienen ahora N condiciones iniciales y por lo tanto N funciones individuales $\phi^{(j)}$ (j = 1, 2, ..., N). La función de onda de estas N partículas, en términos de las funciones individuales es [9]:

$$\Psi(x_1,x_2,\ldots,x_N,t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (\pm1)^P P\ \phi^{(1)}(x_1,t)\phi^{(2)}(x_2,t)\ldots\phi^{(N)}(x_N,t) \tag{3.1}$$

donde P es el operador de permutaciones de los estados (1), (2),...(N). Si ahora se define, para la función de onda de la partícula j, el vector renglón $\phi_m^{(j)}(t)$ en la celda m:

$$\phi_m^{(j)}(t) \equiv \left[A^{(j)}(m,t),\ B^{(j)}(m,t)\right] \tag{3.2}$$

entonces, la densidad de probabilidad condicional de encontrar a la partícula "1" en la celda s_1, la partícula "2" en la celda s_2, etc, está dada por

$$P(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|) = \frac{1}{N!} \sum_{P\,P'} (\pm1)^{P+P'} PP'\ \phi_{s_1}^{(1)}\phi_{s_2}^{(2)}\ldots\phi_{s_N}^{(N)} \times \phi_{s_1}^{(1')\dagger}\phi_{s_2}^{(2')\dagger}\ldots\phi_{s_N}^{(N')\dagger} \tag{3.3}$$

y la condición de normalización es, obviamente:

$$\sum_{s_1}\sum_{s_2}\cdots\sum_{s_N} P(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|\ ) = 1. \tag{3.4}$$

Como en el caso de dos partículas, la función de densidad de probabilidad $P(s_1,s_2,\ldots,s_N,t|)$ se puede escribir en términos de las amplitudes modulantes de cada paquete de ondas y se obtendría una expresión semejante a la ec. (2.4). Las amplitudes de la partícula "1", $A(s_1,t)$ y $B(s_1,t)$, de la partícula "2", $C(s_2,t)$ y $D(s_2,t)$, etc., se obtendrían nuevamente de las ecs. (I.4.46) y (I.4.48).

En resumen, se puede en principio obtener en forma analítica, la distribución de un sistema de N partículas indistinguibles difundiéndose en la red, si conocemos la posición y el momento iniciales de cada partícula ya que, bajo la suposición de que éstas no interactúan entre sí, la distribución se puede escribir en función de las amplitudes individuales.

CAPITULO IV

DIFUSION MESOSCOPICA CLASICA

El propósito de este capítulo es el de discutir los resultados físicos obtenidos en los capítulos anteriores y mostrar que el modelo de QRW, que se desarrolló originalmente para describir el proceso de la difusión de partículas a nivel microscópico (cuántico) puede extenderse, tomando el promedio temporal, para describir los procesos de difusión en un espectro mucho más amplio, que comprende a los regímenes mesoscópico clásico e hidrodinámico (macroscópico).

4.1. DIFUSION MACROSCOPICA

Un enfoque utilizado con mucha frecuencia en la descripción del proceso de difusión clásica de partículas en redes es el proceso estocástico llamado *camino aleatorio* (random walk). En este modelo tradicional, se define un proceso Markoviano en el espacio de configuración donde si se interpreta a $P(x,t)$ como la distribución de probabilidad de la posición x ($x=0, \pm l, \pm 2l, \ldots$) para una partícula que se difunde en la red al tiempo t ($t = 0, \tau, 2\tau, \ldots$), siendo τ el "tiempo de salto" y l la constante periódica de la red, entonces la probabilidad satisface la ecuación de recurrencia [1]

$$P(x,t+\tau) = a\, P(x-l,t) + b\, P(x+l,t) \tag{1.1}$$

donde a y b definen las probabilidades de transición hacia adelante y hacia atrás, respectivamente y deben satisfacer la condición $a + b = 1$ si se demanda que la probabilidad esté normalizada. Además, si $a = b = 1/2$ la ec. (1.1) describe un proceso puramente difusivo. Por otro lado, si $a \neq b$ se tendrá un proceso difusivo con sesgo, que físicamente se interpreta como un proceso de difusión en presencia de un potencial externo [1].

El proceso de camino aleatorio discreto ec. (1.1), relaciona probabilidades a dos tiempos consecutivos, lo que significa que éste es un proceso Markoviano, y tres posiciones consecutivas (saltos a vecinos cercanos). La versión continua de la ec. (1.1), conocida en la literatura como la *ecuación de difusión*, es un caso particular de la ecuación de Fokker-Planck [15] y se obtiene al tomar el límite cuando $l \to 0$ y $\tau \to 0$, de tal manera que al desarrollar en serie de Taylor los términos de esta ecuación alrededor de (x,t) se obtiene:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{l^2}{2\tau}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{(b - a)l}{\tau}\frac{\partial P}{\partial x} \tag{1.2}$$

Si además a=b=1/2, es decir, probabilidades de salto isotrópicas, entonces la ecuación anterior se reduce a

$$\frac{1}{D_{rw}}\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \tag{1.3}$$

que es la ecuación de difusión clásica, donde $D_{rw} \equiv l^2/2\tau = vl/2$ es el coeficiente de difusión, y $v \equiv l/\tau$ es la velocidad media de las partículas.

Nótese que la ec. (1.3) tiene sentido sólo si el coeficiente de difusión es finito, así que la velocidad media debe ser infinita ya que se puede escribir como $v = 2D_{rw}/l$ y al pasar al límite continuo se supuso que $l \to 0$. Es esta velocidad infinita la responsable de que en el fenómeno de difusión clásica la perturbación se propague instantáneamente. Puede uno convencerse fácilmente de ésto si tomamos como ejemplo una situación donde inicialmente la concentración de partículas es diferente de cero sólo en un punto (distribución delta de Dirac), entonces la solución de la ecuación de difusión es una gaussiana [16]. Esto implica que la probabilidad de encontrar partículas a distancias muy grandes y tiempos pequeños es diferente de cero, lo cual sugiere que efectivamente la propagación es instantánea.

En el proceso anterior la probabilidad sólo depende de la posición x y del tiempo t, es decir, no existe memoria de la dirección que tiene la partícula en cada celda. Esto significa que la probabilidad no depende del momento p de la partícula. Si se describe este proceso en el espacio fase, utilizando la Teoría Cinética por ejemplo, la ausencia del momento en la función de distribución significa que los momentos ya alcanzaron una distribución de equilibrio y que la partícula se encuentra en *equilibrio térmico*, aunque la distribución de posiciones se encuentre todavía muy lejos de él. Esta suposición, que caracteriza el llamado *regimen hidrodinámico* en los fenómenos de difusión es aplicable a materiales macroscópicos y en una escala de tiempos *grande*, de modo que la función de distribución de una partícula, f(x,p,t), debe ser escrita como

$$f(x,p,t) = \phi_{eq}(p,t)\ P(x,t) = \exp[-p^2/2mk_BT]\ P(x,t) \tag{1.4}$$

donde m es la masa de la partícula, k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura y $\phi_{eq}(p,t)$ es la distribución de Maxwell-Boltzmann.

Si la escala de tiempos asociada en la difusión macroscópica debe ser grande, es claro que el material debe tener también dimensiones macroscópicas, pero si el sistema se encuentra aún muy lejos del equilibrio no podemos utilizar la ecuación de difusión, pues ésta es aplicable sólo cuando se ha alcanzado, localmente, un equilibrio térmico.

En la siguiente sección se deducirá la ecuación de difusión mesoscópica, aplicable a un regimen muy lejos del equilibrio. Recuérdese que el modelo de QRW describe precisamente el fenómeno de difusión a un nivel microscópico y es la ecuación de Schrödinger la que gobierna estos procesos. En el otro extremo, es decir, en los procesos macroscópicos, se encuentra la ecuación de difusión clásica, ec. (1.3). Pero en la región intermedia, esto es, para los materiales que no se puede considerar estrictamente macroscópicos ni microscópicos, llamados *materiales mesoscópicos o nanoestructuras* [6,16,17], no queda claro cuál debe ser la ecuación que gobierna al proceso de difusión. Este es un aspecto muy importante, pues la Física Mesoscópica ha adquirido gran relevancia en los últimos años debido al esfuerzo constante encaminado hacia la miniaturización de los componentes electrónicos y su utilización en el desarrollo de las computadoras [18].

En lo que sigue, se mostrará que la descripción del fenómeno de difusión en estos materiales puede darse a partir del modelo de QRW y en particular se deducirá la *ecuación de difusión generalizada*, aplicable a los materiales mesoscópicos clásicos.

4.2. DIFUSION MESOSCOPICA CLASICA

Primero se definirá con precisión qué se entiende por *material mesoscópico*. Como ya se mostró en el capítulo uno, conforme se incrementa el tamaño de cualquier muestra microscópica, las fluctuaciones relativas debidas a interferencia cuántica desaparecen gradualmente. Si se comienza con un material microscópico y se incrementa su tamaño hasta un punto en el que se puedan despreciar las fluctuaciones cuánticas, entonces se tendrá un sistema *incoherente* que por definición será un sistema *clásico*, pues se han despreciado los términos de interferencia cuántica. Sin embargo, supóngase que el material es todavía lo suficientemente pequeño como para considerar que la función de distribución de los momentos no ha alcanzado todavía una independencia estadística de la posición y mucho menos ha alcanzado un estado de equilibrio térmico. A estos materiales se les llamará *mesoscópicos* y se mostrará en esta sección que bajo estas condiciones se obtiene un regimen difusivo clásico e *irreversible* que se encuentra todavía muy lejos del equilibrio.

La difusión en materiales mesoscópicos clásicos se puede describir con cualquier teoría cinética incoherente lejos del equilibrio. La única condición es que la función de distribución de una partícula debe ser una función de distribución conjunta f(x,p,t) de la posición y el momento. Ambas variables (x,p) dependen del tiempo y están correlacionadas estadísticamente.

Para encontrar la ecuación de difusión generalizada que describe los procesos de difusión en el regimen mesoscópico clásico, se debe promediar. En este caso se utilizará el llamado *Promedio de Grano Grueso*, definido de la siguiente manera

$$\mathcal{P}_+(x,t) \equiv \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{t} P_+(x,n) \tag{2.1a}$$

$$\mathcal{P}_-(x,t) \equiv \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{t} P_-(x,n) \tag{2.1b}$$

Aquí P_+ y P_- son las probabilidades calculadas con el modelo de QRW y mostradas en el capítulo I, ecs. (I.5.5a) y (I.5.5b), que se pueden escribir como

$$P_+(x,t) = T\, P_+(x-1,t-1) + R\, P_-(x,t-1) + P_{+int} \tag{2.2a}$$

$$P_-(x,t) = R\, P_+(x,t-1) + T\, P_-(x+1,t-1) + P_{-int} \tag{2.2b}$$

donde P_{+int} y P_{-int} son los términos de interferencia. Si se define

$$P(x,t) \equiv P_{+}(x,t) + P_{-}(x,t) \qquad (2.3a$$

$$P_{int}(x,t) \equiv P_{+int}(x,t) + P_{-int}(x,t) \qquad (2.3b$$

y se grafican para ciertas condiciones iniciales específicas, por ejemplo, $A(m,0)=\delta(m,0)$ y $B(m,0)=0$, se obtiene la figura 4.1:

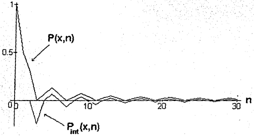
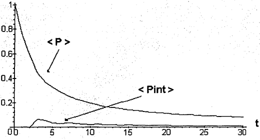


Figura 4.1

Estas gráficas muestran que aunque $P(x,n)$ es siempre positiva, la contribución de los términos de interferencia a la probabilidad total oscila entre valores positivos y negativos, y se espera que al tomar el promedio de grano grueso éstos se vuelvan despreciables. Efectivamente ocurre así, pues al graficar los promedios de P_{int} y P, se obtiene la Fig. 4.2:



donde se ve claramente que al tomar el promedio de grano grueso, los términos de interferencia no contribuyen apreciablemente y los términos que sobreviven son

$$\mathcal{P}_+(x,t) = T\,\mathcal{P}_+(x-1,t-1) + R\,\mathcal{P}_-(x,t-1) \tag{2.4a}$$

$$\mathcal{P}_-(x,t) = R\,\mathcal{P}_+(x,t-1) + T\,\mathcal{P}_-(x+1,t-1) \tag{2.4b}$$

Las ecuaciones anteriores describen un sistema incoherente, pues ya se eliminaron los términos de interferencia. Nótese que estas ecuaciones dependen del momento p, aunque no sea obvio a primera vista, pues representan un proceso que guarda memoria de la dirección a través de P_+ y P_-, que son las probabilidades de encontrar a la partícula en alguna celda, pero distinguiendo entre movimiento hacia la derecha (+) y hacia la izquierda (-). Por otro lado, si se supone que todas las partículas tienen la misma velocidad media $v_0=l/\tau$ y que el efecto de las colisiones elásticas en la red es simplemente cambiar sus direcciones de movimiento entonces, en una red unidimensional el momento tendrá sólo dos valores: $\pm|p_0|$. También se definirá $P_+(x,t) \equiv f(x,+|p_0|,t)$ y $P_-(x,t) = f(x,-|p_0|,t)$, respectivamente, donde P_+ y P_- describen la probabilidad conjunta de encontrar a la partícula en la posición x al tiempo t con velocidades positiva y negativa. Las constantes T y R denotan respectivamente las probabilidades de dispersión hacia adelante y hacia atrás y generalmente T > R, lo cual expresa la inercia de las partículas bajo el proceso de dispersión, y la condición T + R = 1 garantiza la conservación de partículas en cada colisión.

El proceso descrito por las ecs. (2.4a) y (2.4b), conocido en la literatura como *Camino Aleatorio Persistente* (Persistent-Random-Walk) [13,19] o *Camino Aleatorio Correlacionado* (Correlated-Random-Walk) [20], que en adelante se denotará como PRW, describe un proceso de camino aleatorio *sin sesgo*. Cada probabilidad individual P_+ y P_- en estas ecuaciones representa un proceso de Markov de segundo orden, pues sólo se relacionan dos tiempos consecutivos.

Es importante notar que el modelo de QRW define un proceso completamente reversible porque la matriz de dispersión S se construyó unitaria y simétrica, lo cual hace a cada proceso de dispersión invariante ante inversiones en el tiempo. Esto se demuestra fácilmente si observamos que la ec. (I.4.4) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} B(x,t) \\ A(x+1,t) \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A(x,t-1) \\ B(x+1,t-1) \end{pmatrix} \tag{2.5}$$

y la relación inversa como

$$S^{-1} \begin{pmatrix} B(x,t) \\ A(x+1,t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A(x,t-1) \\ B(x+1,t-1) \end{pmatrix} \tag{2.6}$$

Si ahora se invierte el tiempo, que en Mecánica Cuántica significa reemplazar al tiempo t por -t y tomar el complejo conjugado [9,21], se obtiene

$$\begin{pmatrix} A^*(x,t-1) \\ B^*(x+1,t-1) \end{pmatrix} = (S^{-1})^* \begin{pmatrix} B^*(x,t) \\ B^*(x+1,t) \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

Utilizando la propiedad de unitariedad de la matriz S, vemos que $(S^{-1})^* = (S^{\dagger})^* = S^T$, la matriz transpuesta de S. Además, S es una matriz simétrica, ec. (I.1.12), y se puede escribir $(S^{-1})^* = S$. Pero ahora las direcciones de movimiento se han invertido y los coeficientes (A^*,B^*) se pueden intercambiar por (B,A) y la ec. (2.7) queda como

$$\begin{bmatrix} B(x,t-1) \\ A(x+1,t-1) \end{bmatrix} = S \begin{bmatrix} A(x,t) \\ B(x+1,t) \end{bmatrix} \tag{2.8}$$

La ec. (2.8) describe un proceso cuya evolución temporal va de t a t-1 y es, por otro lado, idéntica a la ec. (2.5), lo cual demuestra el carácter reversible del proceso de QRW.

Volviendo a las ecs. (2.4a) y (2.4b) vemos que éstas se obtienen al eliminar, mediante el promedio de grano grueso, los términos de interferencia que aparecen en la probabilidad calculada cuánticamente. Al hacer esto, se destruyó la propiedad de unitariedad del operador de evolución temporal, de manera que el proceso resultante (PRW) se convierte, entonces, en un proceso irreversible.

Ahora, para encontrar la ecuación de difusión generalizada, se definirá una distribución de probabilidad *total o reducida* $\mathcal{P}_T(x,t)$, como

$$\mathcal{P}_T(x,t) \equiv \sum_p f(x,p,t) = \mathcal{P}_+(x,t) + \mathcal{P}_-(x,t) \tag{2.9}$$

y se encontrará la ecuación de recurrencia que satisface esta probabilidad. Para esto, se eliminarán las probabilidades $\mathcal{P}_+$ y $\mathcal{P}_-$ en las ecs. (2.4a) y (2.4b) en favor de $\mathcal{P}_T$. Primero se despeja a $\mathcal{P}_-$ de la ec. (2.4a):

$$R\, \mathcal{P}_-(x,t-1) = \mathcal{P}_+(x,t) - T\, \mathcal{P}_+(x-1,t-1) \tag{2.10}$$

y se sustitye este resultado en la ec. (2.4b) para obtener una ecuacion en la probablidad $\mathcal{P}_+(x,t)$:

$$\mathcal{P}_+(x,t-1) - T\, \mathcal{P}_+(x,t) = R^2\mathcal{P}_+(x,t-1) + T\, \mathcal{P}_+(x+1,t) - T^2\mathcal{P}_+(x,t-1) \tag{2.11}$$

que se puede reescribir como

$$\mathcal{P}_+(x,t+1) - T\, \mathcal{P}_+(x-1,t) = T\, \mathcal{P}_+(x+1,t) + (R-T)\mathcal{P}_+(x,t-1) \tag{2.12}$$

Si ahora se despeja a $\mathcal{P}_+(x,t-1)$ de la ec. (2.4b):

$$R\ \mathcal{P}_+(x,t-1) = \mathcal{P}_-(x,t) - T\ \mathcal{P}_-(x+1,t-1) \tag{2.13}$$

y se sustituye en la ec. (2.4a) se obtiene una ecuación para $\mathcal{P}_-$:

$$\mathcal{P}_-(x,t+1) - T\ \mathcal{P}_-(x+1,t) = T\ \mathcal{P}_-(x-1,t) - T^2\mathcal{P}_-(x,t-1) + R^2\mathcal{P}_-(x,t-1) \tag{2.14}$$

que al simplificar se reduce a la ecuación:

$$\mathcal{P}_-(x,t+1) - T\ \mathcal{P}_-(x+1,t) = T\ \mathcal{P}_-(x-1,t) + (R-T)\mathcal{P}_-(x,t-1) \tag{2.15}$$

Sumando las ecs. (2.12) y (2.15) se tendrá, aplicando la definición de $\mathcal{P}_T$, ec. (2.9):

$$\mathcal{P}_T(x,t+1) = T\ [\mathcal{P}_T(x-1,t) + \mathcal{P}_T(x+1,t)] + (R-T)\mathcal{P}_T(x,t-1) \tag{2.16}$$

que es la ecuación buscada. Aquí se ve claramente que si $T=R=1/2$ (dispersión isotrópica) se recupera el camino aleatorio simple (Markoviano), descrito por la ec. (1.1). Pero si $T \neq R$, entonces $\mathcal{P}_T(x,t)$ define un proceso *no Markoviano*, pues en la ec. (2.14) aparecen tres tiempos consecutivos. Esto no es sorprendente pues esta ecuación por dos ecuaciones en diferencias simultáneas de primer orden en el tiempo lo cual dio lugar a una ecuación de segundo orden.

Por lo tanto, al pasar al caso continuo, se debe usar hasta una segunda derivada con respecto al tiempo en el desarrollo en serie de Taylor de la ec. (2.16):

$$\mathcal{P}_T(x,t) + \frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial t}\tau + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial t^2}\tau^2 = T\ [\mathcal{P}_T(x,t) - \frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial x} l$$

$$+ \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial x^2} l^2 + \mathcal{P}_T(x,t) + \frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial x} l + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial x^2} l^2]$$

$$- (T-R)[\mathcal{P}_T(x,t) - \frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial t}\tau + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial t^2}\tau^2] \tag{2.17}$$

que se simplifica, usando la relación $T + R = 1$, a la siguiente expresión

$$T \frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial t^2} \tau^2 + 2R \frac{\partial \mathcal{P}_T}{\partial t} \tau = T \frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial x^2} l^2 \tag{2.18}$$

la cual se puede escribir finalmente, en forma compacta, como:

$$\frac{1}{v_0^2} \frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial \mathcal{P}_T}{\partial t} = \frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial x^2} \tag{2.19}$$

donde se ha definido

$$D \equiv \frac{l^2 T}{2R\tau} \quad y \quad v_0^2 \equiv \frac{l^2}{\tau^2} \tag{2.20}$$

Una vez más se puede afirmar, como se hizo en relación a la ec. (1.3), que si se exige que el coeficiente de difusión sea finito, esto parece implicar que v_0 sea infinita, en cuyo caso la ec. (2.19) se reduciría nuevamente a la ec. (1.3), es decir, se obtendría la ecuación de difusión clásica. Sin embargo, en este caso existe una segunda interpretación posible para la ec. (2.19), pues si $R \ll 1$ entonces v_0 no tiene que ser infinita para que la expresión anterior tenga sentido. En este caso la D es el coeficiente de difusión de Landauer derivado de la ley de Fick y está asociado a la parte incoherente del proceso de QRW. El término v_0 representa la velocidad media de las partículas y no la velocidad del sonido como se sugiere en el libro de Morse y Feshbach [22].

La suposición de que $R \ll 1$ es la correcta, al menos para materiales mesoscópicos, pues si se analizan las ecuaciones (2.1a) y (2.1b) individualmente y se pasa al límite continuo, se obtiene, para la primera de estas ecuaciones

$$\mathcal{P}_+(x,t) + \frac{\partial \mathcal{P}_+(x,t)}{\partial t} \tau = T [\mathcal{P}_+(x,t) - \frac{\partial \mathcal{P}_+(x,t)}{\partial x} l] + R\, \mathcal{P}_-(x,t) \tag{2.21}$$

que se reduce a la ecuación

$$\frac{\partial \mathcal{P}_+}{\partial t} = -T \frac{l}{\tau} \frac{\partial \mathcal{P}_+}{\partial x} - \frac{R}{\tau} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \tag{2.22}$$

y la segunda ecuación, también en el caso continuo, tomaría la forma

$$\mathcal{P}_-(x,t) + \frac{\partial \mathcal{P}_-(x,t)}{\partial t} \tau = R\, \mathcal{P}_+(x,t) + T\, [\, \mathcal{P}_-(x,t) + \frac{\partial \mathcal{P}_-(x,t)}{\partial x} l \tag{2.23}$$

que se reduce a la ecuación

$$\frac{\partial \mathcal{P}_-}{\partial t} = T \frac{l}{\tau} \frac{\partial \mathcal{P}_-}{\partial x} + \frac{R}{\tau} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \tag{2.24}$$

Es claro que en el límite cuando $l \to 0$ y $\tau \to 0$ las ecs. (2.22) y (2.24) tendrán sentido sólo si $\frac{R}{\tau}$ = constante. Por lo tanto, podemos escribir:

$$R \equiv \frac{\tau}{2\tau_0} \tag{2.25}$$

y esta nueva constante τ_0 debe tener unidades de tiempo. Además, $T = 1 - R = 1 - \frac{\tau}{2\tau_0}$ y en el límite $\tau \to 0$, $l \to 0$, se tiene

$$\frac{R}{\tau} \to \frac{1}{2\tau_0}, \quad T \to 1, \quad \frac{l}{\tau} \to v_0 \tag{2.26}$$

Estas consideracions hacen pensar que para valores arbitrarios de los coeficientes de transmisión y reflexión (T,R) el límite del continuo *no existe* y sólo cuando se satisfacen las relaciones anteriores, la ec. (2.19) tiene significado físico.

Podemos llevar este análisis todavía más lejos y mostrar que las ecuaciones involucradas en la difusión clásica, en particular la ecuación de conservación de masa y la generalización de la ley de Fick se obtienen, bajo ciertas consideraciones, a partir de nuestro modelo. Con la definición de la constante τ_0, las ecs. (2.22) y (2.24) se pueden escribir de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \mathcal{P}_+}{\partial t} = - v_0 \frac{\partial \mathcal{P}_+}{\partial x} - \frac{1}{2\tau_0} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \tag{2.27a}$$

$$\frac{\partial \mathcal{P}_-}{\partial t} = + v_0 \frac{\partial \mathcal{P}_-}{\partial x} + \frac{1}{2\tau_0} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \tag{2.27b}$$

Ahora se encontrarán a partir de estas relaciones, las ecuaciones de recurrencia que deben satisfacer la suma $\mathcal{P}_+ + \mathcal{P}_- \equiv \mathcal{P}_T$ y la diferencia $v_0(\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \equiv J$, que físicamente se interpretan como la *concentración* y la *densidad de corriente* [23], respectivamente. Para esto, se suman primero las ecs. (2.27a) y (2.27b):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\mathcal{P}_+ + \mathcal{P}_-) = - v_0 \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \tag{2.28}$$

que con las definiciones anteriores se puede escribir como

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial t} = - \frac{\partial J(x,t)}{\partial x}} \tag{2.29}$$

Esta es la *ley de conservación (local) de masa.*

Si ahora se restan las ecs. (2.27a) y (2.27b), se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) = - v_0 \frac{\partial}{\partial x} (\mathcal{P}_+ + \mathcal{P}_-) - \frac{1}{2\tau_0} (\mathcal{P}_+ - \mathcal{P}_-) \tag{2.30}$$

o bien

$$\frac{1}{v_0} \frac{\partial J(x,t)}{\partial t} = - v_0 \frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial x} - \frac{1}{v_0\tau_0} J(x,t) \tag{2.31}$$

Despejando en la ecuación anterior a J se obtiene:

$$\boxed{J = -D\frac{\partial \mathcal{P}_T(x,t)}{\partial x} - \tau_0 \frac{\partial J(x,t)}{\partial t}} \tag{2.32}$$

donde se definió $D \equiv v_0^2\, \tau_0 = v_0^2 \dfrac{T}{2R}\, \tau$, que es precisamente el coeficiente de difusión de Landauer, asociado a la parte incoherente del proceso de QRW.

Esta ecuación, sin el último término, sería la ley de Fick y la presencia de la derivada parcial de J(x,t) con respecto al tiempo indica que el material es "no Fickiano". La ec. (2.32) es conocida en la literatura como la *ecuación de Maxwell-Catanneo* [7].

Combinando las ecs. (2.29) y (2.32) se obtiene

$$\frac{\partial \mathcal{P}_T}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial x^2} + \tau_0 \frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial J}{\partial x}$$

$$= D\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial x^2} - \tau_0 \frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial t^2} \tag{2.33}$$

Por lo tanto, se puede escribir

$$\boxed{\frac{1}{v_0^2}\frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial t^2} + \frac{1}{D}\frac{\partial \mathcal{P}_T}{\partial t} = \frac{\partial^2 \mathcal{P}_T}{\partial x^2}} \tag{2.34}$$

que es la *ecuación del telegrafista* [24] para la concentración.

Para entender mejor el origen de la segunda derivada con respecto al tiempo en la ecuación anterior, nótese que la función de distribución de la concentración $\mathcal{P}_T(x,t)$ está descrita por un proceso *no Markoviano* y la ecuación que satisface *para valores arbitrarios* de T y R es la ec. (2.16):

$$\boxed{\mathcal{P}_T(x,t+1) = T\,[\mathcal{P}_T(x-1,t) + \mathcal{P}_T(x+1,t)] + (R-T)\mathcal{P}_T(x,t-1)} \qquad (2.35)$$

Esta ecuación muestra, como ya se mencionó, que si $T=R=1/2$ se recupera el proceso de camino aleatorio simple *(Markoviano)* descrito por la ec. (1.1). Pero si $T \neq R$ entonces el proceso tiene memoria debido a la inercia en el proceso de dispersión; por lo tanto $\mathcal{P}_T(x,t)$ debe satisfacer una ecuación *no Markoviana*. En este caso la probabilidad define un proceso que relaciona probabilidades a tres tiempos consecutivos y al pasar al límite continuo debemos permitir hasta una segunda derivada en el desarrollo en serie de Taylor. Claramente, la ecuación de Maxwell-Cattaneo y la segunda derivada con respecto al tiempo en la ecuación del telegrafista son una consecuencia de la propiedad *no Markoviana* de la función de distribución. Más aún, para valores arbitrarios de T y R, la versión discreta, ec. (2.30) es la única ecuación de difusión generalizada válida.

También en esta sección se muestran algunas gráficas que exhiben el comportamiento de la densidad de probabilidad. En las Figs. 4.3 a 4.6 se tienen unas gráficas de $\mathcal{P}_T(x,t)$ Vs x para diferentes valores del coeficiente de transmisión T, cuando las condiciones iniciales son $\mathcal{P}_+(x,0) = \mathcal{P}_-(x,0) = \frac{1}{2}\,\delta(x,0)$:

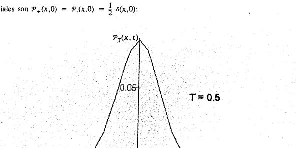


Figura 4.3

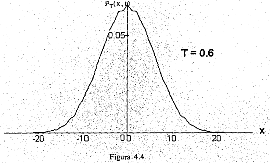


Figura 4.4

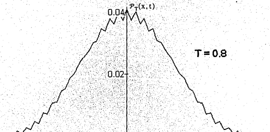


Figura 4.5

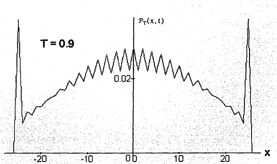


Figura 4.6

En estas gráficas se observa que cuando T = 1/2, se recupera el camino aleatorio clásico y conforme aumenta el coeficiente de transmisión (y por lo tanto la inercia) las fluctuaciones se vuelven más intensas.

Las Figs. 4.7 a 4.10 muestran gráficas de la probabilidad total a diferentes tiempos y con las condiciones iniciales anteriores:

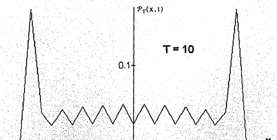


Figura 4.7

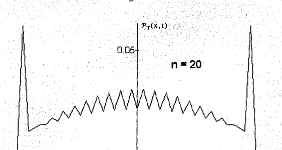


Figura 4.8

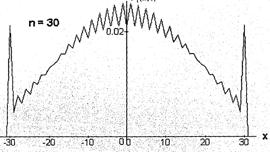


Figura 4.9

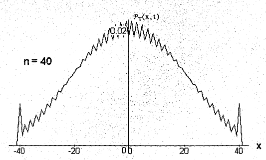


Figura 4.10

Finalmente, las Figs. 4.11 a 4.14 muestran el comportamiento de la probabilidad total para diferentes valores del coeficiente de transmisión, pero con condiciones iniciales: $\mathcal{P}_+(x,0) = \delta(x,0)$ y $\mathcal{P}_-(x,0) = 0$.

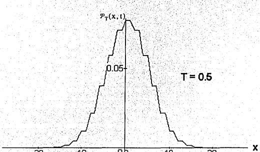


Figura 4.11

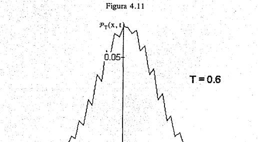


Figura 4.12

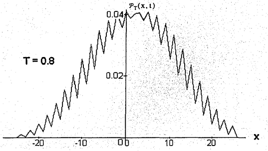


Figura 4.13

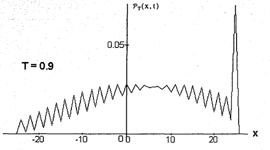


Figura 4.14

CONCLUSIONES

Los objetivos propuestos en el desarrollo de este trabajo fueron los siguientes:

1. Extender el modelo de QRW para incluir condiciones a la frontera periódicas.
2. Introducir la estadística correspondiente en el fenómeno de la difusión de partículas indistinguibles.
3. Deducir la ecuación de difusión mesoscópica clásica.

En base a los resultados de los capítulos 2,3 y 4, puede afirmarse que dichos objetivos se cumplieron satisfactoriamente, pues en el capítulo 1 se calculó la densidad de probabilidad y la corriente de probabilidad para una partícula como función de la posición y el tiempo, dadas ciertas condiciones iniciales, para una red unidimensional con condiciones de frontera periódicas. Esto es importante pues permite estudiar el problema de la difusión cuántica en sistemas *finitos*, como un anillo, por ejemplo.

En el capítulo 2 se introdujo, por primera vez en la literatura, el aspecto de la indistinguibilidad de las partículas en el *camino aleatorio* y se calculó, en forma explícita, la probabilidad cuántica de encontrar a dos partículas idénticas como función de la posición y el tiempo en una red infinita.

En el capítulo 3 se abordó el problema de la difusión mesoscópica clásica. Ahí se plantea el problema de deducir la ecuación de difusión mesoscópica, válida para tiempos muy pequeños, y que en la literatura se sugiere que debe ser la ecuación del telegrafista. El objetivo fundamental en este punto fue el de obtener esta ecuación, partiendo del modelo de QRW y se mostró que al tomar el promedio de grano grueso de las probabilidades cuánticas, el sistema de ecuaciones recursivas se reduce a las ecuaciones del camino aleatorio persistente las cuales dan lugar, en el límite del continuo y bajo ciertas restricciones, a la ecuación de conservación de la masa y la ecuación de Maxwell-Cattaneo, que son las ecuaciones constitutivas de donde se obtiene la ecuación del telegrafista. De las gráficas obtenidas en el capítulo 4 se ve que el régimen de tiempos que define al proceso de la difusión mesoscópica clásica es del orden de 10τ, donde τ es el *tiempo de salto* definido en el modelo de QRW. Finalmente, se sugiere que la segunda derivada con respecto al tiempo en la ecuación del telegrafista proviene del carácter no Markoviano del proceso de difusión, que fue heredado de las propiedades no Markovianas de los coeficientes de reflexión y transmisión y que son consecuencia de la inercia de las partículas, ya que la condición para que las ecuaciones de camino aleatorio persistente se reduzcan a la ecuación del telegrafista es que $R \ll 1$ y $T \sim 1$.

Aunque en el presente trabajo se trató el problema de la difusión de partículas únicamente en redes unidimensionales, no debe perderse de vista que estos modelos sencillos tienen la finalidad de dar una idea del camino a seguir en situaciones físicas más realistas y por lo tanto mucho más complicadas, en las cuales el aparato matemático oscurece con mucha frecuencia los resultados físicos.

Como el modelo de QRW se inventó hace unos cuantos años, existen muchos problemas que pueden tratarse con este método, algunos probablemente más interesantes que los resueltos aquí, pero el aspecto matamático es también mucho más elaborado. Durante el desarrollo de este trabajo surgieron muchas ideas y líneas de investigación que pueden ser abordadas con los métodos descritos en los capítulos anteriores y que, por razones obvias no se llevaron a cabo, pero que se pretende desarrollar en un futuro próximo. Algunos de los proyectos a desarrollar en el futuro son: (*i*) extender el modelo de QRW a tres dimensiones, (*ii*) estudiar la conductividad eléctrica como un proceso de difusión de partículas cargadas en presencia de un campo eléctrico en una, dos y tres dimensiones y (*iii*) aplicar el modelo al proceso de la difusión cuántica de partículas indistinguibles en tres dimensiones.

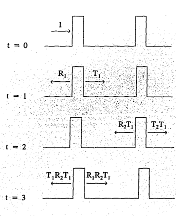
Finalmente, vale la pena mencionar que actualmente no existen trabajos experimentales con los cuales cotejar estos resultados, pero debido al interés creciente que existe en el estudio de los materiales mesoscópicos, creemos que las aportaciones hechas aquí pueden ser de utilidad para trabajos futuros.

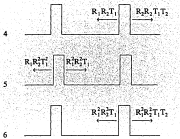
A P E N D I C E

CALCULO DE LOS COEFICIENTES MACROSCOPICOS DE TRANSMISION Y REFLEXION

En este apéndice se deducirán las expresiones para los coeficientes de transmisión y reflexión de una red periódica, formada por N barreras de potencial, en términos de los respectivos coeficientes microscópicos asociados a cada una de las barreras individuales.

La clave para deducir estas expresiones se encuentra en el cálculo de los coeficientes para una red formada por dos barreras ($N = 2$). Supóngase que inicialmente se tiene un paquete de ondas incidiendo por la izquierda, con amplitud de probabilidad uno. Además, se supondrá también, por el momento, que los coeficientes microscópicos asociados con las dos barreras son diferentes: (T_1,R_1) y (T_2,R_2). A continuación se muestra una secuencia de las dispersiones sufridas por el paquete de ondas en las dos barreras de potencial, para los primeros tiempos





En las figuras anteriores se muestran las probabilidades de "escape" del paquete por la izquierda y la derecha únicamente al tiempo mostrado y no las probabilidades respectivas a tiempos anteriores.

El coeficiente de transmisión total o macroscópico se puede caluular sumando *incoherentemente* todos los términos que van apareciendo sucesivamente del lado derecho de la red. Que el resultado sea una suma incoherente se justifica porque los términos individuales representan la fracción del paquete transmitido a *tiempos diferentes* y de acuerdo a nuestro modelo, la probabilidad total no contiene términos de interferencia.

Al llevar a cabo la suma de estos términos encontramos, para el coeficiente de transmisión

$$\mathcal{T}^{(2)} = T_1T_2 + R_1R_2T_1T_2 + R_1^2R_2^2T_1T_2 + \cdots + (R_1R_2)^n + \cdots$$

$$= T_1T_2\,[1 + R_1R_2 + (R_1R_2)^2 + \cdots] \tag{A.1}$$

pero la suma que está dentro de los paréntesis cuadrados no es otra cosa que la serie geométrica. Por lo tanto

$$\mathcal{T}^{(2)} = \frac{T_1T_2}{1 - R_1R_2} \tag{A.2}$$

Si los coeficientes de transmisión y reflexión de las dos barreras son iguales, $T_1 = T_2 \equiv T$ y $R_1 = R_2 \equiv R$, entonces

$$\mathcal{T}^{(2)} = \frac{T^2}{1 - R^2} = \frac{T^2}{(1-R)(1+R)} = \frac{T^2}{T(1+R)} = \frac{T}{1+R} \tag{A.3}$$

Aunque el coeficiente de reflexión se puede obtener al sumar incoherentemente todas las probabilidades parciales asociadas con la salida del paquete por la izquierda a tiempos sucesivos, es más directo si se utiliza la condición de normalización de la probabilidad ($\mathcal{T} + \mathcal{R} = 1$):

$$\mathcal{R}^{(2)} = 1 - \mathcal{T}^{(2)} = 1 - \frac{T}{1+R} = \frac{2R}{1+R} \tag{A.4}$$

El procedimiento para calcular los coeficientes totales para $N > 3$ es directo. Para verlo, supóngase que $N = 3$. Ahora puede pensarse a esta red formada por tres barreras de potencial como si estuviera compuesta de dos partes; una que contiene a las dos barreras de la izquierda, cuyos coeficientes de transmisión y reflexión serían $(\mathcal{T}^{(2)},\mathcal{R}^{(2)})$ y la otra parte que contiene a la barrera de la derecha con coeficientes (T,R). Utilizando el resultado para dos barreras, ec. (A.2) se obtiene

$$\mathcal{T}^{(3)} = \frac{\mathcal{T}^{(2)}T}{1-\mathcal{R}^{(2)}R} \tag{A.5}$$

y al sustituir las expresiones para $\mathcal{T}^{(2)}$ y $\mathcal{R}^{(2)}$, ecs. (A.3) y (A.4), queda

$$\mathcal{T}^{(3)} = \frac{\dfrac{T^2}{1+R}}{1 - \dfrac{2R^2}{1+R}} = \frac{T^2}{1+R-2R^2} = \frac{T^2}{(1-R)(1+2R)} = \frac{T}{1+2R} \tag{A.6}$$

Un análisis de los resultados para $\mathcal{T}^{(2)}$ y $\mathcal{T}^{(3)}$ sugiere que en el caso general de una red con N barreras de potencial, todas ellas con coeficientes de transmisión y reflexión microscópicos T y R, el resultado sería

$$\mathcal{T}^{(N)} = \frac{T}{1+(N-1)R} \tag{A.7}$$

y

$$\mathcal{R}^{(N)} = 1 - \mathcal{T}^{(N)} = \frac{1+(N-1)R-T}{1+(N-1)R} = \frac{NR}{1+(N-1)R} \tag{A.8}$$

Sin embargo, se puede hacer una demostración más formal si se utiliza el Principio de Inducción Matemática:

i) Para N = 1, obviamente se cumple la ec. (A.7): $\mathcal{T}^{(1)} = T$

ii) Suponiendo que la ec. (A.7) es válida para N, se debe cumplir para N+1.

Para calcular $\mathcal{T}^{(N+1)}$ pensemos, una vez más, que la red está compuesta por dos partes; ahora una de ellas consiste en las N primeras barreras, cuyos coeficientes son $(\mathcal{T}^{(N)},\mathcal{R}^{(N)})$, dados por las ecs. (A.7) y (A.8) y la otra parte sería la última barrera (N+1), con coeficientes (T,R). Entonces, de la ec. (A.2) se obtiene

$$\mathcal{T}^{(N+1)} = \frac{\mathcal{T}^{(N)}T}{1 - \mathcal{R}^{(N)}R} = \frac{\dfrac{T^2}{1+(N-1)R}}{1 - \dfrac{NR^2}{1+(N-1)R}} = \frac{T}{1 + NR} \tag{A.9}$$

con lo cual queda demostrada nuestra afirmación.

REFERENCIAS

[1] M. Kac, *Random Walk and the Theory of Brownian Motion*, in: Selected Papers in Noise and Stochastic Processes, edited by N. Wax

[2] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970)

[3] S. Godoy, S. Fujita, *J. Chem. Phys.* **97**, 5148 (1992)

[4] S. Godoy, R.F. Rodríguez, *Rev. Mex. Fis.* **32**, 643 (1986)

[5] S. Godoy, F. Espinosa, *Phys. Rev. E* **52**, 3381 (1995)

[6] H. Ehrenreich and D. Turnbull, eds., Solid State Physics, Advances in Research and Applications, Vol. 44, Academic Press, Inc, 1991

[7] P. Vernote, C.R. *Acad. Sci. Paris* **246**, 3154 (1958)

[8] C. W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences, 2nd. Ed., Springer-Verlag, (1985)

[9] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, (1963)

[10] K. B. Wolf, *Integral Transforms in Science and Engineering*, in: Mathematical Concepts and Methods in Science and Engineering, ser. ed., A. Mielle, Vol 11, Plenum Press, (1979)

[11] F. Reza, Linear Spaces in Engineering, Ginn and Co., (1971)

[12] *Handbook of Mathematical Functions*, edited by M. Abramowitz and J. A. Stegun (Dover New York, (1968)

[13] G. Weiss, Aspects and Applications of the Random Walk, North-Holland Pub. Co., 1994

[14] S. Godoy, *J. Chem. Phys.* **94**, 6214 (1991)

[15] H. Risken, The Fokker-Planck Equation, Springer Verlag, (1984)

[16] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943)

[17] N. G. Van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, North-Holland, Amsterdam, (1981)

[18] R. T. Bates, Sci. Am. **258**. 78 (1988)

[19] S. Godoy, J. Chem. Phys. **78**, 11 (1983)

[20] G. H. Weiss, J. Stat. Phys. **37**, 325 (1984)

[21] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley Pub. Co., (1994)

[22] Morse-Feshbach, Methods of Theoretical Physics, Mc Graw-Hill, New York, (1953)

[23] E. W. Montroll and B. J. West, *On an Enriched Collection of Stochastic Process*, in: Fluctuation Phenomena, E.W. Montroll and J.L. Lebowitz, eds. (North-Holland, Amsterdam, (1979)