



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

**LA VALIDEZ DE LA ECUACIÓN DEL TELEGRAFISTA
Y
LA DIFUSIÓN MESOSCÓPICA EN 2D y 3D**

TESIS QUE PRESENTA EL

M. EN C. MIGUEL ANGEL OLIVARES ROBLES

PARA OBTENER DEL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS

DICIEMBRE, 1997.

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA

DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA.

UNIDAD IZTAPALAPA

Av. Michoacán y La Purísima, Col. Vicentina, 09340 México, D.F. Tel.: 724-4600 TELEFAX: (5) 612 0885

AGRADECIMIENTOS

“ AL QUE HIZO LOS CIELOS CON ENTENDIMIENTO
PORQUE PARA SIEMPRE
ES SU MISERICORDIA.”

A MI ESPOSA Y AMIGA:

IRMA DELIA

Por su amor, apoyo y comprensión.

A MIS PADRES:
ANTONIO Y MA. LUISA
Quienes siempre me han
enseñado y apoyado.

A MIS AMADOS AMIGOS:
ING. MOISES CABALLERO
M. EN F. EDGAR MENDEZ LANGO
Por sus valiosos consejos.

A MI ASESOR:
DR. LEOPOLDO GARCÍA-COLÍN
Quien me inicio en el
camino de la investigación.

A MI CO-ASESOR:
DR. SALVADOR GODOY
Por su disposición para
enseñarme física.

**A TODOS AQUELLOS QUE CON
SU APOYO MOTIVARON
MI FORMACIÓN ACADÉMICA**

ÍNDICE

TÍTULO	i
AGRADECIMIENTOS	ii
ÍNDICE	v
CAPÍTULO 1. ANTECEDENTES	1
1.1 La ecuación de difusión.....	1
1.2 Deduciones macroscópicas de la ecuación del telegrafista.....	3
REFERENCIAS	11
CAPÍTULO 2. DIFERENTES DEDUCCIONES DE LAS ECUACIONES CINÉTICAS TIPO TELEGRAFISTAS.	12
2.1 Introducción	12
2.2 Deduciones de ecuaciones cinéticas tipo telegrafistas	14
2.3 Ecuaciones tipo telegrafista y movimiento Browniano	28
2.4 Conclusiones	34
REFERENCIAS	37
ANEXO DEL CAPÍTULO 2 SOBRE LAS DEDUCCIONES MESOSCÓPICAS DE LA ECUACIÓN DEL TELEGRAFISTA.	40
A2.1 Discusión.....	40
A2.2 Markovianidad	40
A2.3 Ecuaciones maestras generalizadas	43
REFERENCIAS	47

CAPÍTULO 3. LA INVALIDEZ DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN DEL TELEGRAFISTA EN 2D Y 3D PARA SÓLIDOS CRISTALINOS. 48

3.1 Introducción 48

3.1.1 Caminante al azar ordinario 49

3.1.2 Caminante al azar persistente. El modelo de Goldstein 50

3.2 El modelo clásico de la caminata al azar persistente 53

3.3 Difusión en una red en 2D 55

3.4 El límite de dispersión débil en 2D 56

3.5 La ecuación de Maxwell-Cattaneo anómala 58

3.6 Los resultados del límite de dispersión débil en 3D 60

REFERENCIAS 61

CAPÍTULO 4. CORRIENTES TRANSVERSALES EN SÓLIDOS CRISTALINOS MESOSCÓPICOS. 63

4.1 Introducción 63

4.2 El modelo de caminata al azar cuántica 2D 65

4.3 La densidad de probabilidad cuántica en 2D 67

4.4 Las corrientes difusivas cuánticas en 2D 68

4.5 Los coeficientes de difusión de Landauer en 2D 69

4.6 Las corrientes transversales de conducción 72

REFERENCIAS 73

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS. 75

CAPÍTULO 1

ANTECEDENTES

El fenómeno de Difusión ha sido modelado por movimiento Browniano y por la ecuación de difusión, que es una ecuación diferencial parabólica. Sin embargo, varios autores han propuesto estudiar la difusión mediante ecuaciones cinéticas hiperbólicas, debido a que argumentan que la descripción que proporciona la ecuación parabólica para este fenómeno permite una “velocidad de propagación infinita”. La denominada ecuación del telegrafista es una ecuación diferencial hiperbólica. Ésta, es una de las ecuaciones más simples que sean propuesto, con una velocidad de propagación acotada, para el estudio de la difusión. En este primer capítulo resumimos algunas deducciones macroscópicas de las ecuaciones de transporte hiperbólicas. Cada una de ellas ilustra un aspecto o aplicación diferente de dichas ecuaciones. Por otro lado, también discutimos algunas cuestiones relacionadas con la llamada ecuación del telegrafista.

1.1 LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN

En primer lugar, y sólo por completez, repasaremos muy brevemente algunas características de la ecuación de difusión, que es de tipo parabólico.

Una deducción común de la ecuación de difusión está basada en la ecuación fenomenológica conocida como ecuación de Fick, que relaciona el flujo de materia a través de una superficie, con un gradiente de concentración a través de esa superficie. *En una dimensión*, si $c(x, t)$ es la concentración de alguna sustancia en un punto x al tiempo t y $J(x, t)$ es el flujo correspondiente a través de aquél punto, la ecuación de Fick se expresa como,

$$J(x, t) = -D \frac{\partial c}{\partial x}. \quad (1.1.1)$$

En el espacio homogéneo, D se considera como constante y es conocida como constante de difusión. La combinación de la ecuación de Fick y la ley de conservación

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \quad (1.1.2)$$

es equivalente a la ecuación de difusión

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}. \quad (1.1.3)$$

La solución a esta ecuación con condiciones iniciales $c(x, t) = c_0 \delta(x - x_0)$, calculada por alguna de las numerosas técnicas disponibles, se tiene que es la Gaussiana,

$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{4Dt} \right\}. \quad (1.1.4)$$

La forma de esta solución muestra que cuando $t > 0$ la función $c(x, t)$ es positiva para cualquier valor de x . Cuando pensamos en transporte de partículas esto significa que el modelo de difusión, al menos matemáticamente, permite la posibilidad de que las partículas viajen a velocidades arbitrariamente grandes. Más adelante, mencionaremos por qué es incorrecto aplicar la solución (1.1.4) para describir el fenómeno de difusión a cualquier tiempo $t > 0$.

Quizá la generalización más simple a la ecuación de difusión que aún retiene propiedades difusivas importantes pero que está caracterizada por una velocidad de propagación acotada, es la llamada ecuación del telegrafista. Esta ecuación fue primeramente considerada por Lord Kelvin como parte de un análisis de la distorsión y disipación de ondas electromagnéticas en una línea telegráfica. El análisis de Kelvin fue motivado por problemas que surgieron en el diseño del primer cable transatlántico. En una dimensión, la ecuación del telegrafista es

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial c}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (1.1.5)$$

donde v y τ son constantes positivas teniendo las dimensiones de velocidad y tiempo, respectivamente. Esta ecuación tiene propiedades que son parcialmente ondulatorias y parcialmente difusivas. La ecuación de onda corresponde al límite $\tau \rightarrow \infty$, v finita, y la ecuación de difusión a los límites $\tau \rightarrow 0$, $v \rightarrow \infty$, sujeta a la condición auxiliar $v^2 \tau \rightarrow D$; D tiene las dimensiones de una constante de difusión ($cm^2 s^{-1}$).

1.2 DEDUCCIONES MACROSCÓPICAS DE LA ECUACIÓN DEL TELEGRAFISTA

La ecuación del telegrafista puede ser deducida de varias maneras. En esta sección describiremos brevemente cuatro deducciones a nivel macroscópico de la ecuación del telegrafista y su solución en el espacio libre. Cada una de ellas ilustra diferentes aspectos o aplicaciones de la ecuación. Para mayor detalle referimos al lector al trabajo de Masoliver y Weiss [1].

La primera deducción de la ecuación del telegrafista, siguiendo a Lord Kelvin, está basada en un estudio de la transmisión de ondas electromagnéticas en cables. Supongamos que un par de líneas de transmisión tienen un voltaje $V(x, t)$ aplicado, y una corriente $\pm I(x, t)$ fluyendo a través de ellos. La combinación de la ley de Ohm y las leyes de Kirchhoff conducen a la ecuación,

$$L \frac{\partial I}{\partial t} + RI + \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \quad (1.2.1)$$

mientras que la conservación de la carga implica la ecuación,

$$C \frac{\partial V}{\partial t} + GV + \frac{\partial I}{\partial x} = 0 \quad (1.2.2)$$

donde L es la inductancia, R la resistencia, C la capacitancia y G la conductancia de salida por unidad de longitud.

Las ecs. (1.2.1) y (1.2.2) pueden ser combinadas en una sola ecuación para I o para V , que tiene la forma

$$LC \frac{\partial^2 I}{\partial t^2} + (RC + LG) \frac{\partial I}{\partial t} + RGI = \frac{\partial^2 I}{\partial x^2} \quad (1.2.3)$$

que es la ecuación del telegrafista en la forma dada por Heaviside [2]. Esta última ecuación tiene una forma ligeramente distinta de la ecuación (1.1.5) pero puede ser transformada en una forma similar a ella mediante el cambio de variable $I = a \exp^{-\rho t}$ donde $a = a(x, t)$ y ρ puede ser igual a R/L , o bien igual a G/C , para eliminar el término RGI del lado izquierdo de la ecuación (1.2.3). En uno u otro caso el parámetro τ , de la ecuación (1.1.5), se identifica con la cantidad $|G/C - R/L|^{-1}$. Después de la transformación de la ecuación (1.2.3), la velocidad que aparece en la ec.(1.1.5) es $v = (LC)^{-1/2}$. Así, transformamos (1.2.3) en la ecuación,

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial a}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}.$$

La pregunta original planteada por Kelvin fue cómo elegir el parámetro de la impedancia para asegurar que una señal eléctrica se transmitiera sin distorsión. El análisis de este problema está basado en una nueva transformación de la ec.(1.2.3). Para este propósito definimos una nueva *variable* dependiente por

$$J = I \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{R}{L} + \frac{G}{C} \right) t \right]. \quad (1.2.4)$$

Esta función satisface

$$\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} - \mu^2 J = v^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} \quad (1.2.5)$$

donde el parámetro μ esta dado por

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{R}{L} - \frac{G}{C} \right). \quad (1.2.6)$$

Cuando las impedancias son muy “picudas” tales que $\mu = 0$, la ec.(1.2.5) se reduce a la ecuación de onda,

$$\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2}$$

caso en el que la corriente I se propaga como una onda amortiguada pero sin distorsionarse. Así, la solución general para la corriente $I(x, t)$ es

$$I(x, t) = \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{R}{L} + \frac{G}{C} \right) t \right] [\phi(x + vt) + \psi(x - vt)] \quad (1.2.7)$$

donde las funciones $\phi(u)$ y $\psi(u)$ están dadas por las condiciones iniciales de la corriente. Este resultado es importante para la telegrafía debido a que muestra que cuando la impedancia es tal que se satisface $RC = LG$ de tal manera que $\mu = 0$, en la ecuación (1.2.5), la onda viajera mantiene su forma inicial, excepto por el hecho de que es amortiguada exponencialmente en el tiempo. La dificultad práctica que representa el factor de amortiguamiento en la ec.(1.2.7) puede ser superada por el uso de amplificadores distribuidos a lo largo del cable. En el caso de cables submarinos largos la inductancia no tiene efectos sensibles, por lo que condujeron a Kelvin a deducir la ec. (1.2.3) con $L = 0$,

$$RC \frac{\partial I}{\partial t} + RGI = \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}$$

la cual, nuevamente mediante el cambio de variable $I = a \exp^{-\rho t}$, donde $a = a(x, t)$ y $\rho = G/C$, se transforma en

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}$$

donde $D = 1/RC$. Esta última ecuación es justo la ecuación de Difusión para $a(x, t)$. Sin embargo, hay deducciones alternativas que conducen a una ecuación del telegrafista. Como un ejemplo, un enfoque puramente fenomenológico sobre el cual uno puede sustentar una deducción, es la generalización no local en el tiempo de la ley de Fick, (escrita en una dimensión para $p(x, t)$),

$$J(x, t) = -v^2 \int_0^t \exp\left(-\frac{t-t'}{\tau}\right) \frac{\partial p(x, t')}{\partial x} dt'. \quad (1.2.8)$$

donde $p(x, t)$ es la densidad de probabilidad para la posición de una partícula al tiempo t . Derivando (1.2.8) parcialmente con respecto a t obtenemos,

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -v^2 \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{J}{\tau}. \quad (1.2.9)$$

o bien,

$$J = -v^2 \tau \frac{\partial p}{\partial x} - \tau \frac{\partial J}{\partial t}.$$

La combinación de esta ecuación con la ley de conservación (1.1.2) escrita en términos de $p(x, t)$,

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

inmediatamente conduce a una ecuación del telegrafista para $p(x, t)$,

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial p}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (1.2.10)$$

Si definimos

$$D \equiv v^2 \tau \quad (1.2.11)$$

la ecuación (1.2.10) se puede escribir en manera ligeramente distinta, a saber,

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (1.2.12)$$

Esta ecuación será objeto de estudio en los siguientes capítulos. De hecho, se discutirá la validez de esta ecuación en dos (y tres) dimensiones. Este estudio estará enmarcado dentro del proceso de difusión en sólidos cristalinos.

Nuestra tercer deducción de la ecuación del telegrafista no involucra hipótesis de naturaleza fenomenológica y es consecuencia directa de combinar las ecuaciones de Maxwell para un medio homogéneo:

$$\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}, \quad \sigma \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{H}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon}, \quad \nabla \cdot \mathbf{H} = 0$$

donde \mathbf{E} y \mathbf{H} son los campos eléctrico y magnético, respectivamente; μ es la constante de permeabilidad, ϵ la constante de permitividad, σ densidad superficial de carga y ρ la densidad volumétrica de carga. Estas ecuaciones dan lugar a la ecuación del telegrafista tridimensional para el campo \mathbf{E} :

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{\sigma}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{1}{\mu\epsilon} \nabla^2 \mathbf{E}.$$

o bien en una dimensión tenemos,

$$\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2}.$$

donde $v = 1/\sqrt{\mu\epsilon}$ y $D^{-1} = \mu\sigma$.

Se han propuesto otras deducciones de la ecuación del telegrafista. En un análisis de la transmisión de luz en un medio dispersor múltiple, Ishimaru ha deducido la ecuación del telegrafista como una aproximación a una ecuación de transporte más complicada [3]. En el capítulo 4, discutimos algunos aspectos relacionados con esta última referencia. Para finalizar este párrafo, mencionemos algunas características de la solución de la ecuación del telegrafista en el espacio libre. Una solución de la ecuación (1.2.10) puede obtenerse por medio de una transformada de Laplace-Fourier ($\mathcal{L} - \mathcal{F}$). Antes de dar los detalles de la solución para $p(x, t)$, es necesario especificar las condiciones iniciales. Una observación importante es que la ecuación

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial p}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (1.2.10)$$

es de segundo orden en el tiempo, lo que requiere de dos condiciones iniciales para deducir una solución única. Ya que la ecuación del telegrafista es lineal, la solución correspondiente a la condición inicial más general $p(x, t) = p_0(x)$, se encuentra en términos de la solución con $p(x, 0)$ teniendo la forma de un pulso en un punto arbitrario x_0 :

$$p(x, 0) = \delta(x - x_0). \quad (1.2.13a)$$

La solución para $p(x, t)$ sujeta a esta condición inicial específica será denotada por $p(x, t|x_0)$. La solución más general de la ecuación del telegrafista se encuentra por integración sobre todos los valores de x_0 :

$$p(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, t|x_0)p(x_0)dx_0. \quad (1.2.13b)$$

Debido a la segunda derivada temporal que aparece en la ecuación del telegrafista debe imponerse una segunda condición inicial

$$\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{t=0} = 0. \quad (1.2.13c)$$

Obtenemos la solución de la ecuación del telegrafista en el dominio de la transformada de Laplace-Fourier. Con este propósito definimos la transformada de Laplace-Fourier

$$\hat{p}(w, s|x_0) = \int_0^{\infty} \exp^{-st} dt \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t|x_0) \exp^{iwx} dx. \quad (1.2.14)$$

La transformada de Fourier de la ecuación del telegrafista es la relación,

$$\frac{\partial^2 \tilde{p}(w, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial \tilde{p}(w, t)}{\partial t} = -v^2 w^2 \tilde{p}(w, t)$$

Así, La transformada de Laplace-Fourier de la ecuación del telegrafista es equivalente a la relación algebraica

$$s^2 \hat{p}(w, s) - s e^{iwx_0} + \frac{1}{\tau} [s \hat{p}(w, s) - e^{iwx_0}] = -v^2 w^2 \hat{p}(w, s) \quad (1.2.14b)$$

donde hemos hecho uso de la condición (1.2.13a) y (1.2.13c). La solución de (1.2.14b) es inmediata

$$\hat{p}(w, s|x_0) = \frac{s + 1/\tau}{s(s + 1/\tau) + v^2 w^2} \exp^{iwx_0}. \quad (1.2.15)$$

La inversa de esta relación se encuentra invirtiendo primero la transformada de Fourier, que conduce a

$$\bar{p}(x, s|x_0) = \frac{1}{2v} \left[\frac{s + 1/\tau}{(s^2 + s/\tau)^{1/2}} \right] \exp \left\{ -\frac{|x - x_0|}{v} \sqrt{s^2 + s/\tau} \right\}. \quad (1.2.16)$$

La transformada de Laplace a su vez puede ser invertida para obtener

$$p(x, t|x_0) = \frac{1}{2} \exp^{-t/(2\tau)} \{ \delta(x - x_0 - vt) + \delta(x - x_0 + vt) \} \\ + \frac{\exp^{-t/(2\tau)}}{4v\tau} \left[I_0(\xi) + \frac{tI_1(\xi)}{2\tau\xi} \right] H(vt - |x - x_0|). \quad (1.2.17)$$

Aquí $I_0(\xi)$ y $I_1(\xi)$ son las funciones Bessel, $H(x)$ es la función de Heaviside definida por $H(x) = 0, x < 0$ y $H(x) = 1, x > 0$ y ξ es una combinación de parámetros definida por

$$\xi = \frac{\sqrt{v^2 t^2 - (x - x_0)^2}}{2v\tau} \quad (1.2.18)$$

Las características de la solución resultante son evidentes de la ecuación (1.2.17). Primero, hay dos funciones deltas multiplicadas por un factor que decae exponencialmente en el tiempo. Esto corresponde a aquellas partículas que no cambian su dirección de movimiento. Las funciones delta indican que estas partículas deben estar localizadas en $x_0 \pm vt$. Debido a la exponencial fuera de los corchetes en la ecuación (1.2.17), los efectos de la función delta llegan a ser menos significativos con el incremento del tiempo. La segunda característica de la solución es la presencia de la función de Heaviside que excluye la difusión fuera del intervalo definido por $|x - x_0| = vt$. Esto es una manifestación de la propiedad de una velocidad finita de la señal de propagación ya que $p(x, t|x_0) \equiv 0$ fuera del intervalo indicado. Podemos determinar un límite a partir de la expresión de la ecuación (1.2.15). Observemos que el límite a tiempos grandes puede obtenerse del comportamiento analítico de la transformada en el límite de s pequeñas. En este límite encontramos

$$\hat{p}(w, s|x_0) \approx \frac{\exp^{iwx_0}}{s + v^2\tau w^2}, \quad (1.2.19)$$

cuya inversa fácilmente se muestra que es una gaussiana de la forma (1.1.4) con $D = v^2\tau$. Por supuesto, la aproximación a $p(x, t|x_0)$ dada por la inversa de $\hat{p}(w, s|x_0)$ como en la ecuación (1.2.19), una función gaussiana, será una aproximación pobre al comportamiento exacto cuando x esté cercana a los extremos en $x_0 \pm vt$.

Otra demostración del movimiento combinado, ondulatorio y difusivo, es evidente a partir del comportamiento del segundo momento espacial, que es solución de la ecuación del telegrafista. Primero, es fácil demostrar que el primer momento,

$$\mu_1(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} xp(x, t)dx$$

es una constante $\mu_1(t) = \mu_1(0) = x_0$. Esto se obtiene multiplicando ambos lados de la ecuación del telegrafista por x e integrando con respecto a x (suponemos que p se anula en los límites). Esto conduce a una ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d^2\mu_1}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\mu_1}{dt} = 0. \quad (1.2.20)$$

la cual se resuelve sujeta a las condiciones iniciales $\mu_1(0) = x_0$ y $d\mu_1/dt|_{t=0} = 0$. Uno ve inmediatamente que la solución apropiada es una constante, $\mu_1(t) = x_0$. En forma similar, encontramos que el segundo momento

$$\mu_2(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x, t) dx$$

es la solución a la ecuación

$$\frac{d^2 \mu_2}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\mu_2}{dt} = 2v^2. \quad (1.2.21)$$

sujeta a las condiciones iniciales $\mu_2(0) = x_0^2$ y $d\mu_2/dt|_{t=0} = 0$. Otra vez esta ecuación diferencial simple es fácil de resolver. Por ejemplo, usando el método de variación de parámetros se tiene que la solución homogénea de (1.2.21) es

$$\mu_2^h(t) = c_1 + c_2 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

si en esta última ecuación hacemos $c_1 = c_1(t)$ y $c_2 = c_2(t)$ y derivamos dos veces, sustituyendo los resultados en (1.2.21) se llega al resultado,

$$\mu_2(t) = 2v^2 \tau t - 2v^2 \tau^2 + K_1 + K_2 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

Para determinar K_1 y K_2 , usamos las condiciones iniciales mencionadas más arriba. Así, llegamos a la solución

$$\mu_2(t) = x_0^2 + 2v^2 \tau [t - \tau(1 - \exp^{-t/\tau})]. \quad (1.2.22)$$

Cuando $t \ll \tau$, tenemos que

$$\mu_2(t) \approx x_0^2 + v^2 t^2 \quad (1.2.23)$$

consistente con una propagación ondulatoria a velocidad uniforme. Esto es fácil de demostrar ya que en el límite $t \ll \tau$ se tiene, a partir de la ecuación del telegrafista (1.2.10),

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}.$$

Multiplicando esta ecuación por x^2 e integrando sobre todas las x , tenemos para el segundo momento $\mu_2(t)$ que

$$\frac{d^2 \mu_2(t)}{dt^2} = 2v^2$$

cuya solución está dada por (1.2.23). En el límite opuesto, $t \gg \tau$,

$$\mu_2(t) \approx 2v^2\tau t \tag{1.2.24}$$

la cual es el resultado obtenido de un proceso de difusión. Esto es así ya que en el límite $t \gg \tau$, (1.2.10) se aproxima por la ecuación,

$$\frac{\partial p}{\partial t} = v^2\tau \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$

A partir de esta ecuación obtenemos para el segundo momento,

$$\frac{d^2\mu_2(t)}{dt^2} = 2v^2\tau$$

ecuación que satisface (1.2.24).

Finalmente, es preciso señalar que a pesar de un gran número de aplicaciones físicas esbozadas en los artículos de Joseph y Preziosi [4], lo que no existe en la literatura es una deducción de primeros principios de las ecuaciones de transporte hiperbólicas. En el siguiente capítulo trataremos de resumir los esfuerzos realizados, hasta hoy en día, para deducir las ecuaciones de transporte hiperbólicas en el marco de la mecánica estadística fuera de equilibrio.

REFERENCIAS.

- [1] J. Masoliver, G.H. Weiss, *Eur. J. Phys.* **17**,190-196, (1996).
- [2] O. Heaviside *Electrical Papers of Oliver Heaviside*, Vol. 1 (New York 1970; Chelsea) pp.53-61.
- [3] I. Ishimaru, *Journal of the Optical Society of America* **68**, 1045-1050, (1989); *Appl. Opt.***28**, 2210-2215, (1989).
- [4] D.D. Joseph y L. Preziosi, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 41 (1989); **62**, 375, (1990).

CAPÍTULO 2

DIFERENTES DEDUCCIONES DE LAS ECUACIONES CINÉTICAS TIPO TELEGRAFISTAS

En este capítulo, en primer lugar revisamos varios métodos que han sido usados por diferentes autores para deducir ecuaciones de transporte de tipo hiperbólico. Además se revisa el método recientemente propuesto para obtener tales ecuaciones en el marco de la teoría del movimiento Browniano. Se incluyen algunas observaciones críticas acerca de los resultados y de metodología seguida en estas deducciones.

2.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior hemos descrito algunas deducciones macroscópicas de la ecuación del telegrafista, así como su solución en el espacio libre. Nuestro interés en este capítulo es revisar de manera crítica las distintas deducciones que existen en la literatura sobre ecuaciones de transporte hiperbólicas.

Nuestra motivación para hacer esta revisión se debe a que en años recientes ha surgido un fuerte interés para tratar con procesos fuera de equilibrio usando ecuaciones diferenciales de tipo hiperbólico. Algunas veces a estas ecuaciones también se les llama ecuaciones cinéticas del tipo telegrafista [1-3]. Es bien conocido que el modelo matemático a partir del cual puede ser obtenida la ecuación del telegrafista es el modelo de caminata al azar persistente (abreviado en inglés como PRW). Modelo que más adelante discutiremos.

Fue S. Goldstein [4] quién primero dedujo una ecuación del telegrafista unidimensional con argumentos probabilísticos, en su estudio sobre la difusión por movimiento discontinuos. Más adelante discutiremos la deducción de Goldstein en notación moderna. El resultado de Goldstein tiene el mérito de obtener la ecuación que gobierna el flujo de electricidad en cables, partiendo directamente del comportamiento estocástico de las cargas en conductores lineales [5]. En dos dimensiones el problema fue discutido por Orsingher

[5,6] y numerosas extensiones y aplicaciones han sido estudiadas por Weiss y colaboradores [7–10]. También las soluciones a la ecuación del telegrafista bajo diferentes condiciones a la frontera han sido estudiadas [11]. Este tipo de ecuación se ha sugerido como un modelo para la difusión de luz en medios turbios debido a que esta puede describir los efectos de la dispersión hacia adelante [12,13]. El uso de una formulación matemática similar en el problema de dispersión y absorción de la radiación laser por la piel humana sugiere que es de interés estudiar las propiedades de la ecuación del telegrafista más que la ecuación de difusión [3,14]. En el excelente artículo de Durian y Rudnick [14] sobre la migración del fotón en medios turbios, ellos obtienen una ecuación del telegrafista que toma en cuenta los aspectos difusivo y balístico de propagación en medios tridimensionales.

Sin embargo, en otro contexto, esta ecuación ha sido usada en el estudio de diferentes problemas en teoría de transporte. Desde el punto de vista fenomenológico la ecuación de transporte tipo telegrafista se obtiene fácilmente cuando una ecuación de conservación ordinaria, de masa, momento, energía, etc. se combina con una ecuación constitutiva tipo Maxwell–Cattaneo–Vernotte (MCV) [15,16]. Hay una cantidad considerable de literatura sobre procesos físicos, particularmente en el campo de la termo-física, que conducen a una formulación matemática de dichos procesos en términos de una ecuación del telegrafista [17–19]. Diferentes deducciones fenomenológicas se han propuesto para este tipo de ecuaciones [20] como ya hemos hecho notar en el capítulo anterior. Por otro lado, como ya ha sido mencionado [1], en la literatura no existe una deducción de primeros principios de las ecuaciones de transporte del tipo hiperbólico. Junto con esta deducción, yace también la cuestión relacionada al tipo de termodinámica irreversible a la que estas ecuaciones pertenecen, teoría que claramente va más allá del dominio de la termodinámica irreversible lineal (TIL). La referencia [1] representa uno de los primeros esfuerzos en esta dirección, a saber, deducir una ecuación tipo telegrafista a partir de los principios básicos de la mecánica estadística fuera de equilibrio. No obstante la sistemática de esta deducción ha sido fuertemente cuestionada. Tales objeciones han sido publicadas, junto con un análisis profundo del problema en un artículo reciente [21]. De hecho más adelante mostramos que el método propuesto en [1] *es incorrecto*. Debido al estatus del problema, creemos necesario primero revisar de manera crítica, algunos esfuerzos previos que se han hecho para deducir ecuaciones de transporte hiperbólicas. Segundo, deseamos mostrar algunas inconsistencias en la metodología utilizada. En este análisis se incluye mi reciente reporte. En este reporte, usando el método propuesto por Chandrasekhar [22], se intenta

deducir ecuaciones tipo telegrafista en el contexto de la teoría del movimiento Browniano (ver sección 2.3). Esta característica parece haber sido pasada por alto en el estudio de fenómenos de transporte.

El capítulo esta dividido como sigue: En la sección 2.2 resumiré los métodos seguidos por algunos autores que deducen ecuaciones cinéticas tipo telegrafistas. En esta sección aclararé con cierto detalle *la inconsistencia fundamental* presente en el trabajo de Weymann [23]. En la sección 2.3 resumiré mi trabajo recientemente publicado (ver ref.[40]). En la sección 2.4 mostraré que el método es *incorrecto*. Debido a que propongo seguir el método de Chandrasekhar [22] para deducir, a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov, una ecuación de transporte hiperbólica para el movimiento Browniano unidimensional. Finalmente en la sección 2.5 daremos algunas conclusiones.

2.2 DEDUCCIONES DE ECUACIONES CINÉTICAS TIPO TELEGRAFISTAS.

Revisaremos la deducción de la ecuación del telegrafista en el formalismo de la caminata al azar. Como punto de inicio resumimos el tratamiento de Weymann [23], en el que aborda un problema similar al que abordó Goldstein [4]. Weymann deduce una ecuación del telegrafista como un límite continuo a partir del problema de caminata al azar cuando el número de pasos se incrementa sin término.

Considere un punto moviéndose a lo largo del eje x en pasos discretos de $\pm h$. Cada paso toma un tiempo τ . Al final de cada paso, uno nuevo empieza inmediatamente. La probabilidad de que el nuevo paso sea tomado en la dirección positiva de las x es p mientras que para la dirección negativa es q . Por razones obvias uno tiene que

$$p + q = 1. \quad (2.2.1)$$

La probabilidad de que el punto esté en $x = kh$ después de n pasos es denotada por $u_{n,k}$. Las probabilidades para n y $n + 1$ están relacionadas por la fórmula de recurrencia

$$u_{n+1,k} = p u_{n,k-1} + q u_{n,k+1}. \quad (2.2.2)$$

(Para alcanzar $x = kh$ en el $(n+1)$ -ésimo paso, el punto debió haber estado en $x = (k-1)h$ o bien en $x = (k+1)h$ después del n -ésimo paso.) Si el punto está inicialmente en $x = 0$, la ecuación (2.2.2) debe ser complementada por

$$u_{0,0} = 1 \quad (2.2.3)$$

y

$$u_{i,j} = 0 \quad \text{for } j > i \quad (2.2.4)$$

donde la última ecuación expresa que necesariamente $|k| \leq n$. Para n suficientemente grande, la función discreta $u_{n,k}$ puede ser reemplazada por una función continua $u(t, x)$ tal que

$$u_{n,k} = h u(n\tau, kh). \quad (2.2.5)$$

Substituyendo la ec.(2.2.5) en la ec.(2.2.2) obtenemos,

$$u(t + \tau, x) = pu(t, x - h) + qu(t, x + h). \quad (2.2.6)$$

Desarrollando u alrededor de (t, x) se obtiene que

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{2}{\tau} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{2h}{\tau^2} (q - p) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{\tau^2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.2.7)$$

Sin el término $\partial^2 u / \partial t^2$, esta ecuación es llamada la ecuación de Fokker-Planck [24]. Nótese que la razón h/τ es la velocidad promedio c del punto, no la velocidad del sonido. Si además se hace que,

$$\frac{1}{2} ch = \frac{h^2}{2\tau} = D.$$

La ecuación (2.2.7) puede escribirse como

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{c^2}{D} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{c^3}{D} (q - p) \frac{\partial u}{\partial x} + c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.2.8)$$

Más adelante mostraremos que *este método es incorrecto* para obtener la ecuación del telegrafista.

Al llegar a la ecuación (2.2.8) Weymann, después de establecer la similaridad entre su caminata al azar y el fenómeno de difusión, menciona que el movimiento del caminante al azar puede ser comparado a la difusión de partículas en una red fija (para una discusión más extensa ver, por ejemplo, la ref.[22]). Para átomos formados por esferas duras, la dispersión es isotrópica. Esto es aproximadamente válido para átomos reales a velocidades térmicas. En términos de la caminata al azar, esto significa que $p = q$. Con esto en mente se obtienen dos resultados: 1) Uno puede llevar la ec.(2.2.8) a la forma de la ecuación de difusión haciendo

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \ll \frac{c^2}{D} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{2}{\tau} \frac{\partial u}{\partial t},$$

2) Cuando $\partial^2 u / \partial t^2$ es pequeña –pero no despreciablemente pequeña– comparada con $(2/\tau)(\partial u / \partial t)$, se obtiene finalmente que,

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{c^2}{D} \frac{\partial u}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.2.9)$$

ecuación que Morse y Feshbach postulan [25] con una interpretación incorrecta de c . Así una de las conclusiones de Weymann es que la ec.(2.2.9) “describe el proceso de conducción del calor, difusión, etc. más exactamente que una ecuación del tipo difusivo”. Físicamente esto significa que las condiciones bajo las cuáles es posible obtener ecuaciones tipo difusivas (parabólicas) son aparentemente restrictivas.

Antes de continuar, haremos un análisis crítico sobre el método de Weymann. Éste no posee un criterio para cortar el desarrollo en serie de potencias en τ , para la probabilidad $u(x, t + \tau)$. De hecho, podemos incluir términos τ^n con $n > 2$. No hay nada que nos lo impida. Sin embargo, esto se debe a la siguiente inconsistencia del método. La ecuación (2.2.6) relaciona tres puntos del espacio de configuración $x - h$, x y $x + h$. La misma ecuación relaciona *dos tiempos*, t y $t + \tau$. Esto indica que la posición de la partícula a un tiempo posterior $t + \tau$ se determina *únicamente* por lo que ocurre en el instante t . El presente de la partícula determina el futuro de la misma, es decir, no hay memoria de lo que ocurrió en el proceso a tiempos anteriores a t . Esto es exactamente lo que ocurre en un proceso Markov. La definición precisa de un proceso Markoviano se proporcionará más adelante en la sección 2.3. Por otro lado, la ecuación (2.2.8) es una ecuación no-markoviana, es decir, representa un proceso con memoria. Esto se debe a que contiene una segunda derivada temporal de $u(x, t)$, la cual, por definición, relaciona tres instantes de tiempo del proceso. De hecho, para una función arbitraria $f(t)$ se tiene que,

$$f''(t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{f(t + 2\tau) - 2f(t + \tau) + f(t)}{(\tau)^2}$$

donde claramente aparecen tres valores de la variable: t , $t + \tau$ y $t + 2\tau$. Concluyendo, se tiene que a partir de una ecuación *markoviana*, ec.(2.2.6), que relaciona únicamente dos instantes de tiempo t y $t + \tau$ se obtiene una ecuación *no-markoviana*, la cual incorpora tres instantes de tiempo, es decir, contiene memoria. Por lo tanto, el método es inconsistente. Regresaremos a este aspecto en la sección 2.3; Por el momento continuemos con nuestra revisión.

El marco teórico en el que las primeras ecuaciones diferenciales del tipo hiperbólico de transporte fueron obtenidas es el siguiente. Por 1917, la teoría de movimiento Browniano

iniciada por Einstein [26], Smoluchowski y Langevin, había sido generalizada por dos caminos significativos (para una discusión de estos trabajos ver la ref.[27]). Fokker y más específicamente Planck consideraron al movimiento en el espacio de velocidades (vease por ejemplo ref.[28]), mientras que Smoluchowski (ver pags.7-8, en la ref.[28]) extendió la descripción en el espacio de configuración para tomar en cuenta la influencia de un campo externo sobre el movimiento browniano. Ambas generalizaciones consistieron en encontrar una ecuación diferencial cuya solución fuese la función de distribución para el proceso considerado. Para completar este cuadro, queda la tarea de encontrar la ecuación diferencial apropiada en el espacio fase completo de la partícula Browniana.

A Kramers [29] a menudo se le acredita como el primero en presentar esta generalización. Realmente esto había sido realizado mucho antes por Klein [27]. La ecuación diferencial obtenida en el espacio fase de esta generalización comúnmente es llamada la ecuación de Fokker-Planck o la ecuación de Kramers. No mucho tiempo después de Kramers, Chandrasekhar [22] presentó una deducción algo distinta de la ecuación de transporte de una partícula en el espacio fase, pero aún siguiendo el argumento de Kramers [29] para extraer la ecuación de Smoluchowski [22, sec.4(ii) y sec.4(vi)]. La relación entre los dos niveles de descripción, continúa siendo un tema de investigación. Un artículo que discute con cierto detalle este tema es el trabajo de Wilemski [30].

Por otro lado, la ecuación de Smoluchowski convencionalmente se describe como el límite a tiempos grandes del promedio en velocidades de la ecuación de Fokker-Planck. No obstante, en 1954 se le acreditó a Mark Kac [31, p.1169] haber subrayado que una demostración satisfactoria de esta deducción aún no ha sido presentada.

En este contexto fue publicada una de las primeras deducciones de una ecuación tipo telegrafista. Esta apareció como la conexión entre la ecuación de Smoluchowski y la ecuación de Kramers-Chandrasekhar [22,29] mejor conocida como la ecuación de Fokker-Planck. Como veremos más adelante, parece que esta conexión aún no ha sido completamente clarificada.

La deducción de Davies [31] parte de la ecuación de Fokker-Planck en el espacio fase

$$\frac{\partial W}{\partial t} + v \frac{\partial W}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial v} [(\beta v - K(x))W] + \frac{kT\beta}{m} \frac{\partial^2 W}{\partial v^2} \quad (2.2.10)$$

donde $W(x, v; t)$ representa la densidad de probabilidad para una partícula Browniana en el espacio fase (x, v) . $K(x)$ es una fuerza externa, T es la temperatura, β es la constante de fricción, m es la masa, y k es la constante de Boltzmann. Davies subraya el hecho de que

si se supone que el movimiento Browniano es un proceso de Markov simple en el espacio de configuración x , entonces la densidad probabilidad

$$\rho(x, t) = \int W(x, v, t) dv \quad (2.2.11)$$

satisface la ecuación

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K(x)\rho}{\beta} \right) = \frac{kT}{m\beta} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (2.2.12)$$

la cual es conocida como la ecuación de Smoluchowski. Se ha argumentado que la descripción dada por (2.2.12) se aproxima a aquélla que está dada por (2.2.10) para $t \gg \beta^{-1}$.

Para obtener una ecuación del telegrafista, Davies realiza dos pasos: 1) Integra la ecuación (2.2.10) sobre todo el espacio de velocidades para obtener que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \langle v \rangle) = 0 \quad (2.2.13a)$$

donde

$$\rho \langle v \rangle = \int v W(x, v, t) dv. \quad (2.2.13b)$$

La ecuación (2.2.13a) claramente es la ecuación de continuidad.

2) Multiplicando por v e integrando sobre el espacio de velocidades obtenemos.

$$\frac{\partial \rho \langle v \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho \langle v^2 \rangle + \beta \rho \langle v \rangle = K(x)\rho \quad (2.2.14)$$

donde

$$\rho \langle v^2 \rangle = \int v^2 W dv.$$

La ecuación (2.2.14) es la ecuación de balance del momento lineal.

Para eliminar $\rho \langle v \rangle$ de la ec.(2.2.14) por medio de la ec.(2.2.13a), derivemos ambas ecuaciones con respecto a t y con respecto a x , respectivamente. Así obtenemos las ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} (\rho(x, t)) + \frac{\partial^2}{\partial t \partial x} (\rho(x, t) \langle v \rangle) &= 0 \\ \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} (\rho \langle v \rangle) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\rho \langle v^2 \rangle) + \frac{\partial}{\partial x} (\beta \rho \langle v \rangle) &= \frac{\partial}{\partial x} (K(x)\rho) \end{aligned}$$

combinando (2.2.13a) y estas dos últimas ecuaciones, obtenemos

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K(x)}{\beta} \rho(x, t) \right) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\rho(x, t) \langle v^2 \rangle}{\beta} \right) \quad (2.2.15)$$

que es una ecuación diferencial hiperbólica para la densidad de probabilidad, dada por la ec.(2.2.11), en el espacio de configuración. Para comparar las ecs. (2.2.15) y (2.2.12) notemos lo siguiente. En el marco de la teoría del movimiento Browniano de una partícula libre, generalmente se inicia con la ecuación de Langevin

$$\frac{dv}{dt} = -\beta v + A(t) \quad (2.2.16)$$

donde v denota la velocidad de la partícula. De acuerdo a esta ecuación la influencia del medio sobre el movimiento de la partícula puede dividirse en dos partes; Primero, una parte sistemática $-\beta v$ que representa a la *fricción dinámica* experimentada por la partícula y segundo, una parte fluctuante $A(t)$ que es característica del movimiento Browniano. Para $A(t)$ hacemos las siguientes hipótesis:

a) $A(t)$ es independiente de u . b) $A(t)$ varía extremadamente rápido comparado con las variaciones de v . La segunda hipótesis implica que existen intervalos de tiempo de duración Δt tales que durante Δt las variaciones en v se esperan que sean muy pequeñas, mientras que durante el mismo intervalo $A(t)$ sufre varias fluctuaciones. Esto hace que $\langle A(t) \rangle = 0$.

Integremos (2.2.16), por el método de variación de parámetros descrito en el capítulo anterior. Si $A(t)$ se anula, la solución de la ecuación homogénea $dv/dt = -\beta v$ está dada por $v = u \exp(-\beta t)$ donde u es una constante. En el caso general, donde $A(t) \neq 0$, suponemos una solución de la misma forma con $u = u(t)$, es decir, $v = u(t) \exp(-\beta t)$. Derivando esta ecuación con respecto a t y sustituyendo en (2.2.16) e integrando de 0 a t , tenemos

$$v = v_0 e^{-\beta t} + e^{-\beta t} \int_0^t e^{\beta \xi} A(\xi) d\xi \quad (2.2.17)$$

donde $v(0) = v_0$. Ahora bien, elevando al cuadrado esta última ecuación y promediando se tiene (ver ref.[35]),

$$\langle v^2 \rangle = \frac{kT}{m} + (v_0^2 - 1) e^{-2\beta t}$$

Nótese que $\rho(\langle v^2 \rangle - kT/m)$ es del orden de $e^{-2\beta t}$. Por lo tanto, de la ecs. (2.2.15) y (2.2.12) es claro que para $t \gg \beta^{-1}$, la ecuación de Smoluchowski (2.2.12) difiere de la ec.(2.2.15) "únicamente" por el término $(1/\beta)\partial^2\rho/\partial t^2$. Una consideración más es la siguiente. Consideremos que β represente un parámetro que puede variarse y tomemos el límite de la ec.(2.2.15) conforme β se aproxima al infinito. La ecuación resultante tendrá sentido y se reducirá a la ecuación (2.2.12), si $\langle v^2 \rangle$ y $K(x)$ también se aproximan al

infinito de manera tal que

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle v^2 \rangle}{\beta} = \frac{kT}{6\pi a \eta} \quad (2.2.18a)$$

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{K(x)}{\beta} = U(x) \quad (2.2.18b)$$

donde $U(x)$ es el término de “deriva”. η es la viscosidad cortante del líquido circundante a las partículas y a es el radio de la partícula. Es importante hacer notar que (2.2.18a) resulta de aplicar el teorema de equipartición de la energía $\langle v^2 \rangle = kT/m$ (en $t \rightarrow \infty$) y de suponer que el término $-\beta u$, en la ecuación de Langevin, está gobernado por la ley de Stokes que dice que la fuerza de fricción que desacelera a una partícula esférica de radio a y masa m está dada por $6\pi a \eta u/m$ donde η denota el coeficiente de viscosidad del fluido. Así, tenemos que $\beta = 6\pi a \eta/m$.

Finalmente, Davies [31] compara la solución de las ecuaciones (2.2.12) y (2.2.15) en el siguiente caso. Considérese un sistema de partículas Brownianas en el que: a) no hay fuerza externa $K(x) = 0$, b) las partículas Brownianas están en equilibrio con el medio $\langle v^2(0) \rangle = kT/m$, c) sus velocidades iniciales están distribuídas simétricamente $\langle v(0) \rangle = 0$ y d) y todas ellas están inicialmente localizadas en el origen $\rho(x, 0) = \delta(x)$ donde $\delta(x)$ es la función de Dirac. Así para la ec.(2.2.12) el valor inicial es $\rho(x, 0) = \delta(x)$ y para la ec.(2.2.15) los valores son $\rho(x, 0) = \delta(x)$, $\partial\rho/\partial t(x, 0) = 0$. Bajo estas condiciones las ecs.(2.2.12) y (2.2.15) se reducen, respectivamente, a

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{kT}{m\beta} \frac{\partial^2\rho}{\partial x^2} \quad (2.2.12')$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2\rho(x, t)}{\partial t^2} + \frac{\partial\rho(x, t)}{\partial t} = \frac{kT}{m\beta} \frac{\partial^2\rho(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.2.15')$$

Si comparamos estas ecuaciones con (1.1.3) y (1.2.10), ya que tienen la misma estructura, e identificamos parámetros, podemos escribir directamente las soluciones de las ecuaciones (2.2.12) y (2.2.15) (consistentes con las condiciones iniciales mencionadas más arriba),

$$\rho_1(x, t) = \left(4\pi \frac{kT}{m\beta} t\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-x^2 / \left(4 \frac{kT}{m\beta} t\right)\right] \quad (2.2.19)$$

$$\begin{aligned} \rho_2(x, t) = & \frac{1}{2} \exp^{-\frac{1}{2}\beta t} \{\delta(x - vt) + \delta(x + vt)\} \\ & + \frac{\exp^{-\frac{1}{2}\beta t}}{4v} \beta \left[I_0(\xi) + \frac{\beta t I_1(\xi)}{2\xi} \right] H(vt - |x|). \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

donde, $v = (kT/m)^{1/2}$, $\xi = (\beta/2v)\sqrt{v^2t^2 - x^2}$ e I_0, I_1 representan a las funciones Bessel de argumento imaginario. Las conclusiones de Davies son: 1) Para tiempos grandes, ρ_2 es asintóticamente igual a ρ_1 , como era de esperarse ya que ambas ecuaciones (2.2.12) y (2.2.15) tienen la misma solución en el estado estacionario. 2) La ec.(2.2.10), como se dijo, representa un proceso de Markov simple del tipo difusivo en el espacio fase. Sin embargo, cuando el problema se reduce al espacio de configuración en la forma representada en la ec.(2.2.15), la difusión es un proceso de Markov de orden dos. Más adelante, explicaremos lo que queremos decir con la frase “orden dos”. Por el momento, definiremos el orden de un proceso de Markov igual al numero de variables, cada una de ellas markoviana, en las que es posible descomponer un proceso aleatorio en general. Por otro lado, cabe señalar que es posible deducir la ecuación del telegrafista a partir del problema de la caminata al azar en el espacio de configuración unidimensional, el cual es un proceso de Markov múltiple [4].

Aparentemente, dos años después del trabajo de Davies, Brinkman [32] y Sack [33] propusieron independientemente, modificar la ecuación de Smoluchowski para incluir tiempos más cercanos al inicio del proceso que el tiempo de relajación. Ellos no mencionan nada del trabajo anterior de Davies [31]. Para nuestros propósitos revisaremos el trabajo de Sack, ya que como se ha hecho notar [30,34], la (primera) aproximación de Brinkman para la transformada de Laplace de la densidad es idéntica a la ecuación de Sack. El objetivo principal de este trabajo es proporcionar una generalización de la ecuación de Smoluchowski partiendo de la ecuación de Fokker–Planck (2.2.10). Esta última ecuación la reescribimos de una manera algo distinta, a saber,

$$\frac{\partial W}{\partial t} + v \frac{\partial W}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial v} = \beta \frac{\partial}{\partial v} \left(v W + \frac{kT}{m} \frac{\partial W}{\partial v} \right) \quad (2.2.21)$$

donde $W(x, v, t)dx dv$ es la probabilidad de que al tiempo t la partícula tenga una posición entre x y $x + dx$ y una velocidad entre v y $v + dv$ y el parámetro de amortiguamiento β determina la rapidez de acercamiento de la distribución de *velocidades* hacia el equilibrio. $V(x)$ es un potencial externo. El método propuesto por Sack es el siguiente: Si definimos la transformada T como,

$$\psi(x, u, t) = e^{\frac{kT}{2m}u^2} \int W(x, v, t) e^{-iuv} dv \equiv \mathcal{T}[W(x, v, t)] \quad (2.2.22)$$

cada término de la ec.(2.2.21) se transforma en,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}\left[\frac{\partial W}{\partial t}\right] &= \frac{\partial \psi}{\partial t} & \mathcal{T}\left[\frac{\partial W}{\partial v}\right] &= iu\psi \\ \mathcal{T}\left[v\frac{\partial W}{\partial x}\right] &= i\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial u} - \frac{kT}{m}(iu)\frac{\partial \psi}{\partial x} & \mathcal{T}\left[\beta\frac{kT}{m}\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\right] &= -\frac{kT\beta}{m}u^2\psi \\ \mathcal{T}\left[\beta\frac{\partial(vW)}{\partial v}\right] &= -\beta u\frac{\partial \psi}{\partial u} + \frac{kT\beta}{m}u^2\psi \end{aligned}$$

Finalmente, sustituyendo estos resultados en (2.2.21) llegamos a la ecuación,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + i\frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial u} - \frac{iu}{m}\left[kT\frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x}\psi\right] + \beta u\frac{\partial \psi}{\partial u} = 0. \quad (2.2.23)$$

En general, tenemos para la densidad de probabilidad $\rho(x, t)$ y para la densidad de la corriente $j(x, t)$ que,

$$\rho(x, t) = \int W(x, v, t) dv = \psi(x, 0, t) \quad (2.2.24a)$$

$$j(x, t) = \int v W(x, v, t) dv = i\left(\frac{\partial \psi}{\partial u}\right)_{u=0}. \quad (2.2.24b)$$

Usando estos resultados podemos aproximar a ψ por un desarrollo en potencias de u , tal que

$$\psi(x, u, t) = \rho(x, t) - i u j(x, t) + \dots \quad (2.2.25)$$

y se desprecian los términos de orden superior en u . Así, la ecuación (2.2.23) llega a ser:

i) A orden cero en u ,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0 \quad (2.2.26a)$$

ii) A primer orden en u

$$j + \frac{1}{\beta}\frac{\partial j}{\partial t} = -\frac{1}{m\beta}\left(kT\frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho\frac{\partial V}{\partial x}\right) \quad (2.2.26b)$$

donde se hace énfasis que la ecuación (2.2.26a) es simplemente la ecuación de continuidad. Por otro lado, la ec.(2.2.26b) difiere de la expresión usual para la corriente de difusión j , bajo una fuerza externa, por el término de inercia $\beta^{-1}(\partial j/\partial t)$. Para obtener una ecuación para ρ eliminemos j de las ecs.(2.2.26 a,b). Para hacer esto derivemos (2.2.26a) con respecto a t ,

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 j}{\partial t \partial x} = 0$$

y derivemos (2.2.26b) con respecto a x , uno obtiene

$$\frac{\partial j}{\partial x} + \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 j}{\partial x \partial t} = -\frac{1}{m\beta} \left[kT \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial V}{\partial x} \right) \right].$$

Combinando estas dos últimas ecuaciones para eliminar j y usando, a partir de (2.2.26a), el hecho

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$$

llegamos a la ecuación,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \frac{1}{m\beta} \frac{\partial}{\partial x} \left[kT \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \rho \right]. \quad (2.2.27)$$

Los comentarios de Sack sobre esta última ecuación son: primero, aparece un segundo término adicional en (2.2.27) al compararse con la ecuación de Smoluchowski (2.2.12)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{K(x)\rho}{\beta} \right) = \frac{kT}{m\beta} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (2.2.12)$$

Notese que el resto de los términos entre (2.2.12) y (2.2.27) son equivalentes, considerando que

$$K(x) = -\frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x}$$

igualdad que surge de la equivalencia entre (2.2.10) y (2.2.21). Segundo, el desplazamiento cuadrático medio se encuentra que es

$$\langle \delta x^2 \rangle = \frac{2kT}{m\beta^2} (\beta t - 1 + e^{-\beta t}). \quad (2.2.28)$$

Este resultado se puede mostrar que es correcto a partir de la ec.(2.2.27). Multipliquemos a (2.2.27) por $\delta x^2 = (x - x_0)^2$ e integremos sobre todo el espacio,

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \langle \delta x^2 \rangle}{\partial t^2} + \frac{\partial \langle \delta x^2 \rangle}{\partial t} = \frac{1}{m\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta x^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[kT \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \rho \right] dx$$

integrando por partes el lado derecho y suponiendo que ρ se anula en los límites, llegamos al resultado

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \langle \delta x^2 \rangle}{\partial t^2} + \frac{\partial \langle \delta x^2 \rangle}{\partial t} = \frac{2kT}{m\beta}.$$

Esta ecuación tiene como solución a (2.2.28). De acuerdo con la solución obtenida, a partir de la solución de la ecuación de Langevin (2.2.16), por Ornstein y Fürth [26, comment (8)].

De hecho integrando la ec.(2.2.17), tenemos

$$x - x_0 = \frac{v_0}{\beta} (1 - \exp^{-\beta t}) + \int_0^t e^{-\beta \eta} \int_0^\eta e^{\beta \xi} A(\xi) d\xi d\eta$$

El segundo término de lado derecho de esta ecuación se puede integrar por partes,

$$\int u dv = uv - \int v du$$

identificando a $u = \int_0^\eta e^{\beta\xi} A(\xi) d\xi$ y $dv = e^{-\beta\eta} d\eta$, así llegamos al resultado

$$x - x_0 = \frac{v_0}{\beta} (1 - \exp^{-\beta t}) - \frac{1}{\beta} e^{-\beta t} \int_0^t e^{\beta\xi} A(\xi) d\xi + \frac{1}{\beta} \int_0^t A(\xi) d\xi.$$

Elevando al cuadrado esta ecuación, promediando y calculando las integrales dobles, Ornstein [35] obtuvo (2.2.28).

En lo que sigue deseamos discutir muy brevemente dos puntos, a saber, las objeciones que han surgido contra la ecuación de Brinkman–Sack en el análisis de sus resultados y mostrar la compatibilidad de los resultados obtenidos de los trabajos de Davies y Sack para deducir ecuaciones tipo telegrafistas. Es necesario mostrar la compatibilidad ya que como se ha señalado [30] la validez del resultado, ec.(2.2.27), es puramente accidental. Brinkman obtiene este resultado a orden más bajo, ignorando el segundo y todos los momentos de orden superior, pero en el proceso, él desprecia contribuciones del mismo orden que los términos retenidos.

La primera objeción surgió del trabajo de Hemmer [34]. En este trabajo, Él compara la solución de la ecuación de Brinkman–Sack para una partícula Browniana libre (i.e. la fuerza externa no está presente), ec.(2.2.20), con la solución exacta de Ornstein y Uhlenbeck de la ecuación de Fokker–Planck para la distribución simultánea de posición y velocidades [35]. Cuando se tiene que, en el caso unidimensional, la posición x_0 se observa a $t = 0$ y la distribución de la probabilidad de la velocidad inicial se supone Maxwelliana, el desplazamiento x a un tiempo posterior está distribuido de acuerdo a

$$\rho_0(x, t) = \left(4\pi \frac{kT}{m\beta^2} (\beta t - 1 + e^{-\beta t}) \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{m\beta^2 (x - x_0)^2}{4kT(\beta t - 1 + e^{-\beta t})} \right]$$

y con la solución de la ecuación de Smoluchowski, ec.(2.2.19). No reproducimos aquí los resultados gráficos ya que estos pueden encontrarse en varios libros y artículos de la literatura (ver por ejemplo ref. [28]). El principal resultado de la comparación realizada por Hemmer, es que la función de distribución obtenida por la ecuación de Brinkman–Sack tiene la varianza correcta, pero no se aproxima a la función de distribución exacta de Ornstein y Uhlenbeck en la etapa inicial.

Segundo, después de quince años, Wilemski [30] señaló, entre otras cosas, que Brinkman y Sack habían obtenido su ecuación a orden más bajo ignorando el segundo y todos los momentos de orden mayor. Esto se aclara más abajo. De esta manera, Wilemski lleva a cabo una deducción de la ecuación de Smoluchowski con correcciones a la teoría clásica de movimiento Browniano a partir de la ecuación de Fokker-Planck en el espacio fase. Estas correcciones modifican el lado derecho de la ecuación de Smoluchowski, sin incluir correcciones en derivadas temporales. Dos años después, en 1978, usando un método diferente, Titulaer [36] obtuvo los resultados de Wilemski, que son las correcciones a la ecuación de Smoluchowski.

La relación entre las dos descripciones, a saber, aquella proporcionada por la ecuación de Fokker-Planck y por la ecuación de Smoluchowski, han permanecido confusas por un tiempo notablemente grande [36]. Sin embargo, nosotros no estamos interesados aquí en este problema.

Nuestro objetivo es algo distinto. Como ya hemos mencionado, deseamos discutir aquellos métodos que se han usado en la literatura que tratan con la deducción de ecuaciones cinéticas del tipo telegrafista, que además yacen en el marco de la teoría general del movimiento Browniano. Con este propósito ahora estudiamos la compatibilidad de los resultados proporcionados por los métodos de Davies [31] y Brinkman-Sack [32,33]. En lo que sigue, continuamos en caso unidimensional. Davies parte de la ecuación de Fokker-Planck (ver ec.(2.2.10)). Resumiendo los resultados de su método, se tiene que a partir de la ecuación de Fokker-Planck (2.2.10), la ecuación de evolución para el n -ésimo momento de la velocidad está dada por,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \langle v^n \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho \langle v^{n+1} \rangle = & -n\beta \rho \langle v^n \rangle + nK(x) \rho \langle v^{n-1} \rangle \\ & + n(n-1) \frac{kT\beta}{m} \rho \langle v^{n-2} \rangle \end{aligned} \quad (2.2.29)$$

para $n \geq 0$; donde

$$\rho(x, t) = \int W(x, v, t) dv \quad \text{y} \quad \rho \langle v^n \rangle = \int v^n W(x, v, t) dv. \quad (2.2.30)$$

Para obtener (2.2.29) únicamente hemos multiplicado a (2.2.10) por v^n e integrado sobre v . Así, para $n = 0, 1, 2$, recuperamos los casos siguientes casos particulares:

Momento a orden cero en v

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \langle v \rangle) = 0. \quad (2.2.13a)$$

Momento a primer orden en v

$$\frac{\partial \rho \langle v \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho \langle v^2 \rangle + \beta \rho \langle v \rangle = K(x) \rho. \quad (2.2.14)$$

Momento a segundo orden en v

$$\frac{\partial \rho \langle v^2 \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \rho \langle v^3 \rangle = -2\beta \rho \langle v^2 \rangle + 2K(x) \rho \langle v \rangle + 2 \frac{kT\beta}{m} \rho. \quad (2.2.31)$$

La ecuación (2.2.29) es la ecuación cinética para la jerarquía de las ecuaciones de los momentos de la velocidad, obtenida de la ecuación de Fokker-Planck. Como Wilemski ya hizo notar [30], el análisis incompleto de esta jerarquía a dado lugar a resultados incorrectos, por ejemplo, la adición de términos erróneos en la ecuación de Smoluchowski. Davies obtuvo su ecuación de tipo hiperbólico considerando únicamente las dos primeras ecuaciones obtenidas de la ec.(2.2.28) con $n = 0$ y $n = 1$, ambas de primer orden en el tiempo, que combinadas conducen a una ecuación diferencial de segundo orden para $\rho(x, t)$. En el caso de Sack, él únicamente considera los dos primeros términos de un desarrollo en series de potencias de u para la transformada ψ de $W(x, v, t)$ que obedece a la ecuación de Fokker-Planck (ver ecs.(2.2.21) y (2.2.23)). Sin embargo, esto es inconsistente. Para probar esto, considérese el desarrollo de la ec.(2.2.25) hasta segundo orden en u . Así tenemos que

$$\psi(x, v, t) = \psi(x, 0, t) + \left(\frac{\partial \psi}{\partial u} \right)_{u=0} u + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial u^2} \right)_{u=0} u^2 + \dots \quad (2.2.32)$$

A partir de las ecuaciones (2.2.24), encontramos que

$$\psi(x, 0, t) = \rho(x, t)$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial u} \right)_{u=0} = -i j(x, t)$$

y es posible ver directamente de la ec.(2.2.22) que,

$$\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial u^2} \right)_{u=0} = \frac{kT}{m} \rho - \rho \langle v^2 \rangle. \quad (2.2.33)$$

Sea

$$\mathcal{K} \equiv \frac{kT}{m} \rho - \rho \langle v^2 \rangle.$$

Substituyendo las ecs.(2.2.24) y (2.2.33) en la ec.(2.2.32), tenemos que,

$$\psi(x, v, t) = \psi(x, 0, t) - i j(x, t) u + \frac{\mathcal{K} u^2}{2} + \dots \quad (2.2.34)$$

Otra vez substituyendo la ec.(2.2.34) en la ec.(2.2.23) y agrupando términos del mismo orden en u , llegamos a los siguientes resultados: *i)* A orden cero en u ,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0. \quad (2.2.35a)$$

ii) A primer orden en u ,

$$j(x, t) + \frac{1}{\beta} \frac{\partial j}{\partial t} = -\frac{1}{m\beta} \left(kT \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial V}{\partial x} - m \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial x} \right) \quad (2.2.35b)$$

en esta última ecuación el término $\partial \mathcal{K} / \partial x$ surge debido a que incluimos el término de segundo orden en u del desarrollo (2.2.32). Este término no aparece en (2.2.24b). Si ahora substituímos el valor de \mathcal{K} , entonces la ecuación (2.2.35b) se convierte en,

$$j(x, t) + \frac{1}{\beta} \frac{\partial j}{\partial t} = -\frac{1}{m\beta} \left[kT \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial V}{\partial x} - m \left(\frac{kT}{m} \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial \rho \langle v^2 \rangle}{\partial x} \right) \right]$$

o bien

$$j(x, t) + \frac{1}{\beta} \frac{\partial j}{\partial t} = -\frac{1}{m\beta} \left[\frac{\partial V}{\partial x} \rho + m \frac{\partial \rho \langle v^2 \rangle}{\partial x} \right]. \quad (2.2.36)$$

Combinando las ecs.(2.2.35a) y (2.2.36), en manera similar a la combinación de las ecs.(2.2.24), llegamos a,

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{m\beta} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial V}{\partial x} \rho + m \frac{\partial}{\partial x} (\rho \langle v^2 \rangle) \right]. \quad (2.2.37)$$

La ecuación (2.2.37) resulta de mantener todos los términos de primer orden en u en la ec.(2.2.35b). Esta ecuación es idéntica a la ec.(2.2.15) de Davies, ya que

$$K(x) = -\frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x}.$$

Nótese que ambos métodos, proporcionan correctamente los mismos resultados.

Finalmente, notemos en relación a la metodología, que en su trabajo, Sack desprecia todos los términos a partir de $n \geq 2$ en el desarrollo en serie de potencias u^n para la transformada de Fourier de la densidad de probabilidad $W(x, v, t)$ (ver ecs.(2.2.19),(2.2.20) y (2.2.23)). Por otro lado notemos que (2.2.37) se reduce a (2.2.27) en el caso que $\langle v^2 \rangle = kT/m$, la velocidad térmica.

2.3 ECUACIONES TIPO TELEGRAFISTA Y MOVIMIENTO BROWNIANO.

Ahora llegamos al propósito principal de este capítulo. En esta sección resumiré mi más reciente propuesta [37] para deducir ecuaciones de transporte hiperbólicas siguiendo el método de Chandrasekhar [22]. Este método tiene esencialmente la misma falla que el método de Weymann. Empezamos con el resumen del método propuesto.

El método de Chandrasekhar usado para la deducción de ecuaciones Fokker-Planck puede resumirse como sigue.

i) Empezamos considerando la ecuación Chapman-Kolmogorov escrita en la forma de Chandrasekhar [1, 38],

$$W(\mathbf{u}, t + \tau) = \int W(\mathbf{u} - \Delta\mathbf{u}, t) \psi(\mathbf{u} - \Delta\mathbf{u}; \Delta\mathbf{u}) d(\Delta\mathbf{u}) \quad (2.3.1)$$

donde $W(\mathbf{u}, t + \tau)$ es la probabilidad de que un evento especificado por el vector \mathbf{u} ocurra en cierto tiempo $t + \tau$, $\Delta\mathbf{u}$ es el cambio del vector \mathbf{u} en el tiempo τ , $W(\mathbf{u} - \Delta\mathbf{u}; t)$ la probabilidad de que \mathbf{u} tenga el valor $\mathbf{u} - \Delta\mathbf{u}$ al tiempo t y $\psi(\mathbf{u} - \Delta\mathbf{u}; \Delta\mathbf{u})$ la probabilidad de que el cambio $\Delta\mathbf{u}$ ocurra en el tiempo τ . Esta ecuación esta escrita en el espacio de velocidades, pero también es posible escribirla en el espacio de configuración e incluso en el espacio fase [22].

ii) Este paso es importante. Primero, τ se supone finito, pequeño comparado con un tiempo macroscópico hidrodinámico, pero grande comparado con un tiempo microscópico. Sin embargo, τ debe ser suficientemente grande para asegurar que los eventos $\mathbf{u} - \Delta\mathbf{u}$ y \mathbf{u} son independientes. Después de esta observación uno procede a desarrollar todas las cantidades que aparecen en la ec.(2.3.1), en potencias de $\Delta\mathbf{u}$ y τ . En este punto Chandrasekhar, siguiendo a Einstein [26], mantiene únicamente el término de primer orden en τ pero mantiene términos hasta potencias en $(\Delta\mathbf{u})^2$.

iii) A continuación, se agrupan términos y se divide por τ ambos miembros de la ecuación resultante obtenida en el paso anterior. En el análisis usual de esta deducción se toma el límite $\tau \rightarrow 0$, sin más argumentos que lo justifiquen [1]. Este límite se toma para garantizar el hecho de anular los términos mayores que $(\Delta\mathbf{u})^2$ (incluso términos mayores que τ) en el desarrollo (2.3.1). Así es como la ecuación de Fokker-Planck se obtiene en el espacio de velocidades*.

* Este punto es estándar en la literatura que discute la deducción de la ecuación de Fokker-Planck a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov. No obstante, ver ref.[37]

En esta metodología, el hecho de tomar el límite $\tau \rightarrow 0$, cuando primero se ha supuesto τ finito, es un procedimiento inconsistente [39]. En lo que sigue nos proponemos mantener τ pequeño pero finito e incorporar términos de potencias en $(\tau)^2$ en el desarrollo de la ec.(2.3.1) para obtener una ecuación tipo telegrafista.

Partimos de la ecuación de Chapman-Kolmogorov, en una dimensión, escrita en el espacio de configuración*,

$$w(r, t + \tau) = \int w(r - \Delta r, t) \psi(r - \Delta r; \Delta r) d(\Delta r) \quad (2.3.2)$$

donde cada término tiene el significado descrito anteriormente. Desarrollando cada término en potencias de Δr y τ en ambos miembros de la ecuación (2.3.2) tenemos que**

$$w(r, t) + \tau \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \dots = \int \left[w(r, t) - \frac{\partial w}{\partial r} \Delta r + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} (\Delta r)^2 + \dots \right] \times \\ \left[\psi(r; \Delta r) - \frac{\partial \psi}{\partial r} \Delta r + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} (\Delta r)^2 + \dots \right] d(\Delta r).$$

Haciendo uso del hecho de que,

$$\int \psi(r; \Delta r) d(\Delta r) = 1$$

y definiendo los momentos de la distribución ψ como,

$$\langle (\Delta r)^n \rangle = \int (\Delta r)^n \psi(r; \Delta r) d(\Delta r), \quad (2.3.3)$$

después de algunos arreglos, se tiene a partir del desarrollo de (2.3.2),

$$\tau \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + 2 \frac{\partial w}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{2 \langle \Delta r \rangle}{\tau} w \right) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \left(\frac{\langle (\Delta r)^2 \rangle}{\tau} w \right). \quad (2.3.4)$$

Si definimos las cantidades

$$\frac{2 \langle \Delta r \rangle}{\tau} \equiv M_1 \quad \frac{\langle (\Delta r)^2 \rangle}{\tau} \equiv M_2 \quad (2.3.5)$$

* Esta ecuación, en principio, define un proceso markoviano. Esto en principio, debido a que se cree que (2.3.2) es una condición necesaria pero no suficiente [45].

** Este desarrollo llevado a segundo orden en τ es inconsistente con la ecuación (2.3.2). La razón es esencialmente la misma que discutimos el trabajo de Weymann. Una amplia discusión sobre este tópico se realiza en el siguiente capítulo.

la ec.(2.3.4) se reduce a

$$\tau \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + 2 \frac{\partial w}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r}(M_1 w) + \frac{\partial^2}{\partial r^2}(M_2 w). \quad (2.3.6)$$

Esta ecuación se ha obtenido suponiendo que es posible despreciar todos los momentos con $n \geq 3$. En este sentido la ecuación (2.3.6) es una ecuación aproximada. Los momentos M_1 y M_2 son generales tanto como dependan de la expresión particular para la probabilidad condicional ψ .

Por otro lado, el intervalo temporal τ que aparece explícitamente en la ec.(2.3.6), tiene una interpretación física muy clara a partir de la ecuación (2.3.2). En esta ecuación τ es un intervalo temporal durante el cual la variable r cambia su valor por la cantidad Δr . Nótese que debido a que τ se ha mantenido finito, tomamos en cuenta este hecho conservando términos cuadráticos en τ , surge la pregunta si esto introduce efectos de memoria en el sistema. Esto es todavía una cuestión debatible. Hemos partido de la ecuación de Chapman–Kolmogorov, que en principio define un proceso Markoviano. Sin embargo, la ecuación (2.3.6), una ecuación diferencial de tipo hiperbólico, está usualmente asociada con un proceso de Markov de segundo orden (veasé comentario posterior a la ecuación (2.2.20), que implica algunas correlaciones entre las Δr 's contenidas dentro tales tiempos finitos. Además, en deducciones típicas de este tipo de ecuaciones se hace uso de ecuaciones constitutivas que son equivalentes a la presencia de una función de memoria exponencial [19]. Notemos que en el límite $\tau \rightarrow 0$, la ec.(2.3.6) se reduce a la ecuación de difusión obtenida por Chandrasekhar [22].

Ahora regresamos a la ecuación (2.3.6). Nótese para el caso particular en el que $M_1 = 0$, uno tiene que,

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \frac{2}{\tau} \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{M_2}{\tau} \frac{\partial^2 w}{\partial r^2} \quad (2.3.7)$$

para el caso en el que M_2 es constante. Así la ec.(2.3.7) tiene una estructura análoga a aquella propuesta por Morse y Feshbach (ver Sec.1.1). Sin embargo, la razón fundamental detrás de los resultado arriba obtenidos es cuestionable. Así, hemos tomado a la ec.(2.3.2) y desarrollado en serie de potencias el lado derecho manteniendo únicamente los dos primeros momentos. Esto es inconsistente con el hecho de mantener también el término τ^2 en el lado izquierdo. Por lo tanto para corregir esta falla mantenemos en el lado derecho todos los momentos que tienen contribuciones de orden τ^2 . Esto es trivial ya que dichos términos son fáciles de calcular, cuando uno trabaja en el espacio de velocidades, y además están

disponibles en la literatura [35,40]. Por tanto, partiendo de la ec.(2.3.1), escrita en el espacio de velocidades en una dimensión,

$$w(v, t + \tau) = \int w(v - \Delta v, t) \psi(v - \Delta v; \Delta v) d(\Delta v) \quad (2.3.8)$$

y llevando al cabo justo el procedimiento descrito anteriormente, después de alguna álgebra directa encontramos que,

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\tau^2 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \tau \frac{\partial w}{\partial t} + \dots = & - \frac{\partial}{\partial v} [w \langle \Delta v \rangle] + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial v^2} [w \langle (\Delta v)^2 \rangle] \\ & - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial v^3} [w \langle (\Delta v)^3 \rangle] + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4}{\partial v^4} [w \langle (\Delta v)^4 \rangle]. \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

Para obtener esta última ecuación se ha hecho uso de la definición

$$\langle (\Delta v)^n \rangle = \int (\Delta v)^n \psi(v; \Delta v) d(\Delta v). \quad (2.3.10)$$

Para obtener la ec.(2.3.9) se desarrolló (2.3.8) hasta el cuarto orden en los momentos, debido a que, como veremos más adelante, $\langle (\Delta v)^4 \rangle$ tiene una contribución de segundo orden en τ .

Para calcular los momentos $\langle (\Delta v)^n \rangle$, usamos la ecuación de Langevin

$$\frac{dv}{dt} = -\beta v + A(t) \quad (2.2.16)$$

donde v representa la velocidad de la partícula, β es la constante de fricción y $A(t)$ "fuerza" fluctuante cuyo promedio en el tiempo es cero. La integral de la ecuación (2.2.16) en el intervalo de $t = 0$ a t es, de acuerdo a la sección anterior,

$$v = v_0 e^{-\beta t} + e^{-\beta t} \int_0^t e^{\beta \xi} A(\xi) d\xi \quad (2.2.17)$$

donde $v(0) = v_0$. La razón a la cual $A(t)$ varía puede ser caracterizada por algún "tiempo de correlación" τ^* el cual mide el tiempo medio entre dos máximos sucesivos (o mínimos) de la fuerza fluctuante $A(t)$. Este tiempo es muy pequeño en escala macroscópica (Este debería de ser del orden de una separación media intermolecular dividida por la velocidad molecular media, es decir, alrededor de 10^{-13} s, si $A(t)$ describe las interacciones con moléculas de un líquido. Ahora bien, calcular los momentos (2.3.10) requiere explotar el hecho de que el tiempo de correlación τ^* de la fuerza fluctuante es muy pequeño. Considere un intervalo de tiempo $\tau \gg \tau^*$, que es macroscópicamente muy corto en el sentido

que $\tau \ll \beta^{-1}$. Con esto, notemos que la fuerza $A(t)$ no está correlacionada en intervalos sucesivos de longitud τ . Si dividimos el intervalo de tiempo t en N intervalos sucesivos τ tal que $t = N\tau$, entonces la integral que aparece en (2.2.17) se puede expresar como una suma de contribuciones en cada intervalo τ , es decir,

$$\int_0^t e^{\beta\xi} A(\xi) d\xi = \sum_{k=0}^{N-1} e^{\beta\tau k} \int_0^\tau A(k\tau + s) ds$$

Sustituyendo este resultado en (2.2.17) y escribiendo explícitamente $A(t) = (1/m)F(t)$ tenemos que,

$$v - v_0 e^{-\beta t} = \frac{1}{m} e^{-\beta t} \int_0^t e^{\beta\xi} F(\xi) d\xi = \frac{1}{m} e^{-\beta t} \sum_{k=0}^{N-1} e^{\beta\tau k} \int_0^\tau F(k\tau + s) ds \quad (2.3.11).$$

Definiendo las cantidades,

$$G_k = \frac{1}{m} \int_0^\tau F(k\tau + s) ds$$

$$y_k = e^{-\beta\tau(N-k)} G_k$$

y finalmente,

$$Y = \sum_{k=0}^{N-1} e^{-\beta\tau(N-k)} G_k = \sum_{k=0}^{N-1} y_k$$

llegamos a la ecuación

$$v - v_0 e^{-\beta t} = Y = \sum_{k=0}^{N-1} e^{-\beta\tau(N-k)} G_k = \sum_{k=0}^{N-1} y_k \quad (2.3.12).$$

A partir de esta ecuación podemos calcular el valor de $\langle Y^2 \rangle$,

$$\langle Y^2 \rangle = \langle G^2 \rangle \frac{1 - e^{-2\beta t}}{2\beta\tau} = \langle (v - v_0 e^{-\beta t})^2 \rangle$$

donde la última igualdad se debe proviene de (2.3.12). Si $\tau \rightarrow \infty$, $\langle v^2 \rangle = (\langle G^2 \rangle / 2\beta\tau) = kT/m$. Por lo tanto tenemos que

$$\langle G^2 \rangle = \frac{2kT\beta}{m} \tau. \quad (2.3.13)$$

Finalmente para evaluar explícitamente los momentos (2.3.10), integremos (2.2.16) en un intervalo de tiempo τ , tenemos que

$$v(\tau) - v(0) = -v_0 \beta \tau + \frac{1}{m} \int_0^\tau e^{\beta t'} F(t') dt'$$

donde

$$G = \frac{1}{m} \int_0^\tau e^{\beta t'} F(t') dt'$$

Por tanto,

$$\Delta v = -v_0 \beta \tau + G$$

De esta expresión directamente calculamos los primeros cuatro momentos que están dados por,[35,43],

$$\begin{aligned} \langle \Delta v \rangle &= -\beta v \tau \\ \langle (\Delta v)^2 \rangle &= (\beta v)^2 + \frac{2kT\beta}{M} \tau \\ \langle (\Delta v)^3 \rangle &= -(\beta v)^3 \tau^3 - \frac{6kT\beta^2 v}{M} \tau^2 \\ \langle (\Delta v)^4 \rangle &= 12 \left(\frac{kT\beta}{M} \right)^2 \tau^2 + \vartheta(\tau^3). \end{aligned}$$

No obstante, todos los momentos de mayor orden, los cuales son finitos, son al menos de orden τ^3 . Sustituyendo estas expresiones en (2.3.9), tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} \tau + \frac{1}{2} \tau^2 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \dots &= -\frac{\partial}{\partial v} [(-\beta v \tau) w] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left[w \left(\frac{2kT\beta}{M} \tau + (\beta v)^2 \tau^2 \right) \right] \\ &\quad - \frac{1}{6} \frac{\partial^3}{\partial v^3} \left[\left(-(\beta v)^3 \tau^3 - \frac{6kT\beta^2 v}{M} \tau^2 \right) w \right] \\ &\quad + \frac{12}{24} \frac{\partial^4}{\partial v^4} \left[w \left(\frac{kT\beta}{M} \right)^2 \tau^2 \right] + \vartheta(\tau^4). \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Multiplicando la ec.(2.3.14) por $2/\tau$ se tiene que,

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + 2 \frac{\partial w}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial v} (2\beta v w) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left\{ \left[\frac{2kT\beta}{M} + (\beta v)^2 \tau \right] w \right\} \\ &\quad + \frac{\partial^3}{\partial v^3} \left[\left(\frac{2kT\beta^2}{M} \tau \right) v w \right] + \frac{\partial^4}{\partial v^4} \left[\left(\frac{kT\beta}{M} \right)^2 \tau w \right]. \end{aligned} \quad (2.3.15)$$

Podemos mencionar que la ec.(2.3.15) surge como resultado de incluir una contribución de segundo orden en τ a la ecuación de Fokker-Planck. Nótese que en el caso en que tal contribución se anule, es decir, se tome el límite $\tau \rightarrow 0$, uno recupera la ecuación de Fokker-Planck,

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} (\beta v w) + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left(\frac{kT\beta}{M} w \right).$$

También, debido a la estructura de la ec.(2.3.15), ésta puede ser escrita en la forma.

$$\begin{aligned} \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [(\beta v) w] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left[\left(\frac{kT\beta}{M} + \frac{1}{2} (\beta v)^2 \tau \right) w \right] \\ + \frac{\partial^3}{\partial v^3} \left[\left(\frac{kT\beta^2}{M} \tau \right) v w \right] + \frac{\partial^4}{\partial v^4} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{kT\beta}{M} \right)^2 \tau w \right] \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

Si en esta última ecuación igualamos términos del mismo orden en τ en ambos lados, tenemos que a orden cero en τ ,

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v} [(\beta v) w] + \frac{\partial^2}{\partial v^2} \left[\left(\frac{kT\beta}{M} \right) w \right]$$

que es la ecuación de Fokker-Planck, obtenida sin usar el límite $\tau \rightarrow 0$.

A primer orden en τ , uno obtiene que

$$\frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial v^2} [(\beta v)^2 w] + \frac{\partial^3}{\partial v^3} \left[\left(\frac{2kT\beta^2}{M} v w \right) \right] + \frac{\partial^4}{\partial v^4} \left[\left(\frac{kT\beta}{M} \right)^2 w \right] \quad (2.3.17)$$

que es una ecuación de ondas, con un término fuente no estándar.

La cuestión principal que surge de este análisis es si la ec.(2.3.15) es interpretada correctamente como una corrección físicamente significativa a la ecuación Fokker-Planck, que incluye términos de orden τ^2 , o, de acuerdo al análisis que conduce a la ec.(2.3.17), uno podría en principio continuar para incluir todas las potencias en τ , ya que este parámetro es finito, para obtener una jerarquía de ecuaciones de las cuales la ecuación de Fokker-Planck es la ecuación en el orden más bajo correspondiente a $\tau = 0$ y el resto son correcciones a la función de distribución W cuyo significado, permanece aún por evaluarse. Hasta aquí el resumen de mi trabajo [37].

2.4 CONCLUSIONES

En este capítulo presentamos un breve resumen de algunos trabajos que tratan con el problema de la deducción de ecuaciones cinéticas tipo telegrafista. Hemos hecho una revisión crítica en la que intentamos exponer aquellos puntos débiles contenidos en los métodos que conducen a las ecuaciones (2.2.15) y (2.2.25). También hicimos una comparación entre los métodos de Davies y Sack los cuales tratan con la deducción de ecuaciones hiperbólicas para la distribución de probabilidad. Argumentamos que los resultados obtenidos a través de estos métodos son inciertos debido a que en esencia, tales resultados

incorporan una derivada temporal de segundo orden en la ecuación de Smoluchowski, sin alguna otra justificación.

Por otro lado hemos hecho notar la falla presente en la propuesta del procedimiento para deducir ecuaciones cinéticas tipo telegrafista partiendo de la ecuación de Chapman–Kolmogorov, siguiendo el método de Chandrasekhar. Tales ecuaciones hiperbólicas se obtienen bajo una aproximación, a saber, llevar a cabo el desarrollo en serie de Taylor de la ecuación de Chapman–Kolmogorov hasta el segundo orden en potencias de τ y Δr . Ya que, en principio, la ecuación de Chapman–Kolmogorov define un proceso de Markov, la ecuación hiperbólica que se obtiene a partir de ella es incorrecta por lo expuesto en la sección anterior.

Por otro lado, señalemos algunas implicaciones en teorías fenomenológicas sobre la consideración del intervalo τ . En la teoría fenomenológica de ondas térmicas, uno obtiene una ecuación del telegrafista para la temperatura T [41],

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau} \frac{\partial T}{\partial t} = c^2 \nabla^2 T$$

que obviamente es hiperbólica y transmite ondas de temperatura con velocidad c . Las ondas son atenuadas como resultado de la relajación y del flujo estacionario del calor inducido por gradientes de temperatura. Como es bien conocido, el tiempo de relajación τ que aparece en la ecuación para T proviene de la ecuación fenomenológica para el flujo de calor \mathbf{J}_q ,

$$-\tau \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t} = \kappa \text{grad } T + \mathbf{J}_q$$

donde κ es la conductividad térmica. Esta es llamada la ecuación de Maxwell–Cattaneo–Vernotte [15,17,18]. La derivada temporal en esta ecuación, a saber, $\tau \partial \mathbf{J}_q / \partial t$ puede describirse como una “inercia” térmica [17]. Es importante notar que el tiempo τ está relacionado con algún aspecto físico que puede ser considerado o no en la teoría del calor. Primero, Maxwell [42] ignora la derivada temporal debido a que ésta “... puede ser despreciada, tanto como la razón de conducción se establezca rápidamente por sí misma.” Por otro lado la referencia [17] también señala que “Nernst (1917) sugirió que en buenos conductores térmicos a bajas temperaturas al calor puede tener suficiente “inercia” para dar lugar a “descargas oscilatorias”. Onsager (1931) hizo notar que la ley de Fourier contradice el proceso de reversibilidad microcópica usado en termodinámica, una contradicción que “... desaparece cuando reconocemos que (la ley de Fourier) es únicamente una descripción

aproximada del proceso de conducción, donde se desprecia el tiempo necesario para la aceleración del flujo de calor” [43]. De hecho una teoría en la que la “inercia” térmica se postula en el contexto de una generalización dinámica de la teoría de Onsager fue dada por Kaliski [17,pp.42-43; 44]. Después de algunas aproximaciones, Kaliski llega a una ecuación del telegrafista. El hecho de que todo este esquema sea consistente internamente o no, requiere, en mi opinión, de un estudio más profundo.

Es notable el hecho de que sea posible una descripción de los fenómenos irreversibles en los que uno puede considerar procesos que ocurren con τ pequeño. Sin embargo, cuando τ aunque es pequeño, pero no despreciable, la descripción de tales procesos está dada por ecuaciones de tipo hiperbólico. Así, en cierto sentido llegamos a la conclusión que la ecuación hiperbólica *“describe los procesos de la conducción del calor, difusión, etc. más exactamente que una ecuación tipo difusiva. Físicamente esto significa que las condiciones bajo las cuáles es posible obtener ecuaciones del tipo parabólico (ecuaciones tipo difusivas) son aparentemente más restrictivas”*.

Finalmente, es conveniente señalar que los procedimientos propuestos en este trabajo tiene algunas cuestiones de carácter matemático las cuales trataremos de clarificar en el capítulo siguiente.

REFERENCIAS

- [1] Olivares-Robles, M. A., García-Colín, L. S., Mesoscopic derivation of hyperbolic transport equations, *Phys. Rev.*, E50 (1994), 2451. y referencias ahí contenidas.
- [2] Camacho, J., Jou, D., H Theorem for telegrapher type kinetic equations, *Physics Letters*, A171 (1992), 26.
- [3] Masoliver, J., Porrà, J. M., Weiss, G., Solutions of the telegrapher's equation in the presence of traps, *Phys. Rev.*, A45 (1992), 2222.
- [4] Goldstein, S., On diffusion by discontinuous movements and the telegraph equation, *Quart. J. Mech. Appl. Math.*, 4 (1951), 129.
- [5] Orsingher, E., A planar random motion governed by the two-dimensional telegraph equation, *J. Appl. Prob.*, 23 (1986), 385.
- [6] Orsingher, E., Hyperbolic equations arising in random models, *Stoch. Proc. Appl.*, 21 (1985), .
- [7] Masoliver, J., Lindenberg, K., Weiss, G. H., A continuous-time generalization of the persistent random walk, *Physica*, A157 (1989), 891.
- [8] Masoliver, J., Porrà, J. M., Weiss, G. H., The continuum limit of a two-dimensional persistent random walk, *Physica*, A182 (1992), 593.
- [9] Masoliver, J., Porrà, J. M., Weiss, G. H., Some two and three-dimensional persistent random walks, *Physica*, A193 (1993), 469.
- [10] Masoliver, J., Weiss, G. H., Telegrapher's equation with variable propagation speeds, *Phys. Rev.*, E49 (1994), 3852.
- [11] Masoliver, J., Porrà, J. M., Weiss, Solution to the telegrapher's equation in the presence of reflecting and partly reflecting boundaries, *Phys. Rev.*, E48 (1993), 939.
- [12] Ishimaru, A., On difussion of a pulse in densely distributed scatterers, *J. Op. Soc. Am.*, 68 (1978), 1045.
- [13] Ishimaru, A., Diffusion of lighth in turbid material, *Appl. Opt.*, 28 (1989), 2210.
- [14] Bonner, R. F., Havlin, S., Nossal, R., Weiss, G. H., Model for photon migration in turbid biological media, *J. Op. Soc. Am.*, A4 (1987), 423. b) Durian, D.J., Rudnick, J., Photon migration at short times and distances and in cases of strong absorption, *J. Opt. Soc. Am.*, A14 (1997), 235.
- [15] García-Colín, L. S., Extended non-equilibrium thermodynamics, scope and limitations, *Rev. Mex. Fis. (in English)*, 34 (1988), 344.

- [16] Jou, D., Casas-Vázquez, J., Lebon, G., *Extended irreversible thermodynamics*. Springer Verlag, Berlin, 1993.
- [17] Joseph, D. D., Preziosi, L., Heat waves, *Rev. Mod. Phys.*, 61 (1989), 41.
- [18] Joseph, D. D., Preziosi, L., Addendum to the paper “Heat waves”, *Rev. Mod. Phys.*, 62 (1990), 375.
- [19] Jou, D., Casas-Vázquez, J., Lebon, G., *Extended irreversible thermodynamics*, *Rep. Prog. Phys.*, 51 (1988), 1105.
- [20] Masoliver, J., Weiss, G. H., *Finite-velocity diffusion*, *Eur. J. Phys.* (to be published)
- [21] García-Colín, L. S., Olivares-Robles, M. A., *Hyperbolic type transport equations*. *Physica*, A220 (1995), 165.
- [22] Chandrasekhar, S., *Stochastic problems in physics and astronomy*, *Rev. Mod. Phys.*, 15 (1943), 1. (reprinted in Wax, N., *Selected papers on noise and stochastic processes*. p. 3, Dover, New York, 1954).
- [23] Weymann, H. D., *Finite speed of propagation in heat conduction, diffusion, and viscous shear motion*, *Am. J. Phys.*, 35 (1965), 488.
- [24] Beckenbach, E. F. (ed.), *Modern mathematics for the engineer*, p. 170, McGraw-Hill, New York, 1961.
- [25] Morse, P. M., Feshbach, H., *Methods of theoretical physics*, vol. I, p. 865, McGraw-Hill, New York, 1953.
- [26] Einstein, A., *Investigations on the theory of the Brownian movement*, Dover, New York, 1956.
- [27] Gardiner, C. W., *Handbook of stochastic methods*, 2nd edition, Chap. I, Springer-Verlag, Berlin, 1985.
- [28] Risken, H., *The Fokker-Planck equation*, 2nd edition, Chaps. I-II, Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [29] Kramers, H. A., *Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions*, *Physica*, 7 (1940), 284.
- [30] Wilemski, G., *On the derivation of Smoluchowski equations with corrections in the classical theory of Brownian motion*, *J. Stat. Phys.*, 14 (1976), 153.
- [31] Davies, R. W., *The connection between the Smoluchowski equation and the Kramers-Chandrasekhar equation*, *Phys. Rev.*, 93 (1954), 1169.
- [32] Brinkman, H. C., *Brownian motion in a field of force and the diffusion theory of chemical reactions*, *Physica*, 23 (1956), 29.

- [33] Sack, R. A., A modification of Smoluchowski's diffusion equations, *Physica*, 22 (1956), 917.
- [34] Hemmer, P. C., On a generalization of Smoluchowski's diffusion equation, *Physica*, 27 (1961), 79.
- [35] Uhlenbeck, G. E., Ornstein, L.S., On the theory of the Brownian motion, *Phys. Rev.*, 36 (1930), 823. (reprinted in N. Wax loc. cit. ref.[22])
- [36] Titulaer, U. M., A systematic solution procedure for the Fokker-Planck equation of a Brownian particle in the high-friction case, *Physica*, 91A (1978), 321.
- [47] Olivares-Robles, M.A., García-Colín, L.S., On Different Derivations of Telegrapher's Type Kinetic Equations, *J. Non-Equilib. Thermodyn.* **21** (1996), 361.
- [38] McQuarrie, D. A., *Statistical mechanics*, Chap. 20, Harper & Row Publishers, 1976.
- [39] Brush, S. G., *The kind of motion we call heat*, vol. II, p. 680, North-Holland, Netherlands, 1986.
- [40] Reif, F., *Fundamentals of statistical and thermal physics*, Chap. 15, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [41] García-Colín, L. S., *Termodinámica de procesos irreversibles*, Chap. 8, Colección C.B.I. U.A.M.-Iztapalapa, 1990.
- [42] Maxwell, J. C., On the dynamical theory of gases, *Philos. Trans. Soc. London*, 157 (1867), 49.
- [43] Onsager, L., Reciprocal relations in irreversible processes I., *Phys. Rev.*, 37 (1931), 405.
- [44] Kaliski, S., Wave equation for heat conduction, *Bull. Acad. Pol. Sci.*, 13(4) (1965), 211.
- [45] Kác, M., *Probability and related to topics in physical sciences, lectures in applied mathematics Vol.1*, Interscience publishers, New York, 1959 (ver paginás 145-146).

ANEXO DEL CAPÍTULO 2

SOBRE LAS DEDUCCIONES MESOSCÓPICAS DE LA ECUACIÓN DEL TELEGRAFISTA.

En el capítulo anterior hemos discutido algunas deducciones de ecuaciones de transporte hiperbólicas. Sin embargo, tanto el trabajo de Weymann como el método propuesto por mí y por García-Colín son incorrectos. En este anexo expongo en particular aquella objeción relacionada con el concepto de la no-markofianidad de la ecuación resultante (2.3.6) del capítulo anterior. Debido a la falta de claridad, de que un proceso sea markofiano si y solo si cumple con la ecuación de Chapman-Kolmogorov, se exponen dos alternativas para estudiar el origen de las ecuaciones del tipo telegrafista en teoría de transporte en particular la difusión.

A2.1 DISCUSIÓN.

En el capítulo anterior he expuesto mi trabajo recientemente publicado [1]. Discutiré el comentario realizado respecto al desarrollo de la ecuación (2.3.2). Con este objetivo señalaremos el siguiente aspecto que fue pasado por alto en aquél trabajo. Al suponer que la ecuación integral entre $W(r, t+\tau)$ y $W(r-\Delta r, t)$ es cierta, realmente estamos suponiendo que el recorrido que sigue una partícula Browniana *dependerá únicamente de los valores instantáneos de sus parámetros y es completamente independiente de sus historia previa total.*

A2.2 MARKOVIANIDAD.

Como ya mencionamos, en nuestro comentario sobre el trabajo de Weymann [2], en teoría de probabilidad general, un proceso estocástico que dependa únicamente de los valores instantáneos de sus parámetros y sea completamente independiente de su historia previa total es Markoviano. En otras palabras, el proceso estocástico que tiene la característica

de que lo que sucede a un instante dado de tiempo depende *únicamente* del estado del sistema al tiempo t es llamado un *proceso de Markov*. Como se sabe en este proceso “el futuro” está determinado únicamente por el presente, es decir, sólo intervienen *dos tiempos*: el tiempo $t - 1$ y el tiempo t . Debido a esto el proceso “no recuerda” su pasado, es decir no hay memoria. Por otro lado, el resultado que se obtiene a partir de la ecuación de Chapman-Kolmogorov debería de ser markoviano, en el sentido descrito más arriba. No obstante, como se sabe, una ecuación hiperbólica tipo telegrafista contiene memoria. Mencionemos algunos aspectos técnicos sobre los procesos de Markov que obedecen la ecuación de Chapman-Kolmogorov.

Para un definición más precisa de lo que es un proceso de Markov, es útil introducir primero la noción de *probabilidad condicional*. Escribiremos $P_2(y_1|y_2, t)dy_2$ para la probabilidad de que dada y_1 al tiempo t_0 , uno encuentre y en el rango $(y_2, y_2 + dy_2)$ a un tiempo posterior t . Si uno tiene que $W_1(y, t)dy$ es la probabilidad de encontrar y en el rango $(y, y + dy)$ al tiempo t y $W_2(y_1, t_1; y_2, t_2)dy_1dy_2$ es la probabilidad conjunta de encontrar y en el rango $(y_1, y_1 + dy_1)$ al tiempo t_1 y en el rango $(y_2, y_2 + dy_2)$ al tiempo t_2 , uno encuentra P_2 de W_2 de acuerdo a la siguiente expresión

$$W_2(y_1, y_2, t) = W(y_1)P_2(y_1|y_2, t)$$

P_2 debe satisfacer las siguientes relaciones obvias,

$$P_2(y_1|y_2, t) \geq 0, \tag{A2.2.1}$$

$$\int dy_2 P_2(y_1|y_2, t) = 1, \tag{A2.2.2}$$

$$W_1(y_2) = \int W_1(y_1)P_2(y_1|y_2, t)dy_1, \tag{A2.2.3}$$

mientras que en los problemas de movimiento browniano uno siempre tiene

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_2(y_1|y_2, t) = W_1(y_2). \tag{A2.2.4}$$

Un proceso de Markov ahora puede ser definido más precisamente diciendo que para tales procesos la probabilidad condicional de que y esté en el intervalo $(y_n, y_n + dy_n)$ al tiempo t_n , dado que y es igual a y_1, y_2, \dots, y_{n-1} a los tiempos t_1, t_2, \dots, t_{n-1} (donde $t_n > t_{n-1} \dots > t_2 > t_1$) depende, además de $y_n t_n$, *únicamente* del valor de y al tiempo previo t_{n-1} . Expresado matemáticamente, un proceso de Markov está definido por la ecuación:

$$P_n(y_1 t_1, y_2 t_2, \dots, y_{n-1} t_{n-1} | y_n t_n) = P_2(y_{n-1} t_{n-1} | y_n, t_n) \tag{A2.2.5}$$

Es claro que todas las W_n para $n > 2$ se puedan encontrar, cuando únicamente W_2 es conocida. Uno deduce por ejemplo facilmente de (A2.2.5) que

$$W_3(y_1 t_1, y_2 t_2, y_3 t_3) = \frac{W_2(y_1 t_1, y_2 t_2) W_2(y_2 t_2, y_3 t_3)}{W_1(y_2 t_2)},$$

Y así sucesivamente. Es claro, por lo tanto, que W_2 o P_2 describen completamente el proceso. *Sin embargo, uno no puede tomar a P_2 como una función arbitraria de sus variables.* Además de las relaciones generales (A2.2.1 – A2.2.4) requieren que

$$P_2(y_1 | y_2, t) = \int dy P_2(y_1 | y, t_0) P_2(y | y_2, t - t_0), \quad (\text{A2.2.6})$$

para todos los valores de t_0 entre cero y t . Esto se sigue de la definición de un proceso de Markov y es llamada *la ecuación de Chapman-Kolmogorov-Smoluchowski*. Esta es la ecuación básica para la teoría. De esta manera uno puede continuar. Para finalizar esta parte mencionemos el tratamiento de procesos no-markovianos en esta teoría.

Es claro que la próxima clase de procesos estocásticos será completamente descrita dando W_3 . Sin embargo, en las aplicaciones físicas hay muy pocos ejemplos estudiados para tales procesos de mayor orden. Muy a menudo, cuando un proceso es *no-markoviano*, uno puede considerarlo como una clase de “proyección” de un proceso de Markov más complicado. Además de y , uno considera entonces otra variable z (la cual puede ser, por ejemplo, dy/dt o alguna otra coordenada del sistema) y puede ocurrir que para las dos variables y y z combinadas, el proceso sea entonces markoviano, tal que

$$P_2(y_1 z_1 | y_2 z_2, t) = \int \int dy dz P_2(y_1 z_1 | yz, t_0) P_2(yz | y_2 z_2, t - t_0).$$

De esta manera, acordamos definir el orden de un proceso de Markov, como el número de variables en que es necesario descomponer un proceso aleatorio, tales que al combinarlas el proceso sea Markoviano. De hecho, la $W_2(y_1 y_2 t)$ que uno obtiene por integración de $W_2(y_1 z_1 y_2 z_2 t)$ sobre z_1 y z_2 en general no será un proceso de Markov, y uno puede decir que esto se debe al hecho de que uno no tiene una descripción suficientemente completa del problema. El hecho de que sea posible encontrar las variables apropiadas z_1, z_2, \dots (estas pueden ser más de una) tal que el proceso, completamente descrito en estas variables, sea un proceso de Markov, dependerá de las “causas físicas” del fenómeno considerado.

En la sección (A2.4) se ilustra con cierto detalle lo que hemos mencionado hasta aquí. Veremos que un caminante al azar persistente requiere para su descripción de dos variables

a y b , que obedecen un proceso de Markov pero al reducir las a una sola variable se obtiene una ecuación no-markoviana.

A2.3 ECUACIONES MAESTRAS GENERALIZADAS.

Ecuaciones lineales muy generales para la densidad de probabilidad son la ecuación maestra y la ecuación maestra generalizada [3-7]. Si la variable x toma únicamente valores discretos, la ecuación maestra tiene la forma [3]

$$\frac{\partial W_n}{\partial t} = \dot{W}_n = \sum_m [w(m \rightarrow n)W_m - w(n \rightarrow m)W_n]. \quad (A2.3.1)$$

En (A2.3.1) W_n es la probabilidad de que la variable aleatoria x tome el valor entero n y $w(m \rightarrow n)$ es la probabilidad de transición por unidad de tiempo m a n , la cual debe ser positiva. Para una variable continua, la suma debe ser reemplazada por una integral, es decir,

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \dot{W}(x, t) = \int [w(x' \rightarrow x)W(x', t) - w(x \rightarrow x')W(x, t)] dx'. \quad (A2.3.2)$$

Esta ecuación se puede obtener a partir de (A2.2.3), aquí reescrita en forma explícita para la variable x ,

$$W(x, t) = \int P(x', t' | x, t) W(x', t') dx' \quad (A2.3.3)$$

En esta ecuación reemplazamos $t \rightarrow t + \Delta t$ y $t' \rightarrow t$ ($\Delta t = t - t'$), tenemos

$$W(x, t + \Delta t) = \int P(x', x, \Delta t) W(x', t) dx' \quad (A2.3.4)$$

Ahora desarrollamos el lado izquierdo de esta ecuación en Δt y mantenemos los primeros dos términos. Suponemos que existe el límite

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} P(x', x, \Delta t) = w(x' \rightarrow x) \quad (A2.3.5)$$

que determina la razón de cambio de la probabilidad de transición. Notemos que la probabilidad de transición tiene las siguientes propiedades:

$$\int P(x, t | x', t') dx' = 1 \quad P(x, x', \Delta t) = \Delta t w(x \rightarrow x')$$

En la segunda propiedad usamos el límite (A2.3.5) y mantenemos únicamente el término principal en el desarrollo en Δt . Tomando en cuenta estas propiedades, transformamos transformamos el primer término en el desarrollo en Δt en el lado izquierdo de (A2.3.4):

$$W(x, t) = \int P(x, x', \Delta t) dx' W(x, t) = \Delta t \int w(x \rightarrow x') dx' W(x, t). \quad (\text{A2.3.6})$$

Ahora usamos (A2.3.5) y (A2.3.6) para convertir a la ecuación (A2.3.4) en la ecuación maestra deseada, a saber,

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \dot{W}(x, t) = \int [w(x' \rightarrow x)W(x', t) - w(x \rightarrow x')W(x, t)] dx'. \quad (\text{A2.3.2})$$

La probabilidad a un tiempo posterior está completamente determinada por la probabilidad al tiempo $t = t_0$; es decir el proceso descrito por (A2.3.1) es un proceso de Markov.

Una forma especial de la ecuación maestra (A2.3.2) es la ecuación de Fokker-Planck para una variable x . Para hacer redefinimos las probabilidades de transición en términos de $\xi = x - x'$, el tamaño del salto. Así se tiene que $x' = x - \xi$, y llegamos a

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \int [w(x - \xi)W(x - \xi, t) - w(x, \xi)W(x, t)] d\xi.$$

Desarrollando el lado derecho de esta ecuación en potencias de ξ se obtiene el desarrollo

$$\frac{\partial W(x, t)}{\partial t} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-1)^{\nu}}{\nu!} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^{\nu} D^{(\nu)}(x) W(x, t) \right]$$

donde $D^{(\nu)}$ son los momentos de probabilidad de salto definidos como

$$D^{(\nu)} = \int_{-\infty}^{\infty} \xi^{\nu} w(x, \xi) d\xi.$$

Quedandonos con los primeros dos términos de este desarrollo se obtiene la ecuación de Fokker-Planck, como una ecuación de la ecuación maestra, dada explícitamente por

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \left[-\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)} \right] W, \quad (\text{A2.3.7})$$

donde $D^{(2)}(x) > 0$ es llamado el coeficiente de difusión y $D^{(1)}(x)$ es el coeficiente de deriva, los cuales pueden depender del tiempo.

Una forma de generalizar la ecuación maestra es la siguiente [8]

$$\dot{W}(x, t) = \int_{-\infty}^t \left[\sum_m w(n \rightarrow m, t - t') W_m(t') - \sum_m w(m \rightarrow n, t - t') W_n(t') \right] dt'. \quad (\text{A2.3.8})$$

Esta ecuación es conocida como la ecuación maestra generalizada. En esta ecuación el cambio de la probabilidad no depende únicamente de la probabilidad al tiempo t , sino también de la historia previa. Las probabilidades previas entran con la función de peso $w(n \rightarrow m, t - t')$ que es llamada la función memoria. El caso continuo de (A2.3.8) es

$$\dot{W}(x, t) = \int_{-\infty}^t \int \left[w(x' \rightarrow x, t - t')W(x', t') - w(x \rightarrow x', t - t')W(x, t') \right] dx' dt'. \quad (\text{A2.3.9})$$

Reescribiendo esta ecuación con los cambios $W(x, t) \rightarrow p(x, t)$ se tiene la ecuación

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \int_0^t \int_{x'} [\omega(x' \rightarrow x, t - t')p(x', t') - \omega(x \rightarrow x', t - t')p(x, t')] dx' dt'. \quad (\text{A2.3.10})$$

Las ecuaciones maestras que tienen la forma de la ecuación (A2.3.10) han sido deducidas en distintos contextos en forma físicos a partir de diferentes modelos mesoscópicos por medio del método de operadores de proyección [4-6]. Por el momento no estamos interesados en estos resultados, sino en considerar propiamente a la ecuación (A2.3.10) para caracterizar ciertos procesos estocásticos.

Veamos como es posible obtener una ecuación tipo telegrafista a partir de (A2.3.10). Si la función de memoria se puede expresar como [8]

$$\omega(x \rightarrow x', t - t') = \omega(t - t')W(x' \rightarrow x), \quad (\text{A2.3.11})$$

donde

$$W(x' \rightarrow x) = \int \omega(x' \rightarrow x, t - t') dt', \quad t \rightarrow \infty \quad (\text{A2.3.12})$$

es la razón de salto granulamiento grueso y la función de relajamiento $\omega(t)$ tiene una forma exponencial,

$$\omega(t - t') = \tau^{-1} \exp[-(t - t')/\tau], \quad (\text{A2.3.13})$$

entonces se puede mostrar que la ecuación (A2.3.10) se reduce a la ecuación

$$\tau \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \frac{\partial p}{\partial t} = \int [W(x' \rightarrow x)p(x', t) - W(x \rightarrow x')p(x, t)] dx'. \quad (\text{A2.3.14})$$

que es conocida como la ecuación maestra tipo telegrafista (EMT).

A partir de (A2.3.14) es posible obtener una ecuación tipo Fokker-Planck "hiperbólica". Seguiremos el formalismo de Klimontovich [10]. Sea

$$W(x \rightarrow x') = W^s(x \rightarrow x') + W^a(x \rightarrow x') \quad (\text{A2.3.15})$$

donde

$$W^s(x \rightarrow x') = W^s(x' \rightarrow x) \quad W^a(x \rightarrow x') = -W^a(x' \rightarrow x).$$

Sustituyendo (A2.3.15) en (A2.3.14) y agrupando términos se obtiene

$$\begin{aligned} I &\equiv \int [W(x' \rightarrow x)p(x', t) - W(x \rightarrow x')p(x, t)]dx' \\ &= \int \{W^s(x' \rightarrow x)[p(x', t) - p(x, t)] - W^a(x \rightarrow x')[p(x', t) + p(x, t)]\}dx' \quad (\text{A2.3.16}) \end{aligned}$$

Suponiendo que la probabilidad de transición,

$$W^{s,a}(x \rightarrow x') = W^{s,a}\left(x - x'; \frac{x' + x}{2}\right) = W^{s,a}\left(\Delta x; \frac{x - \Delta x}{2}\right)$$

con $\Delta x = x - x'$. Nuevamente, sustituyendo estas ecuaciones en (A2.3.16), y expresando todos los términos en función de x y Δx se tiene,

$$\begin{aligned} I = \int \left\{ W^s\left(\Delta x; \frac{x - \Delta x}{2}\right) \left[p(x + \Delta x, t) - p(x, t) \right] \right. \\ \left. - W^a\left(\Delta x; \frac{x - \Delta x}{2}\right) \left[p(x + \Delta x, t) + p(x, t) \right] \right\} d(\Delta x) \end{aligned}$$

si en esta ecuación desarrollamos todas las expresiones en potencias de Δx hasta segundo orden, reagrupamos términos y definimos,

$$A(x) = \int (\Delta x) W^a(\Delta x, x) d(\Delta x)$$

y

$$D(x) = \int \frac{(\Delta x)^2}{2} W^s(\Delta x, x) d(\Delta x),$$

obtenemos finalmente,

$$\tau \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [A(x)p(x, t)] + \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial p}{\partial x} \right] \quad (\text{A2.3.17})$$

La ecuación (A2.3.17) tiene una forma muy parecida a la ecuación (2.3.6) del capítulo anterior.

Lo que es importante señalar aquí, es que a partir de una ecuación maestra generalizada, que es no markoviana, se obtiene una ecuación tipo telegrafista usando *una función de memoria temporal exponencial*. Esto es importante, ya que cuando se realiza un suavizado en el tiempo a los procesos de Markov vía una memoria exponencial, la ecuación de movimiento es de tipo hiperbólico.

REFERENCIAS.

- [1] Olivares-Robles, M.A., García-Colín, L.S., *J. Non-Equilib. Thermodyn.* **21** (1996), 361.
- [2] Weymann, H. D., *Am. J. Phys.*, **35** (1965), 488.
- [3] N.G. van Kampen, *Adv. Chem. Phys.* **34**, 245 (1976).
- [4] I. Prigogine, P. Résibois, *Physica* **24**, 795 (1958).
- [5] S. Nakajima, *Prog. Theor. Phys.* **20**, 948 (1958).
- [6] R.W. Zwanzing, *J. Chem. Phys.* **33**, 1338 (1960).
- [7] V.M. Kenkre, In *Statistical Mechanics and Statistical Methods in Theory and Applications*, ed. by U. Landmann (Plenum, New York 1977) p.441
- [8] M.O. Vlad, J. Ross, *Phys. Lett. A***184**, 403 (1994).
- [9] I. Prigogine, P. Résibois, *Physica* **27**, 629 (1961).
- [10] Yu.L. Klimontovich, *Physica A* **163**, 515 (1990).

CAPÍTULO 3

LA INVALIDEZ DE LA ECUACIÓN DE DIFUSIÓN DEL TELEGRAFISTA EN 2D Y 3D PARA SÓLIDOS CRISTALINOS.

Usamos un análogo clásico de la teoría de dispersión cuántica de la matriz S para estudiar la difusión mesoscópica clásica en sólidos cristalinos isotrópicos. Las colisiones individuales incluyen probabilidades de dispersión de transmisión, reflexión, y lateral. El proceso estocástico resultante es un proceso de Markov de segundo orden en el espacio fase, el cual se conoce en la literatura como una caminata al azar persistente en dos y tres dimensiones 2D(3D). En contraste, con el caso unidimensional 1D, en el límite continuo, la densidad total en 2D y 3D no satisface la ecuación de difusión del telegrafista. Nosotros explicamos este hecho deduciendo la ecuación de Maxwell-Cattaneo en el caso de procesos discretos de difusión. Encontramos que la memoria inercial, la cual proporciona una dirección preferencial hacia adelante, rompe la simetría $x - y$.

3.1 INTRODUCCION.

En el capítulo anterior hemos discutido “in extenso” las diferentes deducciones e interpretaciones que se han hecho en la literatura sobre la ecuación del telegrafista. Esta discusión todavía no esclarece del todo la metodología seguida en la ref.[1], mencionada en el cap.1, para obtener la ecuación maestra a partir de las ideas sobre procesos irreversibles basadas en hipótesis de tipo estocástico (M.S.Green). Con objeto de poder evaluar con más precisión la naturaleza y validez de esta ecuación vamos a estudiar en este y el capítulo subsecuente su origen microscópico pero en un modelo un tanto simple. Esto nos permitirá entender con mayor claridad cómo la difusión macroscópica surge de los principios básicos de la mecánica cuántica.

En esta sección argumentaré matemáticamente la diferencia entre el modelo de caminante al azar ordinario (aquí referido como RW) y caminante al azar persistente (referido como PRW). El caminante al azar persistente difiere del caminante al azar ordinario en que el elemento probabilístico usado en cada paso es la probabilidad de continuar moviéndose en una dirección dada, mas que la probabilidad de moverse en una dirección independiente de aquella que tenía en el paso precedente inmediato. Por esta razón se dice que el proceso aleatorio permanece siendo markoviano pero de segundo orden más que de primer orden. Esta afirmación se aclarará más adelante.

3.1.1 CAMINANTE AL AZAR ORDINARIO.

Un enfoque para describir la difusión en una red, es el proceso llamado caminata al azar (Aquí referido como RW) o caminante al azar ordinario [1,2]. El modelo tradicional de la difusión, usando RW, es un *proceso de Markov* en el espacio de configuración. Sea $p(x, t)$ la distribución de probabilidad de la posición x ($x = 0, \pm l, \pm 2l, \dots$) para una partícula difusiva al tiempo t ($t = 0, \tau, 2\tau, \dots$). Suponiendo una caminata al azar ordinaria en una red, la probabilidad $p(x, t)$ satisface esta simple relación de recurrencia

$$p(x, t + \tau) = \frac{1}{2}p(x - l, t) + \frac{1}{2}p(x + l, t). \quad (3.1.1.1)$$

Aquí, τ y l son el “el tiempo de salto” y la “longitud de salto”, respectivamente. A partir de la ecuación (3.1.1.1) se tiene que: i) Los factores $1/2$ en la ecuación son las probabilidades de salto isotrópicas para moverse a la derecha o a la izquierda. ii) La ecuación (3.1.1.1) tiene esa estructura debido a que ignoramos donde se encontraba el caminante al tiempo t . Por esta razón debemos considerar las dos posiciones posibles donde puede estar la partícula en el instante inmediato anterior. iii) Nótese que (3.1.1.1) es una ecuación que relaciona únicamente dos tiempos a saber, t y $t + \tau$; el presente determina el futuro. No hay memoria en el sistema. Finalmente, señalemos que la versión diferencial de (3.1.1.1), llamada ecuación de difusión, es una ecuación diferencial parabólica

$$\frac{1}{D} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad (3.1.1.2)$$

donde $D \equiv l^2/2\tau = v_0^2\tau/2$ es el coeficiente de difusión y $v_0 \equiv l/\tau$ es la velocidad media de las partículas. Esta ecuación después de desarrollar (3.1.1.1) en potencias de τ y l .

3.1.2 CAMINANTE AL AZAR PERSISTENTE. EL MODELO DE GOLDS- TEIN.

El transporte de partículas que se difunden en una red fué estudiado primeramente por Goldstein [3], usando el formalismo de caminata al azar persistente (PRW). Este formalismo le permite a uno incorporar una memoria inercial, entendida aquí como la tendencia del caminante de continuar moviéndose en la misma dirección que con aquella precedente inmediata.

Deduciremos la ecuación del telegrafista en una dimensión basados en las ecuaciones para el caminante al azar persistente en una red e indicaremos las hipótesis requeridas para el paso al límite continuo. Esta deducción esencialmente es aquella proporcionada por Goldstein [3].

Considere una caminata al azar en una red en la que en algún paso, el caminante está en el sitio j de la red se mueve a uno de sus dos sitios vecinos $j \pm 1$. Sin embargo, en lugar de especificar una probabilidad de moverse desde j a un punto vecino, especificamos la probabilidad de continuar moviéndose en la misma dirección que tenía en el paso anterior inmediato. Esta será denotada por α . Así, si el paso anterior inmediato se hizo de $j - 2$ a $j - 1$ la probabilidad de ocurra la transición $j - 1 \rightarrow j$ en presente paso es igual a α . Esta definición nos permite escribir más abajo un par de relaciones de recurrencia que describen la evolución del caminante al azar. Sea $a_n(j)$ la probabilidad de que el caminante al azar se encuentre en j en el paso n , llegando de $j - 1$ en el paso anterior y sea $b_n(j)$ la probabilidad de que el caminante al azar se encuentre en j en el paso n llegando de $j + 1$. Finalmente, sea $\beta = 1 - \alpha$. Esta consideraciones conducen al conjunto de relaciones, dadas por primera vez por Goldstein,

$$a_{n+1}(j) = \alpha a_n(j - 1) + \beta b_n(j - 1) \quad (3.1.2.1)$$

$$b_{n+1}(j) = \alpha b_n(j + 1) + \beta a_n(j + 1) \quad (3.1.2.2)$$

El parámetro α , que es una medida de la tendencia de la partícula a moverse en la misma dirección que en el paso anterior, representa la tendencia del movimiento a *persistir* en la misma dirección. Nótese que las ecuaciones (3.1.2.1) y (3.1.2.2) requieren de dos condiciones iniciales, $a_n(0)$ y $b_n(0)$, para generar $a_n(j)$ y $b_n(j)$ (éstas pueden considerarse como las condiciones correspondientes a una posición y velocidad inicial).

Para generar ecuaciones diferenciales parciales a partir de las dos últimas ecuaciones no solo es necesario escalar el espacio y el tiempo, sino también la probabilidad de persistencia

α . Definimos las variables continuas x y t escribiendo para cada una de ellas, $x = j\Delta x$ y $t = n\Delta t$, donde j y n toman valores discretos y $(\Delta x, \Delta t) \rightarrow (0, 0)$. Estas definiciones convierten a las ecuaciones para a y b en

$$a(x, t + 1) = \alpha a(x - 1, t) + \beta b(x - 1, t) \quad (3.1.2.3)$$

$$b(x, t + 1) = \alpha b(x + 1, t) + \beta a(x + 1, t) \quad (3.1.2.4)$$

Antes de seguir señalemos lo siguiente. Resolviendo las ecuaciones (3.1.2.3) y (3.1.2.4) para a (o para b) obtenemos la siguiente ecuación,

$$a(x, t + 1) = \alpha a(x - 1, t) + \alpha a(x + 1, t) - (\alpha - \beta)a(x, t - 1). \quad (3.1.2.5)$$

Nótese que esta ecuación, proveniente del caminante al azar persistente, se reduce al caso mas simple cuando se tiene $\alpha = \beta = 1/2$. Bajo esta condición la ecuación resultante es precisamente la ecuación del modelo de caminante al azar ordinario (ver ec.(3.1.1.1)). Cuando ocurre que $\alpha \neq \beta$, el proceso se rige por la ecuación (3.1.2.5), que relaciona tres tiempos $t - 1$, t y $t + 1$. Por tanto, para esta ecuación sí tiene sentido considerar un desarrollo a segundo orden en el tiempo (lo mismo ocurre para x). En este caso, el futuro de la partícula “recuerda” en el instante $t + 1$ donde se encontraba al tiempo t y $t - 1$. Este proceso tiene memoria, es decir es un proceso no markoviano. Nótese que la condición $\alpha \neq \beta$ expresa la memoria inercial de la partícula dispersada.

Regresando a las ecuaciones (3.1.2.3) y (3.1.2.4) para a y b notemos que se requieren dos hipótesis básicas de escalamiento para el caso continuo. La primera relaciona Δx y Δt ,

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} = v$$

y la segunda es una forma de escalar a α ,

$$\alpha = 1 - \frac{\Delta t}{2\tau}, \quad \Delta t \rightarrow 0$$

en la que τ es una constante, que tiene dimensiones de tiempo. Con estas relaciones de escalamiento y desarrollando (3.1.2.3) y (3.1.2.4) en potencias de Δt y Δx donde además consideramos $(x + 1 \rightarrow x + \Delta x)$ y $(t + 1 \rightarrow t + \Delta t)$ obtenemos el conjunto de ecuaciones acopladas,

$$\frac{\partial a}{\partial t} = -v \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{1}{2\tau}(b - a) \quad (3.1.2.6)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = v \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{1}{2\tau}(a - b) \quad (3.1.2.7)$$

Si resolvemos para b en términos de a y sus derivadas de la primera ecuación y sustituimos el resultado en la segunda ecuación encontramos que a satisface la ecuación del telegrafista unidimensional,

$$\tau \frac{\partial^2 a}{\partial t^2} + \frac{\partial a}{\partial t} = v^2 \tau \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}.$$

De la misma manera b también es solución de esta ecuación. Finalmente, ya que nuestra deducción está basada sobre una caminata al azar nos referiremos a la densidad de probabilidad $p(x, t)$ para la posición de la partícula al tiempo t . La densidad de probabilidad puede ser identificada con una concentración en el sentido de que no es negativa y se conserva en el sentido que satisface la condición de normalización,

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x, t) dx = 1.$$

La función $p(x, t)$ es la suma de las dos componentes definidas anteriormente, es decir,

$$p(x, t) = a + b$$

y ya que cada componente satisface una ecuación del telegrafista, también p debe satisfacer la misma ecuación. Señalemos que esta deducción, basada en el formalismo de caminata al azar, puede ser extendida a mas dimensiones, sin embargo la parte espacial de la ecuación obtenida en esta manera generalmente es mayor al segundo orden [4].

En este y el siguiente capítulo se abordará el estudio de la relación entre la ecuación del telegrafista y la difusión en sólidos cristalinos en dos y tres dimensiones, bajo el formalismo de caminante al azar persistente. Es importante hacer notar que el modelo que usaremos, en este formalismo, fue propuesto por S. Godoy y L.S. García-Colín (ver ref.[11]).

Como ya se hizo ver en el capítulo 2, el uso de la ecuación del telegrafista en teoría de transporte data desde 1951, después fue deducida por Goldstein [3], cuyo modelo fue expuesto en la sección anterior. Su establecimiento como una ecuación de transporte fue sutilmente discutida por Weymann [5] y sus aplicaciones a una amplia variedad de problemas, recientemente ha sido revisada por varios autores [4,6,7]. Recientemente, Masoliver y colaboradores [8-9] han señalado que en dos dimensiones una caminata al azar persistente describe un movimiento en el que en límite continuo no obedece a la ecuación del telegrafista en $2D$. Además, ellos han conjeturado que no es posible deducir la ecuación del

telegrafista en $2D$ y tampoco en $3D$ siguiendo el procedimiento de Goldstein, partiendo de una caminata al azar persistente y pasando al límite continuo.

En este capítulo, deseamos demostrar explícitamente esta última afirmación y además claramente señalar por qué la difusión Fickiana no es válida en $2D$ y en $3D$. De hecho ya que la probabilidad de transición hacia adelante y lateral son diferentes con respecto a la dirección elegida, las probabilidades de encontrar el caminante en un cierto punto de la red no son simétricas. El límite continuo de la caminata al azar persistente en $2D(3D)$ conduce a una ecuación tipo difusiva muy distinta a aquella derivada por Masoliver y compañía [8-9].

3.2 EL MODELO CLÁSICO DE LA CAMINATA AL AZAR PERSISTENTE EN 1D (1D-PRW).

Como ya indicamos en el capítulo 1, a partir del trabajo de Goldstein [3] conocemos que las ecuaciones de difusión mesoscópicas $1D$ pueden ser obtenidas usando una caminata al azar persistente unidimensional [4]. Entre los diferentes modelos $1D$ -PRW que existen en la literatura hay uno llamado caminata al azar cuántica (QRW) el cual se deduce directamente de la teoría de la matriz S de dispersión cuántica [10,11]. La dispersión a bajas energías (tunelaje) y energías por arriba de la barrera de potencial se describen indistintamente con coeficientes de transmisión y reflexión (T, R).

La teoría QRW describe un proceso difusivo coherente con interferencia, donde se toman en cuenta las dispersiones elásticas de paquetes de onda de energía promedio constante, en una red cristalina. En un artículo reciente [12] se demostró que si un promedio temporal se toma sobre las probabilidades cuánticas descritas en QRW, las contribuciones de interferencia cuántica pueden ser despreciables y obtenerse un conjunto de ecuaciones incoherentes (clásicas) para $1D$ -QRW. Este proceso incoherente deducido cuánticamente describe una sucesión de dispersores clásicos $1D$ en una red donde todas las partículas incidentes sobre cualquier barrera de potencial se dispersan con probabilidades hacia adelante (transmisión) y hacia atrás (reflexión) (T, R), respectivamente. La conservación de partículas demanda que $T + R = 1$. Usualmente $T \neq R$, y esto expresa la memoria inercial de las partículas dispersadas. Suponiendo que las partículas son descritas únicamente en la mitad de los valles entre las barreras de potencial, las ecuaciones clásicas de $1D$ -QRW deducidas cuánticamente pueden reescribirse relacionando las probabilidades incidentes clásicas $P_1(x, t)$ y $P_2(x + 1, t)$ con las correspondientes de salida $P_1(x + 1, t + 1)$

y $P_2(x, t + 1)$. Los subíndices en las probabilidades denotan la dirección de movimiento (1 = derecho, 2 = izquierdo). Las ecuaciones de 1D-PRW son,

$$\begin{pmatrix} P_1(x+1, t+1) \\ P_2(x, t+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T & R \\ R & T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1(x, t) \\ P_2(x+1, t) \end{pmatrix}. \quad (3.2.1)$$

La ecuación (3.2.1) describe un proceso clásico donde todas las partículas tienen una velocidad promedio $c \equiv \Delta x / \Delta t$. Teniendo energía constante, en 1D, la velocidad tiene únicamente dos valores: $\pm c$. El efecto de las colisiones elásticas es simplemente cambiar sus direcciones de movimiento. $P_1(x, t)$ y $P_2(x, t)$ describen la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición x al tiempo t , con velocidades positiva y negativa respectivamente. Así, el proceso 1D-PRW (3.2.1) describe en el espacio extendido una caminata aleatoria Markoviana con *grados de libertad internos*. Cada probabilidad individual P_1 y P_2 en la ec. (3.2.1) es un *proceso de Markov de segundo orden* [4]. En la ec. (3.2.1), para valores arbitrarios de R y T , el límite continuo $(\Delta x, \Delta t) \rightarrow (0, 0)$ tal que $\Delta x / \Delta t \equiv c$ se mantenga constante *no existe* [4]. No obstante, el límite continuo existe en el caso particular del “límite de dispersión débil” (WSL) donde, además de que $(\Delta x, \Delta t) \rightarrow (0, 0)$ con $\Delta x / \Delta t \equiv c$, los coeficientes (R, T) tienen que satisfacer las condiciones suplementarias: $R \equiv \Delta t / 2\theta \sim 0$, y $T = 1 - R \sim 1$, donde θ es un tiempo de relajación característico del sólido [4].

Las ecuaciones que describen la evaluación temporal de P_1 y P_2 en el 1D-WSL son

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + c \frac{\partial P_1}{\partial x} = \frac{1}{2\theta} (P_2 - P_1) \quad (3.2.2a)$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - c \frac{\partial P_2}{\partial x} = \frac{1}{2\theta} (P_1 - P_2) \quad (3.2.2b)$$

Las dos ecuaciones (3.2.2), pueden escribirse en términos de dos nuevas funciones, la densidad $\rho(x, t) \equiv P_1(x, t) + P_2(x, t)$, y su corriente asociada $J(x, t) / c \equiv P_1(x, t) - P_2(x, t)$; Éstas se encuentran que son

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0, \quad J = -D \frac{\partial \rho}{\partial x} - \theta \frac{\partial J}{\partial t}, \quad (3.2.3)$$

donde $D \equiv c^2 \theta$ es el coeficiente de difusión. La ec.(3.2.3a) describe la conservación de la masa, y la ec.(3.2.3b) es una ecuación del tipo Maxwell-Cattaneo [13]. Después de eliminar la corriente J en las ecs.(3.2.3) obtenemos una ecuación cerrada para la densidad 1D, la ecuación del telegrafista,

$$\frac{1}{c} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (3.2.4)$$

Igualmente, si uno no supone que el caminante al azar se mueve a velocidad constante, son posibles más tipos de ecuaciones de evolución [14].

En las secciones subsecuentes demostraremos, usando el análogo clásico de la teoría de dispersión de la matriz- S cuántica $2D$ (y $3D$), que en $2D$ (y en $3D$) las ecuaciones resultantes son: (i) Un proceso estocástico $2D$ ($3D$)-PRW, y (ii) en el WSL, en contraste con el caso $1D$, la ecuación de difusión para la densidad $\rho(x, y, t)$ *no está* dada por la versión $2D$ ($3D$) de la ec.(3.2.4). En otras palabras, al menos para nuestro modelo de dispersión de la matriz- S clásica de difusión, la ecuación del telegrafista análoga a la ec. (3.2.4) *no* es la ecuación correcta para describir la difusión mesoscópica clásica en $2D$ y $3D$.

Finalmente, nótese que para valores arbitrarios de (T, R) y manteniendo $\Delta x^2/\Delta t = \text{constante}$, (el mismo límite que toma toma la caminata al azar usual en una ecuación parabólica), también podemos tomar el límite continuo en la ecuación (3.2.1). Sin embargo al hacer así arribamos, lo mismo que en la ecuación parabólica, a un proceso difusivo con una velocidad de propagación, al menos matemáticamente, infinita para la difusión. Este es un resultado no físico.

3.3 DIFUSIÓN EN UNA RED CUADRADA EN 2D.

Para iniciar, consideremos una red cuadrada isotrópica en $2D$. Suponiendo que las partículas dispersadas siguen la misma simetría de la red, describimos cualquier colisión clásica en $2D$ con tres parámetros (T, R, L) que son las probabilidades de dispersión hacia adelante, hacia atrás y lateral, respectivamente. La conservación de partículas demanda que $T + R + 2L = 1$.

En una red cuadrada tenemos cuatro densidades de probabilidad: $P_1(x, y, t)$, $P_2(x, y, t)$, $P_3(x, y, t)$ y $P_4(x, y, t)$ donde los subíndices denotan las direcciones de movimiento (1 = derecha, 2 = izquierda, 3 = arriba, 4 = abajo).

En un proceso de dispersión clásica $2D$, encontramos por inspección de la figura 1, que la relación más general entre las densidades de probabilidad, esta dada por,

$$\begin{pmatrix} P_1(x+1, y, t+1) \\ P_2(x-1, y, t+1) \\ P_3(x, y+1, t+1) \\ P_4(x, y-1, t+1) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} T & R & L & L \\ R & T & L & L \\ L & L & T & R \\ L & L & R & T \end{bmatrix} \begin{pmatrix} P_1(x-1, y, t) \\ P_2(x+1, y, t) \\ P_3(x, y-1, t) \\ P_4(x, y+1, t) \end{pmatrix}. \quad (3.3.1)$$

Nótese que en el modelo descrito por la ec.(3.3.1), ya que tenemos dispersión elástica y que *cualquier* proceso de dispersión tiene la misma trayectoria libre media, son posibles se

realizan dos desplazamientos cada uno del mismo tamaño ($|\Delta x| = |\Delta y|$) para la entrada y salida respectivamente. Esto implica que el tiempo medio de colisión Δt es el mismo en cualquier proceso de difusión. Desde un punto de vista estadístico, la ecuación (3.3.1) describe un proceso estocástico llamado caminata al azar persistente-2D (2D-PRW). Nótese que este es un proceso de Markov de *segundo orden* ya que en cualquier tiempo uno necesita tener dos piezas de información, la posición y dirección del viaje. La simetría de la matriz de dispersión refleja la isotropía del sólido. La ec.(3.3.1) representa un conjunto de ecuaciones recursivas para $P_i (i = 1, 2, 3, 4)$ cuya solución depende fuertemente de las condiciones iniciales y de las condiciones a la frontera.

3.4 EL LÍMITE DE DISPERSIÓN DÉBIL EN 2D (2D – WSL).

Así, para obtener el límite continuo de la ec. (3.3.1) consideremos, por ejemplo, la primera ecuación del conjunto, a saber

$$P_1(x, y, t + 1) = TP_1(x - 2, y, t) + RP_2(x, y, t) \\ + LP_3(x - 1, y - 1, t) + LP_4(x - 1, y + 1, t) \quad (3.4.1)$$

Si en la ec.(3.4.1) hacemos un desarrollo en serie de Taylor a primer orden en t , alrededor del punto (x, y, t) y después de algunas simplificaciones, obtenemos que

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} = -\frac{R}{\Delta t}(P_1 - P_2) + \frac{L}{\Delta t}(P_3 + P_4 - 2P_1) - T\frac{2\Delta x}{\Delta t}\frac{\partial P_1}{\partial x} \\ + L\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\frac{\partial P_3}{\partial x} - \frac{\Delta y}{\Delta t}\frac{\partial P_3}{\partial y} - \frac{\Delta x}{\Delta t}\frac{\partial P_4}{\partial x} + \frac{\Delta y}{\Delta t}\frac{\partial P_4}{\partial y}\right) \\ + O(\Delta^2/\Delta t) \quad (3.4.2)$$

Como claramente podemos ver de la ec.(3.4.2), análogamente al caso 1D, para valores arbitrarios de (T, R, L) , el límite continuo ($\Delta x = \Delta y = \Delta t \rightarrow 0$), manteniendo $\Delta x/\Delta t = \Delta y/\Delta t = \text{constante}$, no existe. Sin embargo, tenemos un límite continuo en el caso del límite de dispersión débil 2D (2D-WSL) donde, además de $\Delta x = \Delta y = \Delta t \rightarrow 0$, definimos una velocidad constante c y dos constantes de tiempo θ_R y θ_L tal que $(R, L) \rightarrow (0, 0)$ en tal manera que,

$$2\Delta x/\Delta t = 2\Delta y/\Delta t \equiv c, \quad R/\Delta t \equiv 1/(2\theta_R), \\ L/\Delta t \equiv 1/(2\theta_L), \quad T \rightarrow 1 \quad (3.4.3)$$

Aquí, θ_R y θ_L son dos tiempos de relajación característicos del sólido. Los tiempos están asociados con las dispersiones hacia atrás y laterales, respectivamente. En este límite ($2D$ -WSL), la ec.(3.4.2), la primera del conjunto que describe la difusión mesoscópica clásica, se transforma en

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + c \frac{\partial P_1}{\partial x} = -(P_1 - P_2) \frac{1}{2\theta_R} + (P_3 + P_4 - 2P_1) \frac{1}{2\theta_L} \quad (3.4.4a)$$

Análogamente, las otras tres ecuaciones que surgen a partir de la ec.(3.3.1) en este límite ($2D$ -WSL) están dadas por

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - c \frac{\partial P_2}{\partial x} = +(P_1 - P_2) \frac{1}{2\theta_R} + (P_3 + P_4 - 2P_2) \frac{1}{2\theta_L} \quad (3.4.4b)$$

$$\frac{\partial P_3}{\partial t} + c \frac{\partial P_3}{\partial y} = -(P_3 - P_4) \frac{1}{2\theta_R} + (P_1 + P_2 - 2P_3) \frac{1}{2\theta_L} \quad (3.4.4c)$$

$$\frac{\partial P_4}{\partial t} - c \frac{\partial P_4}{\partial y} = +(P_3 - P_4) \frac{1}{2\theta_R} + (P_1 + P_2 - 2P_4) \frac{1}{2\theta_L} \quad (3.4.4d)$$

En forma análoga al caso $1D$, reescribiremos las ecs.(3.4.4) en términos de las densidades $\rho_x \equiv P_1 + P_2$, $\rho_y \equiv P_3 + P_4$, y sus corrientes asociadas $J_x \equiv c(P_1 - P_2)$, $J_y \equiv c(P_3 - P_4)$. Sumando y restando las ecuaciones (3.4.4a-b) y (3.4.4c-d) encontramos que

$$\frac{\partial \rho_x}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = -(\rho_x - \rho_y) \frac{1}{\theta_L}, \quad (3.4.5a)$$

$$J_x = -c^2 \theta_R \frac{\partial \rho_x}{\partial x} - \theta_R \frac{\partial J_x}{\partial t}, \quad (3.4.5b)$$

$$\frac{\partial \rho_y}{\partial t} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = +(\rho_x - \rho_y) \frac{1}{\theta_L}, \quad (3.4.5c)$$

$$J_y = -c^2 \theta_R \frac{\partial \rho_y}{\partial y} - \theta_R \frac{\partial J_y}{\partial t} \quad (3.4.5d)$$

Individualmente, las ecs.(3.4.5a y c) expresan la no conservación de la masa que se mueve a lo largo de cada dirección. Cualquier dirección de movimiento tiene dispersión lateral y por lo tanto hay un flujo de partículas. Como es de esperarse en un sólido isotrópico, la pérdida de masa en cualquier dirección es exactamente la ganancia de masa para la dirección perpendicular, así la masa total del proceso se conserva. Claro está que, sumando (3.4.5a) y (3.4.5c) tenemos la conservación de masa total,

$$\frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} = 0 \quad (3.4.6)$$

Finalmente, las ecs.(3.4.5b y d) para las corrientes difusivas, exhiben más claramente la distinción del modelo (2D-WSL) comparado con el caso unidimensional (1D-WSL). Nótese que aún teniendo la derivada parcial temporal de la corriente misma (esta es una distinción de la difusión mesoscópica), sin embargo, la ley de Fick en 2D *no se* satisface. En la ecs.(3.4.5b y d) no tenemos el gradiente de la densidad *total* ($\rho_x + \rho_y$). Por lo tanto las ecs.(3.4.5b y d) describen un proceso de difusión anómalo y consecuentemente pueden ser consideradas como ecuaciones de Maxwell-Cattaneo anómalas. Este hecho tiene profundas consecuencias en la ecuación de difusión como veremos más adelante. Tratando de obtener la ecuación del telegrafista, eliminamos en las ecs.(3.4.5) las dos componentes de la corriente J_x y J_y y obtenemos la siguiente ecuación,

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2(\rho_x + \rho_y)}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \rho_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_y}{\partial y^2} \quad (3.4.7)$$

donde el coeficiente de difusión $D \equiv c^2 \theta_R$ es el mismo que en el caso 1D. Este sorprendente resultado de 2D-PRW, trivialmente extensible al caso 3D-PRW, muestra muy claramente que la difusión mesoscópica en 2D y 3D *no está* descrita por la ecuación del telegrafista. De hecho, la ec.(3.4.7) no es todavía una ecuación cerrada para la densidad total ($\rho_x + \rho_y$), y es en sí misma inútil. En este modelo PRW, en 2D y 3D, uno no puede pasar por alto la evaluación de la corriente difusiva $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ en el proceso de obtener la solución de la difusión mesoscópica para $\rho(\mathbf{r}, t)$. Lo que es muy importante comprender es que el conjunto de las cuatro ecuaciones simultáneas (3.4.5) para $(\rho_x, \rho_y, J_x, J_y)$ ahora vienen a ser las ecuaciones fundamentales para la difusión mesoscópica en 2D.

3.5 LA ECUACIÓN DE MAXWELL-CATTANEO ANÓMALA.

El límite continuo descrito en la sección anterior tiene el inconveniente de ser válido únicamente para el modelo WSL donde los coeficientes de dispersión satisfacen las propiedades $(T, R, L) \sim (1, 0, 0)$. Debido a esta dispersión débil, la solución de la ec.(3.4.5) describe, para un aglomerado inicial de partículas moviéndose en la misma dirección, un movimiento balístico dejando detrás una nube de partículas que se mueven hacia atrás y hacia los lados. Para tiempos cortos, la solución de WSL se parece más a la sublimación de un cometa que a un proceso difusivo.

En seguida, deducimos la ley de Fick sin tomar el WSL. Si lo que deseamos es conocer el coeficiente de difusión para valores arbitrarios de (T, R, L) , nos restringiremos propiamente al caso discreto. Manteniendo constantes los valores discretos de $\Delta x = \Delta y = \ell/2$, donde

ℓ es la constante de la red cuadrada, y manteniendo la definición de la velocidad $c \equiv 2\Delta x/\Delta t = 2\Delta y/\Delta t$, consideremos en la ec.(3.3.1) la primer ecuación para P_1 ; después de un desarrollo en serie de Taylor y manteniendo únicamente los términos de primer orden podemos escribir dicha ecuación como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1}{\partial t} = & -(P_1 - P_2) \frac{R}{\Delta t} + (P_3 + P_4 - 2P_1) \frac{L}{\Delta t} - Tc \frac{\partial P_1}{\partial x} \\ & - \frac{Lc}{2} \frac{\partial}{\partial x} (P_3 + P_4) - \frac{Lc}{2} \frac{\partial}{\partial y} (P_3 - P_4). \end{aligned} \quad (3.5.1)$$

A partir de la ec.(3.3.1), la segunda ecuación para P_2 , puede obtenerse análogamente, a saber

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_2}{\partial t} = & +(P_1 - P_2) \frac{R}{\Delta t} + (P_3 + P_4 - 2P_2) \frac{L}{\Delta t} + Tc \frac{\partial P_2}{\partial x} \\ & + \frac{Lc}{2} \frac{\partial}{\partial x} (P_3 + P_4) - \frac{Lc}{2} \frac{\partial}{\partial y} (P_3 - P_4). \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Restando la ec.(3.5.2) de la ec.(3.5.1) y substituyendo las probabilidades (P_1, P_2, P_3, P_4) para las densidades y las corrientes $(\rho_x, \rho_y, J_x, J_y)$ obtenemos después de algunas simplificaciones que,

$$J_x = -\frac{c^2 \Delta t}{2R + 2L} \frac{\partial}{\partial x} [T\rho_x + L\rho_y] - \frac{\Delta t}{2R + 2L} \frac{\partial}{\partial t} J_x. \quad (3.5.3a)$$

En una manera similar, a partir de la tercera y cuarta ecuación en (3.3.1), encontramos que,

$$J_y = -\frac{c^2 \Delta t}{2R + 2L} \frac{\partial}{\partial y} [T\rho_y + L\rho_x] - \frac{\Delta t}{2R + 2L} \frac{\partial}{\partial t} J_y. \quad (3.5.3b)$$

Las ecuaciones (3.5.3), válidas para valores arbitrarios de (T, R, L) , muestran el problema exacto con la difusión mesoscópica clásica en $2D$ (también en $3D$). Tan pronto como tenemos alguna memoria inercial ($T \neq L$), la ecuación de Fick no es válida. Lo que se tiene es un proceso de difusión anómalo con un coeficiente de difusión tensorial D . Podemos definir dos coeficientes de difusión: Un coeficiente paralelo D_{\parallel} y un coeficiente perpendicular D_{\perp} , donde

$$D_{\parallel} \equiv \frac{c^2 \Delta t T}{2R + 2L}, \quad D_{\perp} \equiv \frac{c^2 \Delta t L}{2R + 2L}. \quad (3.5.4)$$

Con esta notación podemos escribir la ecuación de Maxwell-Cattaneo anómala en $2D$ como

$$J_x = -\frac{\partial}{\partial x} (D_{\parallel} \rho_x + D_{\perp} \rho_y) - \theta_{2D} \frac{\partial}{\partial t} J_x, \quad (3.5.5a)$$

$$J_y = -\frac{\partial}{\partial y} (D_{\parallel} \rho_y + D_{\perp} \rho_x) - \theta_{2D} \frac{\partial}{\partial t} J_y, \quad (3.5.5b)$$

donde

$$\theta_{2D} \equiv \frac{\Delta t}{2R + 2L} = \frac{D_{\parallel}}{c^2 T} = \frac{D_{\perp}}{c^2 L} \quad (3.5.5c)$$

es el tiempo de relajación asociado a un proceso de difusión mesoscópico $2D$. A partir de la ec.(3.5.5) es claro que, debido a que $T \neq L$, las probabilidades de encontrar al caminante en cierto punto de la red no son simétricas. Esto explica porqué la simetría $x - y$ de la ecuación del telegrafista no es válida en el caso $2D$ continuo, donde en el $2D$ -WSL ciertamente tenemos $(T \sim 1) \neq (L \sim 0)$. Claramente, este resultado es extrapolable al caso $3D$.

3.6 LOS RESULTADOS DEL $3D$ -WSL

Los resultados anteriores para $2D$ pueden ser extendidos trivialmente al caso $3D$. Para una red cúbica simple, los tres coeficientes (T, R, L) satisfacen la condición de que $T + R + 4L = 1$. En este caso $3D$ tenemos seis densidades de probabilidad $P_i (i = 1, \dots, 6)$, y el resultado en el continuo en el $3D$ -WSL para la aparente ecuación del telegrafista es

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 (\rho_x + \rho_y + \rho_z)}{\partial t^2} + \frac{1}{D} \frac{\partial (\rho_x + \rho_y + \rho_z)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \rho_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho_z}{\partial z^2}. \quad (3.6.1)$$

donde $D \equiv c^2 \theta_R$.

Para valores arbitrarios de (T, R, L) el caso discreto proporciona, para la corriente difusiva $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ en $3D$, una ecuación Maxwell-Cattaneo anómala donde la componente típica J_x toma la forma,

$$J_x = -\frac{\partial}{\partial x} [D_{\parallel} \rho_x + D_{\perp} (\rho_y + \rho_z)] - \theta_{3D} \frac{\partial}{\partial t} J_x, \quad (3.6.2)$$

y el coeficiente de difusión D en $3D$, y el tiempo de relajación θ_{3D} son,

$$D_{\parallel} \equiv \frac{c^2 \Delta t T}{2R + 4L}, \quad D_{\perp} \equiv \frac{c^2 \Delta t L}{2R + 4L}, \quad \theta_{3D} \equiv \frac{\Delta t}{2R + 4L}. \quad (3.6.3)$$

A partir de la ecuación (3.6.2) vemos que tan pronto como distinguimos los coeficientes de dispersión $T \neq L$ hacia adelante y lateral, la simetría $x - y - z$ para la difusión se romperá.

Como una conclusión final debemos insistir en que la memoria inercial, que hace válida a la ecuación del telegrafista en $1D$, es la misma propiedad que impide su validez en $2D$ y $3D$. Las consecuencias de este resultado serán abordadas en el capítulo 3.

REFERENCIAS

- [1] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943).
- [2] E.W. Montroll, B.J. West, en *Fluctuation Phenomena*, editado por E.W. Montroll y J.L. Lebowitz (North-Holland, Amsterdam, 1979), pag. 61.
- [3] S. Goldstein, *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **IV**, 129 (1951).
- [4] G. H. Weiss, *Aspects and Applications of the Random Walk* (North Holland Publ. Co. Amsterdam, 1994).
- [5] H. Weymann, *Am. J. Phys.* **35**, 488 (1967).
- [6] L. S. García-Colín and M. A. Olivares Robles, *Physica A* **220**, 165 (1995).
- [7] D.D. Joseph and L. Preziosi, *Revs. of Mod. Phys.* **61**, 41 (1989).
- [8] J. Masoliver, J. M. Porrá and G. H. Weiss, *Physica A* **182**, 593 (1992).
- [9] J. Masoliver, J. M. Porrá and G. H. Weiss, *Physica A* **193**, 469 (1993).
- [10] S. Godoy and S. Fujita, *J. Chem. Phys.* **97**, 5148 (1992).
- [11] S. Godoy and F. Espinosa, *Phys. Rev. E*, **52**, 3381 (1995).
- [12] S. Godoy and L.S. García-Colín, *Phys. Rev. E*, **53**, 5779 (1996).
- [13] J. C. Maxwell, *The Collected Papers of J.C. Maxwell* edited by W.D. Niven (Dover New York (1965).
- [14] J. Masoliver, K. Lindenberg and G. H. Weiss, *Physica A* **157**, 891 (1989).

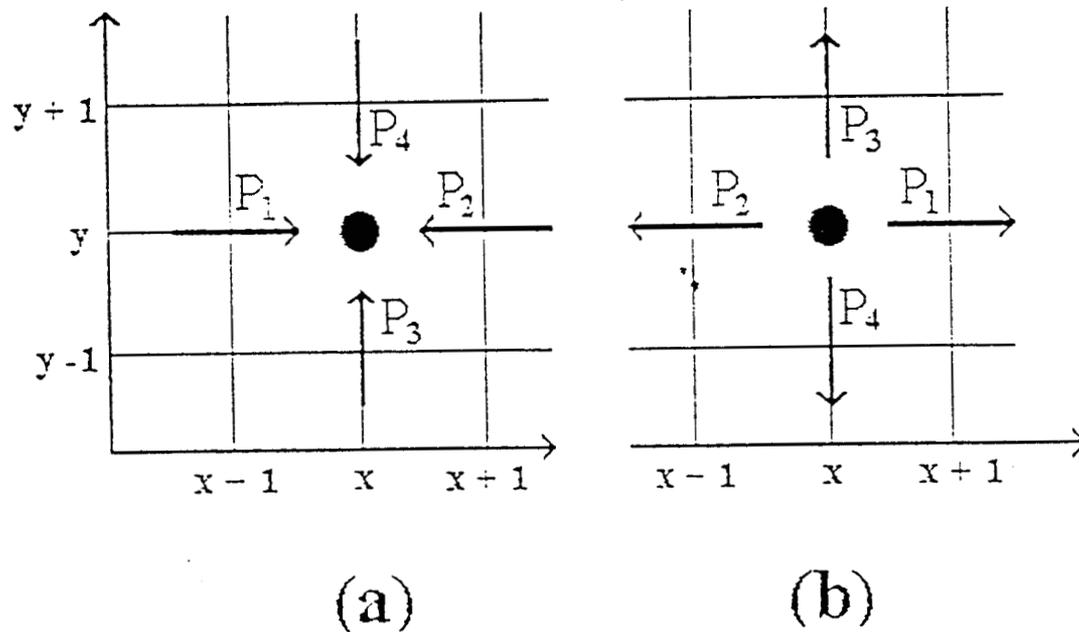


Figura 1 (a) entrada al tiempo (t) y (b) salida al tiempo $(t+1)$ para una red cuadrada 2D.

CAPÍTULO 4

CORRIENTES TRANSVERSALES EN SÓLIDOS CRISTALINOS MESOSCÓPICOS.

Usamos una caminata al azar cuántica para estudiar la difusión mesoscópica cuántica en redes isotrópicas cuadradas (y cúbicas). El proceso de dispersión individual incluye amplitudes de dispersión de transmisión, reflexión y lateral. En sorprendente contraste con el caso 1D, para difusión cuántica en una red, las corrientes cuánticas en 2D y en 3D satisfacen una ecuación tipo Maxwell-Cattaneo cuántica anómala con un coeficiente de difusión tensorial. Para las partículas de velocidad v_0 en 2D tenemos coeficientes de difusión paralelo $D_{\parallel} \equiv (v_0^2 \Delta t T)/(2R + 2L)$, y perpendicular $D_{\perp} \equiv (v_0^2 \Delta t L)/(2R + 2L)$, donde T , R y L son los coeficientes microscópicos de transmisión, reflexión y lateral respectivamente. Para electrones de conducción bajo un campo externo en sólidos de 2D y 3D las correspondientes corrientes paralela y perpendicular también son obtenidas.

4.1 INTRODUCCIÓN.

A partir del trabajo pionero de Landauer [1], quién mostró la relación entre la difusión de un sistema mecánico cuántico de partículas no interactuantes y el problema de dispersión asociado, varios autores han dado diferentes deducciones del coeficiente de difusión mesoscópico [2-7]. En particular, para un sólido cristalino en 1D, la caminata al azar cuántica (1D-QRW) ha sido usado como un modelo simple para estudiar la difusión mesoscópica cuántica unidimensional [8]. Para partículas difusivas moviéndose en una red, el correspondiente coeficiente de difusión de Landauer D_1 , obtenido usando 1D-QRW puede ser escrito como

$$D_1 = v_0 a_0 \frac{T}{2R}, \quad (4.1.1)$$

donde v_0 es la velocidad de las partículas, a_0 es la constante de la red y T , R son los coeficientes microscópicos de transmisión y reflexión, respectivamente, de las barreras de

potencial individuales de los átomos en la red. La gran idea de Landauer, de que la difusión (y conducción) en sólidos puede ser considerado como un problema de dispersión, ciertamente ha sido de gran importancia práctica al guiar nuestra intuición para el entendimiento de transporte cuántico en sistemas mesoscópicos. Siguiendo la deducción original de Landauer [9], una vez que conocemos el coeficiente de difusión D_1 , la conductividad mesoscópica cuántica σ_1 , y la conductancia $g_1 \equiv \sigma_1/a_0$, pueden obtenerse de manera directa con la ayuda de la relación de Einstein,

$$\sigma = \frac{ne^2}{k_B T} D, \quad (4.1.2)$$

donde n es la densidad de partículas y e es la carga. En particular, para un sistema de electrones de conducción en $1D$ en un metal, la ecuación (4.1.2) puede reescribirse en términos de la energía de Fermi y la velocidad (ϵ_F, v_F) como

$$\sigma_1 = \frac{n_1 e^2}{2 \langle \epsilon \rangle} D_1 = \frac{n_1 e^2}{2 \epsilon_F} v_F a_0 \frac{T}{2R}. \quad (4.1.3)$$

y ya que para electrones degenerados en el caso unidimensional la densidad está dada por $n_1 = 2p_F/\pi\hbar$, entonces la ec. (4.1.3) se reescribe como

$$g_1 \equiv \frac{\sigma_1}{a_0} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \frac{T}{R}. \quad (4.1.4)$$

Esta es la expresión que Landauer propuso en 1970 [9] para un conductor unidimensional en medio de dos reservorios de fase caótica (donde aparece disipación en cualquier lado). La fórmula (4.1.4) fue redescubierta en 1980 por Anderson y colaboradores [10], quién llamó la atención a la comunidad de científicos que trataban con fenómenos de transporte por proponer una generalización de la fórmula para el caso de varios canales y empleando para eso una formulación rigurosa de la teoría de escalamiento de localización. Sin embargo, este enfoque fue un éxito completo únicamente para el caso estrictamente unidimensional, lo cual, aunque teóricamente es muy interesante, tuvo poco impacto en el trabajo experimental de fenómenos de transporte cuántico. Para conductores desordenados, se han obtenido otras deducciones [11]. El propósito de este capítulo es extender la teoría QRW, arriba descrita, para el caso de difusión en sólidos cristalinos en $2D$ y $3D$. Mostramos que, en contraste sorprendente con el caso $1D$, las corrientes de difusión en $2D$ y $3D$ satisfacen una relación de Maxwell-Cattaneo anómala cuántica, teniendo un coeficiente de difusión tensorial con componentes paralela y perpendicular. La predicción de conductividades y corrientes transversales es entonces una consecuencia natural en la teoría QRW- $2D(3D)$.

4.2 EL MODELO DE CAMINATA AL AZAR CUÁNTICA 2D.

Vamos a considerar barreras de potencial localizadas en todos los puntos en una red cuadrada $2D$ (bidimensional) de constante $2a_0$. Entre potenciales vecinos tenemos valles de potencial horizontales y verticales. En tal red, paquetes de onda en $2D$ (bidimensionales) se mueven como partículas libres con velocidad v_0 en el punto medio de los valles, siguiendo la simetría de la red, y de cada valle al próximo por dispersión cuántica. Cualquier barrera de potencial (centro dispersor), y cualquier posición media del valle, tendrá coordenadas $(x = ia_0, y = ja_0)$ donde (i, j) son números enteros. Si los ejes coordenados están localizados en un centro dispersor, las coordenadas (i, j) de cualquier centro dispersor tendrán paridades (par, par). Los puntos medios de los valles tendrán, por el contrario, paridades (impar, par) y (par, impar) para valles horizontales y verticales, respectivamente. Paridades (impar, impar) corresponden a los centros de la red cuadrada donde, por hipótesis, no hay partículas. Nuestro proceso $2D$ -QRW define, en cualquier punto medio del valle $(i + j = \text{impar})$ y en algún tiempo discreto $t = n\tau$ (donde n es un entero positivo y τ es un tiempo de salto característico $\tau \equiv 2a_0/v_0$), una función de onda Ψ la cual es una superposición coherente de dos paquetes de onda ψ_i que describe un par de paquetes moviéndose en direcciones opuestas. Los paquetes de onda ψ_i están centrados en los puntos medios de los valles y se mueven con una velocidad de grupo v_0 , y horizontalmente o verticalmente de acuerdo a la clase de valle en la que ellas estén localizados. Por hipótesis, los paquetes de onda permanecerán acotados entre las barreras de la red a todo tiempo. Las funciones de onda, en el punto medio del valle, $\Psi(\mathbf{r}, t; i, j)$ están definidas por

$$\Psi(\mathbf{r}, t; i, j) \equiv \begin{cases} \psi_1(\mathbf{r}, t; i, j) + \psi_2(\mathbf{r}, t; i, j) & \text{si } (i, j) = (\text{impar}, \text{par}) \\ \psi_3(\mathbf{r}, t; i, j) + \psi_4(\mathbf{r}, t; i, j) & \text{si } (i, j) = (\text{par}, \text{impar}) \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (4.2.1)$$

donde hemos definido los subíndices (1,2,3,4) para denotar las cuatro direcciones de movimiento (1 = derecha, 2 = izquierda, 3 = arriba, 4 = abajo), y los paquetes de onda están dados por

$$\psi_1(\mathbf{r}, t; i, j) = A(i, j, n)e^{+ik_0x}G_1(x + v_0t - ia_0, y - ja_0, t), \quad (4.2.2a)$$

$$\psi_2(\mathbf{r}, t; i, j) = B(i, j, n)e^{-ik_0x}G_1(-x - v_0t + ia_0, y - ja_0, t), \quad (4.2.2b)$$

$$\psi_3(\mathbf{r}, t; i, j) = C(i, j, n)e^{+ik_0y}G_2(x - ia_0, y + v_0t - ja_0, t), \quad (4.2.2c)$$

$$\psi_4(\mathbf{r}, t; i, j) = D(i, j, n)e^{-ik_0y}G_2(x - ia_0, -y - v_0t + ja_0, t). \quad (4.2.2d)$$

donde

$$G_1(x, y, t) = \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} g_1(\mathbf{k})e^{-i\omega(\mathbf{k})t}e^{i[(k_1-k_0)x+k_2y]}dk_1dk_2 \quad (4.2.3a)$$

$$G_2(x, y, t) = \frac{1}{2\pi} \iint_{-\infty}^{+\infty} g_2(\mathbf{k})e^{-i\omega(\mathbf{k})t}e^{i[k_1x+(k_2-k_0)y]}dk_1dk_2 \quad (4.2.3b)$$

con $\omega(\mathbf{k}) \equiv \hbar(k_1^2 + k_2^2)/2m$, y $g_1(\mathbf{k})$, $g_2(\mathbf{k})$ son funciones reales, normalizadas, “agudas” en $\mathbf{k} = (k_0, 0)$ y $(0, k_0)$ respectivamente, con anchura $\Delta k_1\Delta k_2 > (\hbar/2a_0)^2$. A cualquier tiempo discreto $t = n\tau$, las amplitudes complejas (A, B, C, D) describirán los efectos de todas las dispersiones previas. Nótese que las amplitudes (A, B, C, D) están asociadas a paquetes de ondas moviéndose en direcciones $(1, 2, 3, 4) \equiv$ (derecha, izquierda, arriba, abajo) respectivamente.

Para un centro dispersor arbitrario localizado en (x, y) la conexión dinámica entre las amplitudes de entrada y salida está dada por la matriz- S , 4×4 , de dispersión cuántica, ver figura 1.

$$\begin{pmatrix} A(x+1, y, t+1) \\ B(x-1, y, t+1) \\ C(x, y+1, t+1) \\ D(x, y-1, t+1) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} & & & \\ & \mathbf{S}(k_0) & & \\ & & & \\ & & & \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A(x-1, y, t) \\ B(x+1, y, t) \\ C(x, y-1, t) \\ D(x, y+1, t) \end{pmatrix}. \quad (4.2.4)$$

Si pedimos para cualquier proceso de dispersión: (i) *conservación de probabilidad*, (ii) *invariancia ante inversión temporal*, y suponemos (iii) *un potencial de dispersión isotrópico*, y que la red es (iv) *invariante bajo rotaciones de $\pi/2$* , la matriz- S tiene que ser unitaria, simétrica y con simetrías

$$S_{11} = S_{22} = S_{33} = S_{44} \equiv t, \quad (4.2.5a)$$

$$S_{12} = S_{34} \equiv r \quad (4.2.5b)$$

$$S_{13} = S_{14} = S_{23} = S_{24} \equiv l \quad (4.2.5c)$$

donde los complejos (t, r, l) denotan amplitudes de dispersión hacia adelante, hacia atrás y lateral respectivamente. La ec. (4.2.4) puede entonces reescribirse como

$$\begin{pmatrix} A(x+1, y, t+1) \\ B(x-1, y, t+1) \\ C(x, y+1, t+1) \\ D(x, y-1, t+1) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} t & r & l & l \\ r & t & l & l \\ l & l & t & r \\ l & l & r & t \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A(x-1, y, t) \\ B(x+1, y, t) \\ C(x, y-1, t) \\ D(x, y+1, t) \end{pmatrix} \quad (4.2.6)$$

La condición de unitaridad demanda que

$$|t|^2 + |r|^2 + 2|l|^2 = T + R + 2L = 1 \quad (4.2.7)$$

donde (T, R, L) son los coeficientes de transmisión, reflexión y lateral respectivamente. La ec. (4.2.6), la cual, *para amplitudes complejas* (A, B, C, D) tiene la misma estructura matemática que un proceso de Markoff de caminata al azar de cuatro estados, define las ecuaciones dinámicas básicas de nuestro modelo QRW-2D.

4.3 LA DENSIDAD DE PROBABILIDAD CUÁNTICA EN 2D.

En seguida, queremos calcular la densidad de probabilidad $p(i, j, n)$ al tiempo $t = n\tau$ para encontrar una partícula en un valle arbitrario (i, j) . Ya que los paquetes no se superponen, podemos integrar la densidad de probabilidad $|\Psi(\mathbf{r}, t; i, j)|^2$ a lo largo de un valle particular (i, j) .

$$p(i, j, n) \equiv \iint_{\text{cell}(i, j)} |\Psi(\mathbf{r}, t; i, j)|^2 dx dy \quad (4.3.1)$$

Después de algebra directa encontramos que la densidad está dada por

$$p(i, j, n) = \begin{cases} |A(i, j, n)|^2 + |B(i, j, n)|^2 \equiv p_1 + p_2 \equiv \rho_x & (i, j) = (\text{impar}, \text{par}) \\ |C(i, j, n)|^2 + |D(i, j, n)|^2 \equiv p_3 + p_4 \equiv \rho_y & (i, j) = (\text{par}, \text{impar}) \\ 0 & \text{de otro modo.} \end{cases} \quad (4.3.2)$$

Como es de esperarse, para valles horizontales $(i, j) = (\text{impar}, \text{par})$, la densidad está formada por una superposición incoherente de probabilidades, moviéndose a la derecha y a la izquierda ($|A|^2 \equiv p_1, |B|^2 \equiv p_2$), y por lo tanto, podemos definir la densidad de movimiento horizontal $\rho_x \equiv p_1 + p_2$. Similarmente, para valles verticales $(i, j) = (\text{par}, \text{impar})$, tenemos una superposición de movimiento hacia arriba y hacia abajo ($|C|^2 \equiv p_3, |D|^2 \equiv p_4$), y podemos entonces definir la densidad de movimiento vertical $\rho_y \equiv p_3 + p_4$. Así, esto es semejante a un resultado clásico (incoherente), sin embargo, nótese que de acuerdo a la ec.(4.2.6) todas las amplitudes (A, B, C, D) a todo tiempo $t = (n+1)\tau$ están dadas por una superposición lineal *coherente* de las cuatro amplitudes, evaluadas a un tiempo previo $t = n\tau$. La magnitud cuadrada en (4.3.2) producirá una

interferencia cuántica, como mostramos en seguida. Sustituyendo la ec. (4.2.6) en la ec. (4.3.2) encontramos, por ejemplo, para A

$$|A(i, j, n+1)|^2 \equiv p_1(i, j, n+1) = |tA(i-2, j, n) + rB(i, j, n) + lC(i-1, j-1, n) + lD(i-1, j+1, n)|^2 \quad (4.3.3)$$

Trivialmente, a partir de la ec.(4.3.3) encontramos que la densidad cuántica que se mueve a la derecha, $p_1(i, j, n+1)$ tiene dos partes: una parte incoherente $P_1(i, j, n)$ y una contribución de interferencia $I_1(i, j, n)$.

$$p_1(i, j, n+1) = P_1(i, j, n) + I_1(i, j, n) \quad (4.3.4)$$

donde,

$$P_1(i, j, n) \equiv Tp_1(i-2, j, n) + Rp_2(i, j, n) + Lp_3(i-1, j-1, n) + Lp_4(i-1, j+1, n) \quad (4.3.5a)$$

y por otra parte,

$$\begin{aligned} I_1(i, j, n) \equiv & tr^*A(i-2, j, n)B^*(i, j, n) + tl^*A(i-2, j, n)C^*(i-1, j-1, n) + \\ & tl^*A(i-2, j, n)D^*(i-1, j+1, n) + rl^*B(i, j, n)C^*(i-1, j-1, n) + \\ & rl^*B(i, j, n)D^*(i-1, j+1, n) + LC(i-1, j-1, n)D^*(i-1, j+1, n) + \\ & c.c. \end{aligned} \quad (4.3.5b)$$

De manera similar, para p_2, p_3 y p_4 tenemos la misma estructura: una parte incoherente y una parte de interferencia. La estructura general para las cuatro probabilidades cuánticas, con las partes incoherentes escritas explícitamente, está dada por

$$\begin{pmatrix} p_1(i+1, j, n+1) \\ p_2(i-1, j, n+1) \\ p_3(i, j+1, n+1) \\ p_4(i, j-1, n+1) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} T & R & L & L \\ R & T & L & L \\ L & L & T & R \\ L & L & R & T \end{bmatrix} \begin{pmatrix} p_1(i-1, j, n) \\ p_2(i+1, j, n) \\ p_3(i, j-1, n) \\ p_4(i, j+1, n) \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} I_1(i, j, n) \\ I_2(i, j, n) \\ I_3(i, j, n) \\ I_4(i, j, n) \end{bmatrix} \quad (4.3.6)$$

4.4 LA CORRIENTES DIFUSIVAS CUÁNTICAS EN 2D.

Para encontrar las corrientes cuánticas integramos la corriente de densidad a lo largo de un valle en cada celda (i, j)

$$j(i, j, n) = \iint_{\text{cell}(i, j)} \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] dx dy \quad (4.4.1)$$

Sustituyendo a partir de las ec.(4.2.2) y siguiendo el mismo procedimiento usado para calcular las probabilidades $p(i, j, t)$, después de algunas integraciones elementales obtenemos que

$$\mathbf{j}(i, j, n) = \begin{cases} j_x(i, j, n) = v_0(p_1 - p_2) & \text{si } (i, j) = (\text{impar}, \text{par}) \\ j_y(i, j, n) = v_0(p_3 - p_4) & \text{si } (i, j) = (\text{par}, \text{impar}) \\ 0 & \text{de otro modo.} \end{cases} \quad (4.4.2)$$

Como era de esperarse, la corriente de densidad de probabilidad en cada valle de una celda horizontal es justo la densidad de corriente que se mueve a la derecha menos la densidad de corriente que se mueve a la izquierda; un resultado similar es válido para valles verticales. Sustituyendo las probabilidades dadas por la ec.(4.3.6), en la ec.(4.4.2), nos damos cuenta que las corrientes cuánticas \mathbf{j} tendrán la misma estructura que las probabilidades cuánticas, esto es, ambas componentes de corriente, una incoherente \mathbf{J} y una de interferencia \mathbf{I} , estarán presentes.

$$\mathbf{j}(i, j, n) = \mathbf{J}(i, j, n) + \mathbf{I}(i, j, n). \quad (4.4.3)$$

4.5 LOS COEFICIENTES DE DIFUSIÓN DE LANDAUER EN 2D.

Para encontrar el coeficiente de difusión tomamos una aproximación del continuo en posición y en el tiempo. Primero, suponemos que el tiempo $t = n\tau$ es mayor que el tiempo de salto $\Delta t = \tau$. Segundo, también suponemos las distancias $\Delta x = \Delta y = a_0$ entre valles de celdas adyacentes de la red, son pequeñas comparadas con la posición ($x = ia_0, y = ja_0$). Por consiguiente, podemos hacer un desarrollo en serie de Taylor a primer orden alrededor de la posición (x, y, t) de las funciones $p(x \pm \Delta x, y \pm \Delta y, t + \Delta t)$. Nótese que aún, si mantenemos los términos de interferencia, este desarrollo rompe la invariancia de *reversibilidad temporal* de la corriente microscópica e introduce la irreversibilidad en las ecuaciones resultantes. Bajo estas dos hipótesis obtenemos para la corriente en particular j_x , por ejemplo, en un desarrollo en serie de Taylor a primer orden:

$$\begin{aligned} j_x(x, y, t) = & -\frac{v_0^2 \Delta t}{2R + 2L} \frac{\partial}{\partial x} [T\rho_x + L\rho_y] - \frac{\Delta t}{2R + 2L} \frac{\partial j_x}{\partial t} + \\ & \frac{v_0}{2R + 2L} \left\{ tr^* [AB^* - A^*B - v_0 \Delta t (B^* \frac{\partial A}{\partial x} + A^* \frac{\partial B}{\partial x})] + \right. \\ & \left. tl^* [A(C^* + D^*) - B(C^* - D^*)] - \right. \\ & \left. \frac{v_0 \Delta t}{2} (A + B) \frac{\partial}{\partial x} (C^* + D^*) - \frac{v_0 \Delta t}{2} (A - B) \frac{\partial}{\partial y} (C^* - D^*) \right\} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& r l^* [(B - A)(C^* - D^*) - \frac{v_0 \Delta t}{2} (A + B) \frac{\partial}{\partial x} (C^* + D^*) + \\
& \frac{v_0 \Delta t}{2} (A + B) \frac{\partial}{\partial y} (C^* - D^*)] - v_0 \Delta t L \frac{\partial}{\partial x} (C D^*) + c.c. \} \quad (4.5.1)
\end{aligned}$$

con una expresión similar para $j_y(x, y, t)$. La ec.(4.5.1) muestra que la corriente difusiva cuántica es una ecuación de Maxwell-Cattaneo [12-13] con interferencia. La parte incoherente de la ec.(4.5.1) muestra el problema con la corriente de difusión cuántica en $2D$ (also $3D$). Mientras tengamos alguna memoria inercial ($T \neq L$), la ley de Fick normal no es válida, (no tenemos el gradiente de la densidad total $\rho_x + \rho_y$). En lugar de eso, tenemos un proceso de difusión anómalo con un coeficiente de difusión tensorial D . Podemos definir dos coeficientes de difusión: el coeficiente paralelo D_{\parallel} y perpendicular D_{\perp} , donde

$$D_{\parallel} \equiv \frac{v_0^2 \Delta t T}{2R + 2L}, \quad D_{\perp} \equiv \frac{v_0^2 \Delta t L}{2R + 2L} \quad (4.5.2)$$

Con esta notación podemos reescribir las corrientes difusivas cuánticas $2D$, j_x y j_y como

$$j_x = -\frac{\partial}{\partial x} (D_{\parallel} \rho_x + D_{\perp} \rho_y) - \theta_{2D} \frac{\partial j_x}{\partial t} + I_x, \quad (4.5.3a)$$

$$j_y = -\frac{\partial}{\partial y} (D_{\parallel} \rho_y + D_{\perp} \rho_x) - \theta_{2D} \frac{\partial j_y}{\partial t} + I_y \quad (4.5.3b)$$

En forma vectorial para el caso $2D$, tenemos que

$$\mathbf{j} = -\nabla [D_{\parallel} \rho_{\parallel} + D_{\perp} \rho_{\perp}] - \theta_{2D} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} + \mathbf{I}, \quad (4.5.3c)$$

donde I_x y I_y son corrientes de interferencia cuánticas, y θ_{2D} es un tiempo de relajación asociado a una red en $2D$:

$$\theta_{2D} \equiv \frac{\Delta t}{2R + 2L} = \frac{D_{\parallel}}{v_0^2 T} = \frac{D_{\perp}}{v_0^2 L} \quad (4.5.4)$$

Nótese que este tiempo de relajación es el resultado efectivo de dos procesos de dispersión independientes (hacia atrás y lateral). En nuestro modelo $2D$ -QRW, R y L son los únicos mecanismos que conducen a un equilibrio difusivo. También nótese que en el límite $l \rightarrow 0$ ($L \rightarrow 0$), recuperamos el caso $1D$ para cada dirección (x, y)

$$j_x = -\frac{\partial}{\partial x} (v_0^2 \Delta t \frac{T}{2R} \rho_x) - \frac{\Delta t}{2R} \frac{\partial j_x}{\partial t} + I_x (l \rightarrow 0). \quad (4.5.5)$$

La ec.(4.5.3), con interferencias cuánticas, son la generalización cuántica de las ecuaciones de Maxwell-Cattaneo $2D$.

Claramente, los resultados arriba señalados son fácilmente extrapolados al caso $3D$ donde tenemos cuatro direcciones laterales, y la condición de normalización ahora es, $T + R + 4L = 1$. En el caso $3D$ también tenemos para la corriente difusiva $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, una ecuación de Maxwell-Cattaneo anómala con interferencia, donde la componente cuántica típica j_x toma la forma semejante a

$$j_x = -\frac{\partial}{\partial x}[D_{\parallel}\rho_x + D_{\perp}(\rho_y + \rho_z)] - \theta_{3D}\frac{\partial}{\partial t}j_x + I_x, \quad (4.5.6a)$$

o, en notación vectorial:

$$\mathbf{j} = -\nabla[D_{\parallel}\rho_{\parallel} + D_{\perp}\rho_{\perp}] - \theta_{3D}\frac{\partial\mathbf{j}}{\partial t} + \mathbf{I} \quad (4.5.6b)$$

de donde se encuentra que los coeficientes de difusión D , en $3D$, y el tiempo de relajación θ_{3D} son,

$$D_{\parallel} \equiv \frac{v_0^2 \Delta t F}{2R + 4L}, \quad D_{\perp} \equiv \frac{v_0^2 \Delta t L}{2R + 4L}, \quad \theta_{3D} \equiv \frac{\Delta t}{2R + 4L} \quad (4.5.7)$$

Nótese que la expresión de Maxwell-Cattaneo implica un comportamiento transitorio para \mathbf{j} con un kernel de memoria exponencial:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\theta} \int_{-\infty}^t \exp\left[-\frac{t-t'}{\theta}\right] \{\nabla[D_{\parallel}\rho_{\parallel} + D_{\perp}\rho_{\perp}](\mathbf{r}, t') - \mathbf{I}(\mathbf{r}, t')\} dt'. \quad (4.5.8)$$

Únicamente para tiempos posteriores mayores que θ , recuperamos una ley de Fick anómala con interferencia:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\nabla[D_{\parallel}\rho_{\parallel} + D_{\perp}\rho_{\perp}](\mathbf{r}, t) + \mathbf{I}(\mathbf{r}, t) \quad (4.5.9)$$

4.6 LAS CORRIENTES TRANSVERSALES DE CONDUCCIÓN.

Como mostramos en la sección I, el conocer ambas cosas, los coeficientes de difusión y la densidad en $2D$ y $3D$ nos permite, con la ayuda de la relación de Einstein (4.1.2), escribir inmediatamente la fórmula para la conductancia en $2D$ y $3D$ para los electrones de conducción en un metal. Usando las densidades para electrones degenerados: $n_2 = p_F^2/(2\pi\hbar^2)$ and $n_3 = p_F^3/(3\pi^2\hbar^3)$, el resultado final de la conductancia llega a ser:

$$g_1 = \frac{e^2 T}{\pi\hbar R}, \quad 1D \quad (4.6.1)$$

$$\left. \begin{aligned} g_{2\parallel} &= \frac{\exp^2}{2\pi\hbar^2} p_F \frac{T}{R+L} \\ g_{2\perp} &= \frac{\exp^2}{2\pi\hbar^2} p_F \frac{L}{R+L} \end{aligned} \right\} 2D \quad (4.6.2)$$

$$\left. \begin{aligned} g_{3\parallel} &= \frac{\exp^2}{2\pi^2\hbar^3} p_F^2 \frac{T}{R+2L} \\ g_{3\perp} &= \frac{\exp^2}{2\pi^2\hbar^3} p_F^2 \frac{L}{R+2L} \end{aligned} \right\} 3D \quad (4.6.3)$$

El significado de las ecs.(4.6.2) y (4.6.3) es que bajo un campo externo \mathbf{E} , a lo largo del eje x , algunos electrones se moverán paralelamente al campo contribuyendo con una corriente

$$j_x = \sigma_{\parallel} E_x \quad (4.6.4)$$

Pero, como una consecuencia inevitable de la dispersión isotrópica lateral, estarán presentes corrientes perpendiculares en todas las direcciones laterales

$$j_y = \pm\sigma_{\perp} E_x + \dots, \quad j_z = \pm\sigma_{\perp} E_x + \dots \quad (4.6.5)$$

Claramente, el valor promedio de estas corrientes transversales será cero. Nótese que debido a dispersiones laterales, siempre hay un intercambio dinámico de partículas que se mueven entre corrientes horizontales y verticales. El cálculo de corrientes transversales (4.6.5) es un cálculo completamente mecánico cuántico. Nuestra conjetura es que éstas corrientes cuánticas transversales de conducción, en la misma manera que las difusivas, deberían tener un comportamiento de decaimiento en el tiempo

$$-\frac{1}{\theta} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} \quad (4.6.6)$$

Esta conjetura tiene que ser probada.

REFERENCIAS

- [1] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [2] P.W. Anderson, *Phys. Rev. B* **23**, 4828 (1981).
- [3] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Liciardelo and T.V. Ramakrishna, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [4] P.W. Anderson, D.J. Thoules, E. Abrahams, and D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).
- [5] E.N. Economu and C.M. Sokoulis, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 618 (1981).
- [6] D.S. Fisher and E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **24**, 2978, (1981).
- [7] D.C. Langreth and E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **24**, 2978 (1981).
- [8] S. Godoy and S. Fujita, *J. Chem. Phys.* **97**, 5148 (1992).
- [9] R. Landauer, *IBM J. Res. Develop.* **1**, 233 (1957); R. Landauer, *Phil. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [10] P.W. Anderson, D.J. Thoules, E. Abrahams, and D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).
- [11] A.D. Stone and A. Szafer, *IBM J. Res. Develop.* **32**, 387, (1988).
- [12] J. C. Maxwell, *The Collected Papers of J.C. Maxwell* edited by W.D. Niven (Dover New York (1965).
- [13] C. Cattaneo, *Atti del Seminario Matematico e Fisico della Università di Modena* **3**. 3 (1948); *C.R. Acad. Sci. Paris* **247**, 431 (1958).

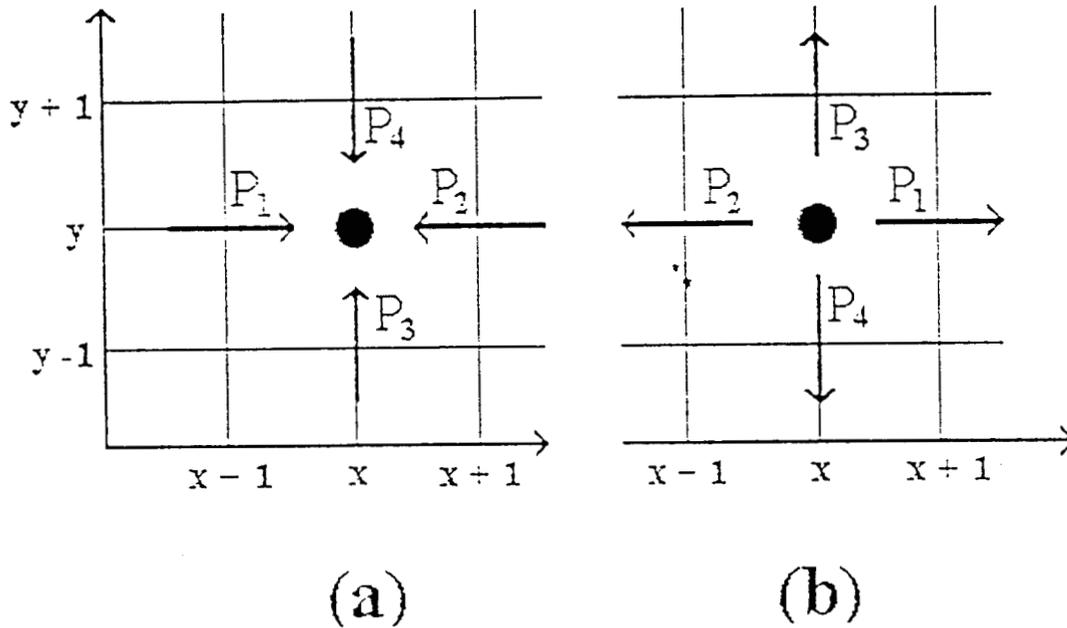


Fig. 1. (a) Entrada de amplitudes al tiempo (t) , y (b) salida de las mismas amplitudes al tiempo $(t + 1)$ para una red cuadrada $2D$.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

En este capítulo desamos enfatizar los principales resultados obtenidos en el presente trabajo. Mencionaré algunas perspectivas a futuro.

En la primera parte de este trabajo hemos estudiado el problema de cómo deducir correctamente ecuaciones cinéticas tipo telegrafista, usando las ideas de la mecánica estadística de procesos de transporte. Posteriormente, en una segunda parte del trabajo recurrimos al modelo propuesto por García-Colín y Godoy para estudiar la difusión mesoscópica en sólidos cristalinos bidimensionales (en $2D$). El modelo propuesto hace uso del formalismo de caminata al azar persistente (PRW). Resulta importante este estudio ya que, como mencioné anteriormente, una primera deducción de la ecuación del telegrafista surgió a partir de PRW. Nuestro objetivo en este capítulo final es proporcionar algunos resultados principales de la presente investigación y algunas perspectivas de la misma.

Primero hemos realizado una revisión crítica de los principales trabajos, incluyendo mi propuesta, en los que se deducen ecuaciones hiperbólicas. Entre nuestro resultados podemos destacar lo siguiente. El problema de deducir ecuaciones cinéticas de tipo hiperbólico aún está abierto. Los intentos propuestos hasta el momento presentan serias inconsistencias. Mi propuesta para deducir ecuaciones hiperbólicas en los procesos de transporte, es uno de los primeros esfuerzos que hace uso de las ideas de mecánica estadística de procesos dependientes del tiempo. He mostrado muy brevemente lo que se conoce respecto al uso de ecuaciones maestras generalizadas para deducir ecuaciones del telegrafista. No obstante, es importante considerar que en este trabajo se introducen variables “gruesas”, variables que dependen del espacio fase de las partículas del sistema, para caracterizar al sistema fuera de equilibrio. En este sentido éstas variables dan una descripción mesoscópica del proceso.

Una perspectiva importante de mi trabajo es la siguiente. Estudiar en este tipo de descripción del sistema qué papel juega o qué implicación tiene el hecho de usar en una ecuación maestra generalizada una memoria exponencial temporal para obtener ecuaciones de transporte hiperbólicas. He mencionado que este aspecto puede estar relacionado con el proceso de suavizado en el tiempo de las variables mesoscópicas, cuando éstas se modelan por procesos de Markov. En este sentido el parámetro τ en (A2.3.13), es muy importante.

Respecto a la segunda parte de este reporte, capítulos 3 y 4, los resultados pueden estar limitados por el modelo usado. En este sentido deseo señalar una limitación del modelo, que incluso restringe la validez de la ecuación del telegrafista, es el hecho de que solo consideramos difusión de partículas en la simetría de la red. Las partículas únicamente son dispersadas a lo largo de las direcciones horizontales o verticales de la red, pero nunca fuera de ellas. No obstante, entre los resultados principales damos cuenta que la ecuación de Fick (o ley de Fick) es una ecuación válida en el régimen clásico para tiempos grandes. En este punto debe ser fuertemente enfatizado que las teorías basadas en la ecuación de Fick (e incluso en la ecuación de Fokker-Planck) son teorías únicamente aproximadas. Éstas son válidas para tiempos t relativamente grandes. Estas limitaciones fueron reconocidas por Einstein y Smolouchowski. De hecho la ecuación de Fick (Fokker-Planck, Fourier, etc.) y en general aquellas ecuaciones tipo parabólicas, como hemos notado en este trabajo, proporcionan predicciones incorrectas a tiempos cercanos al inicio del proceso. A menudo estas limitaciones son omitidas (o desconocidas) por algunos autores quienes hacen énfasis, o subrayan que, por ejemplo, en el movimiento browniano, la velocidad de la partícula es infinita. Esta consecuencia de las ecuaciones parabólicas *es correcta, matemáticamente*. No obstante, esta conclusión paradójica es un resultado de extender la teoría más allá de los límites de aplicabilidad. Siempre que se aplica una teoría se hace con criterios de aplicabilidad.

Por otro lado, debido a las principales características del modelo usado en este reporte, a saber partículas que se difunden en una red debido a la presencia de un punto dispersor (o de una barrera de potencial), nos coloca en el punto de inicio para estudiar el comportamiento de partículas pequeñas, del tamaño del electrón, en regiones muy pequeñas, del orden unos cuantos radios atómicos. Aquí, hay una gran cantidad de trabajo por realizar en el futuro. Por ejemplo estudiar procesos de transporte en materiales mesoscópicos, nanoestructuras.