

Atrapamiento con Tasa de Absorción Finita: I- Densidades de Tiempo de Pausa

Miguel A. Ré y Carlos E. Budde

Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba
Ciudad Universitaria - (5010) - Córdoba - Argentina
e-mail: re@roble.fis.uncor.edu

El atrapamiento en una caminata aleatoria de tiempo continuo en redes puede plantearse como un problema de inhomogeneidad local. Este enfoque permite extender la solución del problema de atrapamiento con tasa de absorción finita a redes de dimensión arbitraria con dinámicas de difusión en general no markovianas. Presentamos esta solución en un conjunto de dos comunicaciones simultáneas.

El método de resolución requiere la modelación del sitio trampa en la red a partir de la especificación de las densidades de tiempo de pausa y tiempo de pausa para el primer salto que se determinan en la presente comunicación. Resulta en particular que la densidad de probabilidad para el primer salto no coincide en general con la correspondiente a un salto genérico, debido al vaciamiento parcial del sitio trampa ocasionado por el flujo de probabilidad que implica el atrapamiento. La coincidencia entre ambas densidades de probabilidad sólo se da bajo la hipótesis de sincronización con el primer salto: el instante $t = 0$ para la descripción coincide con una transición del caminante al sitio trampa. El tratamiento propuesto resulta igualmente aplicable al problema infinito como al problema semi-infinito.

Con los resultados aquí obtenidos se calculan en una segunda comunicación la densidad de probabilidad de atrapamiento, la tasa de reacción y la probabilidad de supervivencia para el problema de atrapamiento con tasa de absorción finita en caminatas aleatorias de tiempo continuo.

Trapping in a continuous time random walk can be solved as a problem with a local inhomogeneity. This approach lets us extend the solution of a finite absorption rate problem to lattices of arbitrary dimension and general non-markovian diffusion dynamics. We present simultaneously two communications with the solution to this problem.

The method of solution requires the waiting time density and waiting time density for the first jump to be specified for the trapping site. These magnitudes are determined in the present communication for a trap with a finite absorption rate. In particular, the waiting time density for the first jump differs from the general density even for a markovian random walk. This fact can be related to a probability loss at the trapping site due to the flux of trapping. Both waiting time densities: for the first jump and for a generic one only coincide at the trap position under the synchronized assumption for the description of the process $t = 0$ is chosen as the time when the walker jumps into the trapping site. The solution here presented is equally valid for both the infinite and semi-infinite lattice problem.

From the magnitudes here calculated, the Absorption Probability Density, the Reaction Rate and the Survival Probability are determined for the finite absorption rate trapping problem in CTRW.

Pacs N^o 05.40+j; 05.60.+w; 02.50+Ey; 82.20 Fd

1 INTRODUCCIÓN

Desde la aparición del trabajo pionero de Smoluchowski⁽¹⁾, el cálculo de tasas de reacción a partir de los parámetros microscópicos que caracterizan el sistema de partículas reactivas ha sido motivo de interés, en particular en el área de la mecánica estadística y la física cinética. Citamos en este sentido el resumen presentado por Weiss⁽²⁾ sobre algunas publicaciones de importancia en el área que han abierto nuevas perspectivas para su estudio.

Denominamos genéricamente "proceso de reacción" a uno en el cual dos especies A y B dan lugar en su encuentro a una tercera especie C . Cuando el des-

plazamiento de las especies A o B (o de ambas) está determinado por un proceso difusivo denominamos al problema como de "reacción mediado por difusión".

En el modelo de Smoluchowski se supone que la reacción se produce instantáneamente en el encuentro de las especies A y B . Denominaremos aquí a esta aproximación como modelo de "trampa perfecta". Collins y Kimball⁽³⁾ han propuesto una extensión al modelo de Smoluchowski incluyendo en la descripción un tiempo finito para la reacción sustituyendo la condición de contorno absorbente original por una condición radiativa en el encuentro de las especies reactivas. Denominaremos a este modelo de "trampa imperfecta". Este modelo introduce además

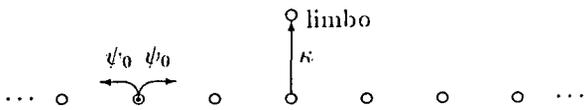


Figura 1: RW en una red unidimensional infinita en presencia de una trampa. El proceso de absorción puede modelarse como un salto del caminante al estado "limbo", del que no puede retornar. κ corresponde a la tasa de transición del sitio trampa al estado "limbo".

la suposición de que no todos los encuentros entre las partículas A y B dan lugar a una reacción, pudiendo estas separarse luego de un encuentro.

El esquema de reacciones químicas encuentra aplicaciones en diversos campos de la física⁽⁴⁾ o la biología^(5,6). El modelo de Glarum⁽⁷⁾ para relajación dieléctrica mediada por difusión de defectos constituye un ejemplo de aplicación, donde se propone una explicación alternativa para el apartamiento de la respuesta Debye⁽⁸⁾ en la relajación dieléctrica de aluros alcalinos. Este modelo puede plantearse como un problema de aniquilación del blanco⁽⁴⁾ en una caminata aleatoria de tiempo continuo (CTRW). En este esquema se han propuesto extensiones al modelo original a fin de incluir un tiempo de relajación finita en la descripción, utilizando el modelo de trampa imperfecta⁽⁹⁾ o un modelo alternativo denominado de trampa dinámica^(10,11).

La solución propuesta por Condat^(9,12) al problema de la trampa imperfecta en redes asume una CTRW en una red unidimensional con saltos a primeros vecinos y densidad de tiempo de pausa exponencial. Esta formulación se ilustra esquemáticamente en la figura 1 y la solución se obtuvo a partir de la ecuación maestra

$$\begin{aligned} \dot{P}_{s,s_0} &= \frac{\lambda}{2} [P_{s+1,s_0} + P_{s-1,s_0}] - \lambda P_{s,s_0} \quad s \neq s_1 \\ \dot{P}_{s_1,s_0} &= \frac{\lambda}{2} [P_{s_1+1,s_0} + P_{s_1-1,s_0}] - (\lambda + \kappa) P_{s_1,s_0} \end{aligned} \quad (1)$$

En esta ecuación P_{s,s_0} corresponde a la probabilidad de encontrar al caminante en la posición s al tiempo t , supuesto que en $t = 0$ se encontraba en s_0 . El sitio s_1 corresponde a la posición de la trampa.

Presentamos en un conjunto de dos comunicaciones un tratamiento del problema de trampa imperfecta en redes aplicable a un proceso de difusión en una red tridimensional con una densidad de probabilidad para el tiempo de pausa (WTD) no markoviana en general. El tratamiento propuesto permite resolver tanto el problema infinito⁽⁹⁾ como el problema semi-infinito⁽¹²⁾. La solución al problema con atrapamiento se basa en una extensión del formalismo de Montroll y Weiss⁽¹³⁾ incluyendo una inhomogeneidad local en la red, que representa la trampa^(14,10); quedando la solución expresada en función de la solución de la

CTRW sin trampas, que denominaremos el problema sin atrapamiento equivalente.

Nuestra solución resuelve además el problema de cómo incluir la contribución de la concentración inicial en el sitio trampa, a través de la WTD para el primer salto.

2 Descripción del Modelo

Supongamos una red infinita, cuya versión unidimensional se ilustra en la figura 1. Señalamos aquí no obstante que el método de resolución propuesto es válido para una red de dimensión mayor como surge del tratamiento que sigue. Suponemos además que a $t = 0$ existen distribuidos en la red un conjunto de caminantes con una concentración $c_0(\vec{s})$, en principio dependiente de la posición. Cada caminante puede efectuar una CTRW, caracterizada por una densidad de probabilidad de salto $\psi_0(\vec{s}, \vec{s}'; t)$ que determina que la probabilidad de que un caminante efectúe una transición del sitio \vec{s}' al sitio \vec{s} al tiempo t está dada por $\psi_0(\vec{s}, \vec{s}'; t) dt$ supuesto que el arribo al sitio \vec{s}' se produjo en $t = 0$. La definición anterior es válida para $\vec{s}' \neq \vec{s}_1$ un sitio regular de red distinto del sitio trampa. En esta comunicación determinamos la correspondiente densidad de probabilidad de transición desde el sitio trampa a otro sitio de red (probabilidad de escape) para trampa imperfecta. En el arribo al sitio trampa, un caminante puede además ser atrapado (efectuar una transición al estado de limbo) con una tasa de transición κ , abandonando la red.

En el modelo de Glarum la absorción del caminante representa la relajación del dipolo. El parámetro κ describe a su vez la probabilidad por unidad de tiempo de que se produzca la absorción mientras el caminante se encuentra en el sitio \vec{s}_1 . Señalamos además que en lo que al proceso en consideración respecta, el mismo finaliza en el instante de atrapamiento.

3 Densidad de Probabilidad de Salto

La resolución del problema de atrapamiento en presencia de una trampa imperfecta puede resolverse mediante el método de la inhomogeneidad local, que requiere la especificación de la densidad de tiempo de pausa en el sitio inhomogéneo denotado por \vec{s}_1 . Determinamos en esta sección la probabilidad de que la permanencia en el sitio trampa supere el tiempo t (SJP) y la WTD para el sitio trampa mediante una formulación alternativa de la CTRW.

Siguiendo a van Kampen⁽¹⁵⁾ definimos $B_{\vec{s}, \vec{s}'}(t)$ como la probabilidad por unidad de tiempo de que el caminante efectúe una transición de \vec{s}' a \vec{s} , siendo t el tiempo que ha transcurrido desde la llegada del caminante a \vec{s}' . En particular para un proceso con una WTD exponencial, la magnitud B resulta independiente del tiempo que el caminante ha permanecido en \vec{s}' .

Consideremos un sitio genérico en la red $\bar{s} \neq \bar{s}_1$. Podemos obtener la SJP correspondiente al sitio \bar{s} a partir de $B_{\bar{s}', \bar{s}}(t)$ de la ecuación

$$\Psi_0(\bar{s}; t) - \Psi_0(\bar{s}; t + dt) = \sum_{\bar{s}'} B_{\bar{s}', \bar{s}}(t) dt \Psi_0(\bar{s}; t) \quad (2)$$

que establece que la probabilidad de que la permanencia en un sitio \bar{s} supere el valor de t difiere de la probabilidad de que la permanencia supere el valor $t + dt$ en la probabilidad de que el caminante abandone el sitio \bar{s} entre t y $t + dt$, efectuando una transición a otro sitio de red. La solución de la ecuación diferencial que surge de (2) es

$$\Psi_0(\bar{s}; t) = \exp[-\Lambda(\bar{s}; t)] \quad (3)$$

con las definiciones

$$\lambda(\bar{s}; t) = \sum_{\bar{s}'} B_{\bar{s}', \bar{s}}(t) \quad \Lambda(\bar{s}; t) = \int_0^t dt' \lambda(\bar{s}; t') \quad (4)$$

y tomando en consideración que, dado que el arribo a \bar{s} se produjo en $t = 0$; $\Psi_0(\bar{s}; t = 0) = 1$.

La densidad de probabilidad de transición de \bar{s}' a \bar{s} al tiempo t , puede determinarse a su vez mediante

$$\psi_0(\bar{s}, \bar{s}'; t) = B_{\bar{s}, \bar{s}'}(t) \Psi_0(\bar{s}'; t) \quad (5)$$

Expresado alternativamente, B está definida por

$$B_{\bar{s}, \bar{s}'}(t) = \frac{\psi_0(\bar{s}, \bar{s}'; t)}{\Psi_0(\bar{s}'; t)} \quad (6)$$

Consideremos ahora el sitio trampa. En este caso la partícula abandonará la posición \bar{s}_1 mediante una transición a otro sitio de red, determinada por $B(\bar{s}, \bar{s}_1; t)$ como en los demás sitios (obtenida del problema homogéneo equivalente) o mediante una transición al limbo (atrapamiento - abandono de la red). La ecuación equivalente a (2) para la SJP en el sitio trampa resulta así

$$\Psi_1(t) - \Psi_1(t + dt) = \left[\sum_{\bar{s}'} B_{\bar{s}', \bar{s}_1}(t) + \kappa \right] dt \Psi_1(t) \quad (7)$$

La solución de (7) es similar a la obtenida de (2)

$$\Psi_1(t) = \Psi_0(\bar{s}_1; t) e^{-\kappa t} \quad (8)$$

considerando nuevamente que el arribo al sitio \bar{s}_1 se produjo en $t = 0$.

A partir de (8) podemos determinar la densidad de probabilidad de que el caminante abandone el sitio \bar{s}_1 , pasando a otro sitio de red

$$\psi_1(\bar{s}, \bar{s}_1; t) = \psi_0(\bar{s}, \bar{s}_1; t) e^{-\kappa t} \quad (9)$$

La probabilidad de que el caminante abandone el sitio \bar{s}_1 debido a una transición al limbo estará dada a su vez por

$$\psi^A(t) = \kappa e^{-\kappa t} \Psi_0(\bar{s}_1; t) \quad (10)$$

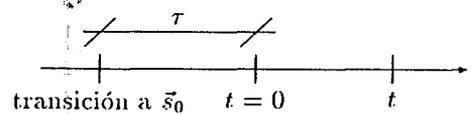


Figura 2: En general la elección del instante $t = 0$ no coincide con el instante en que se produce una transición. El intervalo de tiempo τ corresponde al tiempo transcurrido desde la transición a \bar{s}_0 hasta el instante elegido como $t = 0$

Si consideramos los casos límites

$$\begin{aligned} \kappa \rightarrow 0 & \quad \psi_1 \rightarrow \psi_0 \\ \kappa \rightarrow \infty & \quad \psi_1 \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (11)$$

reobtenemos el problema equivalente sin atrapamiento para $\kappa \rightarrow 0$ y el problema de trampa perfecta para $\kappa \rightarrow \infty$. Observamos además que la densidad de probabilidad de atrapamiento presenta los límites $\psi^A \rightarrow 0$ y $\psi^A \rightarrow \delta(t - 0^+)$ respectivamente.

4 El primer salto

Consideramos a continuación el problema del primer salto en el sitio trampa. En la descripción de una CTRW es necesario especificar la densidad de probabilidad para el primer salto puesto que en general la elección del instante $t = 0$ no coincide con una transición. Si consideramos el esquema ilustrado en la figura 2 encontramos que en general habrá transcurrido un tiempo τ desde la llegada del caminante a la posición inicial \bar{s}_0 y el instante elegido como $t = 0$. Siguiendo la propuesta de Lax y Scher⁽¹⁶⁾ definimos una densidad de probabilidad $\rho(\tau)$ para los valores de τ . Esta densidad deberá estar normalizada

$$\int_0^\infty d\tau \rho(\tau) = 1 \quad (12)$$

Señalamos que $\rho(\tau)$ no corresponde a una propiedad intrínseca del sistema, sino que constituye un modelo para la elección del instante en que comienza la descripción del proceso. Establezcamos una relación entre la SJP para el primer salto y la correspondiente a los saltos restantes considerando la probabilidad condicional definida por van Kampen⁽¹⁵⁾ de que la estadía en el sitio \bar{s}_0 supere el valor de t supuesto que a $t = 0$ ya ha transcurrido un tiempo τ desde la llegada del caminante

$$\Psi_0(\bar{s}; t|\tau) = \frac{\Psi_0(\bar{s}; t + \tau)}{\Psi_0(\bar{s}; \tau)} \quad (13)$$

Tenemos por lo tanto que la SJP para el primer

salto estará dada por

$$\Upsilon_0(\bar{s}; t) = \int_0^\infty d\tau \rho(\tau) \Psi_0(\bar{s}; t|\tau) \quad (14)$$

Con la elección $\rho(\tau) = \delta(\tau - 0^+)$ reobtenemos el caso sincronizado, en el que $t = 0$ coincide con la transición a \bar{s}_0 . Sustituyendo en (14) obtenemos

$$\Upsilon_0^S(\bar{s}; t) = \Psi_0(\bar{s}; t) \quad (15)$$

Si suponemos en cambio $\rho(\tau) = \Psi_0(\tau) / \langle t \rangle$, siendo $\langle t \rangle$ el tiempo medio entre transiciones, obtenemos a su vez

$$\Upsilon_0^E(t) = \int_0^\infty dt' \frac{\Psi_0(t')}{\langle t \rangle} \quad (16)$$

correspondiente a la condición inicial para un proceso estacionario^(17,18).

Por último notamos que si el proceso es markoviano se cumple en general

$$\Upsilon_0^M(t) = \Psi_0(t) \quad (17)$$

independientemente del modelo que se haga para la elección de $t = 0$.

Similarmente la densidad de probabilidad de transición de \bar{s}_0 a \bar{s} al tiempo t supuesto que al instante $t = 0$ ha transcurrido un tiempo τ desde la llegada del caminante a \bar{s}_0 , queda expresada por

$$\psi_0(\bar{s}, \bar{s}_0; t|\tau) = B_{\bar{s}, \bar{s}_0}(t + \tau) \Psi_0(\bar{s}; t|\tau) \quad (18)$$

con lo cual obtenemos para la densidad de probabilidad para el primer salto

$$v_0(\bar{s}, \bar{s}_0; t) = \int_0^\infty d\tau \psi_0(\bar{s}, \bar{s}_0; t|\tau) \quad (19)$$

Si consideramos ahora el sitio trampa suponiendo que el caminante ha permanecido allí un tiempo τ , la SJP condicional en \bar{s}_1 cumple la ecuación

$$\begin{aligned} \Psi_1(t|\tau) - \Psi_1(t + dt|\tau) &= \\ &= \left[\sum_{\bar{s}'} B_{\bar{s}, \bar{s}'}(t + \tau) + \kappa \right] dt \Psi_1(t|\tau) \end{aligned} \quad (20)$$

donde hemos incluido la probabilidad de transición al limbo en forma similar a la discusión planteada para (7). La solución a la ecuación diferencial que surge de (20) resulta

$$\Psi_1(t|\tau) = \Psi_1(t = 0|\tau) \Psi_0(\bar{s}_1; t|\tau) e^{-\kappa t} \quad (21)$$

No hemos supuesto aquí como en los demás sitios $\Psi_1(t = 0|\tau) = 1$, debido a que si bien no se han producido transiciones entre sitios desde la llegada del caminante a \bar{s}_1 , no tenemos certeza de que el caminante haya permanecido en la red debido al flujo de probabilidad al limbo: *i.e.* la partícula tiene una probabilidad no nula de haber sido atrapada. Dado que desde la llegada del caminante a \bar{s}_1 ha transcurrido un tiempo τ la probabilidad de que haya sido atrapado es

$$\Psi^A(\tau) = \int_0^\tau dt' \psi^A(t') \quad (22)$$

y la probabilidad de que el caminante haya permanecido en \bar{s}_1 hasta el instante $t = 0$ resulta

$$\Psi_1(t = 0|\tau) = 1 - \Psi^A(\tau) \quad (23)$$

Mediante un razonamiento similar al utilizado para obtener (14) concluimos que la SJP en el sitio \bar{s}_1 es

$$\Upsilon_1(t) = e^{-\kappa t} \int_0^\infty d\tau \rho(\tau) [1 - \Psi^A(\tau)] \Psi_0(\bar{s}_1; t|\tau) \quad (24)$$

De la comparación con (14) surge que la diferencia entre la SJP para el primer salto en el sitio \bar{s}_1 y la correspondiente a un sitio genérico $\bar{s} \neq \bar{s}_1$ está dada por el corchete en el integrando de (24). Notamos en particular que en el límite $\kappa \rightarrow \infty$ $\Psi^A(\tau) \rightarrow 1$ resultando que la probabilidad de permanencia en el sitio trampa es nula, como corresponde al modelo de trampa perfecta.

La densidad de probabilidad de transición desde el sitio trampa a otro sitio de red es

$$v_1(\bar{s}, \bar{s}_1; t) = e^{-\kappa t} \int_0^\infty d\tau \rho(\tau) [1 - \Psi^A(\tau)] \times \psi_0(\bar{s}, \bar{s}_1; t|\tau) \quad (25)$$

en tanto que la densidad de probabilidad de transición al limbo resulta

$$v^A(t) = \kappa \Upsilon_1(t) \quad (26)$$

Un aspecto importante a destacar en este punto es que aún en el caso de una WTD exponencial para el proceso de saltos, deja de ser válida en \bar{s}_1 la identidad establecida en (17) para los restantes sitios de la red. En efecto, suponiendo $\Psi_0(t) = \exp[-\lambda t]$ obtenemos

$$\begin{aligned} \Upsilon_1(t) &= \Xi^M \Psi_1(t) \\ v_1(t) &= \Xi^M \psi_1(t) \end{aligned} \quad (27)$$

definiendo

$$\Xi^M = \frac{\lambda + \kappa \rho(u = \lambda + \kappa)}{\lambda + \kappa} \quad (28)$$

con $\rho(u)$ la transformada de Laplace de la función $\rho(\tau)$. En este caso particular encontramos que las funciones correspondientes al primer salto están reducidas en un factor Ξ^M al compararlas con las respectivas funciones para los saltos restantes. Vemos además que el factor de reducción está determinado por el flujo de probabilidad al limbo mientras el caminante se encuentre en \bar{s}_1 .

5 La Hipótesis de Sincronización

Si bien la hipótesis de sincronización no resulta válida en general, su uso difundido en la literatura, en particular en problemas de atrapamiento, hace de interés una breve discusión acerca de su inclusión en el modelo de trampa imperfecta y el límite $\kappa \rightarrow \infty$ (trampa perfecta).

Comenzamos con una aproximación suponiendo

$$\rho(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{T} & \tau < T \\ 0 & \tau > T \end{cases} \quad (29)$$

con T un intervalo muy pequeño. En el límite $T \rightarrow 0$ $\rho(\tau) \rightarrow \delta(\tau - 0^+)$ (caso sincronizado).

Consideremos la probabilidad de que el caminante haya sido atrapado antes de $t = 0$; es decir entre su llegada al sitio \bar{s}_1 y el instante en que comienza la descripción del proceso. Dado que los valores de t' en la integral (22) están comprendidos en el intervalo $[0, \tau]$ y de acuerdo con (29) sólo corresponde considerar valores de $\tau < T$ aproximamos

$$\Psi_0(t') \simeq \exp(-\lambda_0 t') \quad (30)$$

con

$$\lambda_0 = \lambda(t' = 0) \quad (31)$$

siendo λ la función definida en (4). Sustituyendo ahora (30) en (22) obtenemos

$$\Psi^A(\tau) \simeq \kappa \frac{1 - \exp[-(\lambda_0 + \kappa)\tau]}{\lambda_0 + \kappa} \quad (32)$$

Bajo la misma suposición aproximamos

$$\Psi_0(t|\tau) \simeq \exp[-(\lambda_t - \lambda_0)\tau] \Psi_0(t) \quad (33)$$

donde

$$\lambda_t = \lambda(t) \quad (34)$$

Sustituimos ahora las aproximaciones (32) y (33) en (24) para obtener finalmente

$$\Upsilon_1(t) = \Xi^S \Psi_1(t) \quad (35)$$

donde el factor Ξ^S tiene la expresión

$$\Xi^S = \frac{1}{T} \frac{1}{\lambda_0 + \kappa} \left\{ \frac{\lambda_0}{\lambda_t - \lambda_0} [1 - e^{-(\lambda_t - \lambda_0)T}] + \frac{\kappa}{\lambda_t + \kappa} [1 - e^{-(\lambda_t + \kappa)T}] \right\} \quad (36)$$

Similarmente para la densidad de probabilidad de transición de \bar{s}_1 a \bar{s}'

$$v_1(\bar{s}, \bar{s}_1; t) \simeq \Xi^S \psi_1(\bar{s}, \bar{s}_1; t) \quad (37)$$

en tanto que para el atrapamiento

$$v^A(t) \simeq \Xi^S \psi^A(t) \quad (38)$$

Si tomamos ahora el límite para $T \rightarrow 0$ en (36) suponiendo κ finito obtenemos

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Xi^S = 1 \quad (39)$$

independientemente del valor que tome κ . Encontramos de esta forma que, bajo la hipótesis de sincronización, reobtenemos el resultado esperado: las

funciones para el primer salto coinciden con las correspondientes funciones para los saltos restantes.

El caso de trampa perfecta debe analizarse con más cuidado al obtenerse como el límite para $\kappa \rightarrow \infty$ de la solución para trampa imperfecta. Así, si en particular tomamos el límite $T \rightarrow 0$, obtenemos (39) independientemente del valor de κ y al tomar el límite $\kappa \rightarrow \infty$ resulta trampa perfecta bajo la hipótesis de sincronización con inclusión de la transición en $t = 0$. En efecto sustituyendo (39) en las expresiones (36), (37)

$$\begin{aligned} \Upsilon_1^S &\rightarrow 0 \\ v_1^S &\rightarrow 0 \\ v^A &\rightarrow \delta(t - 0^+) \end{aligned} \quad (40)$$

consistente con la certeza de atrapamiento en el instante de arribo ($t = 0$, para el caso sincronizado) al sitio trampa.

Si invertimos el orden en que tomamos los límites considerando en primer término el límite de $\kappa \rightarrow \infty$ en (36) obtenemos

$$\lim_{\kappa \rightarrow \infty} \Xi^S = 0 \quad (41)$$

independientemente del valor que tome T . Este resultado determina que en particular en el límite $T \rightarrow 0$ (hipótesis de sincronización)

$$\begin{aligned} \Upsilon_1^S &\rightarrow 0 \\ v_1^S &\rightarrow 0 \\ v^A &\rightarrow 0 \end{aligned} \quad (42)$$

Podemos interpretar el resultado obtenido mediante la siguiente consideración: en el primer ordenamiento para el paso al límite ($\kappa = \text{cte.}; T \rightarrow 0$ y luego $\kappa \rightarrow \infty$) equivale a asumir $1/\kappa > T$, es decir que suponemos el tiempo medio de atrapamiento es mayor que el intervalo $[0, T]$ y por lo tanto se incluye en la descripción la absorción en $t = 0$.

Reiteramos que la última consideración efectuada corresponde a la obtención del problema de trampa perfecta, en tanto que el caso sincronizado para la trampa imperfecta resulta perfectamente determinado.

6 CONCLUSIONES

El atrapamiento en una caminata aleatoria de tiempo continuo puede plantearse como un problema con una inhomogeneidad local, para lo cual es preciso determinar las densidades de probabilidad para el tiempo de pausa (tiempo hasta un próximo salto) para un salto genérico y el primer salto. El cálculo de estas densidades de probabilidad para un modelo de trampa con tasa de absorción finita, κ , en una red infinita constituye el resultado más importante obtenido en este trabajo. Las ecuaciones (8) a (10) permiten determinar el tiempo de pausa (tiempo entre saltos) para un salto genérico en el sitio trampa. Cabe destacar que este resultado obtenido es válido para una caminata

aleatoria en general no markoviana y sin suponer homogeneidad espacial.

Las ecuaciones (24) a (26) determinan a su vez la distribución de tiempos de pausa para el primer salto (tiempo de espera hasta el primer salto desde $t = 0$) en el sitio trampa. La determinación de la distribución de tiempos de pausa para el primer salto es una magnitud de importancia en la descripción de una caminata aleatoria de tiempo continuo, en particular al analizar el comportamiento de las soluciones a tiempos cortos. Una consecuencia importante de los resultados obtenidos es que, aún cuando supongamos una dinámica markoviana para la caminata aleatoria, la distribución de tiempos de pausa para el primer salto difiere de la correspondiente a un salto genérico en el sitio trampa, contrariamente a lo que ocurre para una caminata aleatoria usual (en ausencia de trampas). Como surge de (27), la densidad de probabilidad para el tiempo de escape del sitio trampa está reducida en un factor $\Xi^M < 1$ si la comparamos con la correspondiente a un salto genérico. Este resultado puede interpretarse a partir del vaciamiento parcial del sitio trampa que introduce el flujo de probabilidad al limbo desde el instante de arribo al mismo hasta el instante elegido como $t = 0$. En particular, en el límite de intensidad de atrapamiento $\kappa \rightarrow \infty$ (en el que se supone una absorción instantánea en el arribo al sitio trampa) el factor de reducción $\Xi^M \rightarrow 0$, coincidente con la suposición de vaciamiento total del sitio trampa.

Los resultados obtenidos son utilizados en una segunda comunicación presentada simultáneamente para la resolución del atrapamiento en una caminata aleatoria.

Referencias

- [1] R. V. Smoluchowski. Z. Phys. Chem. 29: 129 (1917).
- [2] G. H. Weiss, J. Stat. Phys. 42: 3 (1986).
- [3] F. C. Collins y G. E. Kimball, J. Coll. Sci. 4: 425 (1949).
- [4] A. Blumen, J. Klafter y G. Zumofen, en "Optical Spectroscopy of Glasses", I. Zschokke (ed.), Dordrecht, Reidel (1986).
- [5] J. L. Spouge, J. Virology 68. 1782 (1994).
- [6] J. L. Spouge, A. Szabo y G. H. Weiss. Phys. Rev. E 54: 2248 (1996).
- [7] S. H. Glarum, J. Chem. Phys. 33. 1371 (1960).
- [8] P. Debye, "Polar Molecules", Dover Publications, Nueva York (1945).
- [9] C. A. Condat, Z. Phys. B 77. 313 (1989).
- [10] M. O. Cáceres, C. E. Budde y M. A. Ré, Phys. Rev. E 52, 3462 (1995).
- [11] M. A. Ré, C. E. Budde y M. O. Cáceres, Phys. Rev. E 54, 4427 (1996).
- [12] C. A. Condat, Phys. Rev. A, 39: 2112 (1989).
- [13] E. W. Montroll y G. H. Weiss, J. Math. Phys. 6, 167 (1965).
- [14] C. E. Budde, "Aplicaciones de Caminatas Aleatorias con Estados Internos". Tesis Doctoral. Fa.M.A.F. - U.N.C. (1995).
- [15] N. G. van Kampen. Physica A 96, 435 (1979).
- [16] M. Lax y H. Scher, Phys. Rev. Lett. 39. 781 (1977).
- [17] W. Feller, "An Introduction to Probability Theory", Vol. II, Wiley. Nueva York (1967).
- [18] J. W. Haus y K. W. Kehr, Phys. Rep. 150, 265 (1987).