

Proceso cuántico en una red unidimensional

A.C. de la Torre^{*}, A. Daleo^{**}

Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – Universidad Nacional de Mar del Plata
Funes 3350 – (7600) – Mar del Plata – Argentina
e-mail: dltorre@mdp.edu.ar, ale@exf11.mdp.edu.ar

Dos tipos de partículas, A y B con sus correspondientes antipartículas, son definidas en una red cíclica unidimensional. En cada paso de la evolución temporal, cada partícula actúa como fuente del campo de polarización del otro tipo de partícula, con una interacción no local, pero con efecto que decrece con la distancia. Se muestra que en el caso de un número impar de sitios en la red, la distribución conjunta de dichas partículas obedece la evolución temporal de una partícula libre predicha por la mecánica cuántica. Se estudia asimismo el caso de un número par de sitios en la red.

Two types of particles, A and B with their corresponding antiparticles, are defined in a one-dimensional cyclic lattice. In each step of time evolution, each particle acts as a source of the polarization field of the other type of particle with nonlocal action, but with an effect decreasing with the distance. It is shown that in the case of an odd number of sites in the lattice, the joint distribution of these particles obeys the time evolution of a free particle as given by quantum mechanics. The case with an even number of sites in the lattice is also studied.

El modelado de la realidad física por medio de partículas ficticias que se mueven y reaccionan en substratos con diferentes estructuras geométricas ha sido una estrategia exitosa, que ha extendido nuestra capacidad de análisis más allá del dominio de las ecuaciones diferenciales⁽¹⁾. Las partículas utilizadas en estos modelos son clásicas en el sentido que se les asigna una posición y velocidad precisas. Esto es ciertamente inadecuado para modelar sistemas cuánticos que requieren, no sólo las indeterminaciones impuestas por el principio de Heisenberg, sino también correlaciones no locales entre observables que conmutan, sugeridas por el argumento de Einstein, Podolsky y Rosen⁽²⁾ y establecidas empíricamente por la violación de las desigualdades de Bell^(3,4). Sin embargo esto no prohíbe el modelado de sistemas cuánticos si *no identificamos* las partículas del modelo con las partículas cuánticas. Es posible, como veremos en este trabajo, asociar la partícula cuántica real con la distribución conjunta de dos tipos de partículas ficticias con interacciones no locales. Este modelo simple puede ser trivialmente extendido a dimensiones espaciales mayores y a un número mayor de partículas cuánticas sin interacción, y provee un nuevo punto de vista para el estudio de las peculiaridades de la mecánica cuántica.

Consideremos una red unidimensional, con N sitios en un círculo y con constante de red a . Para evitar complicaciones no deseadas en el modelo, asumiremos que N es un entero impar; los motivos de esta restricción quedarán claros más adelante. Cada sitio de la red puede ser ocupado por un número cualquiera de partículas tipo A , B o por sus respectivas antipartículas \bar{A} , \bar{B} . Partículas y antipartículas del mismo tipo se aniquilan en cada sitio de la red, dejando sólo el exceso de partículas o antipartículas de ambos tipos A y B . En cada paso de la evolución temporal, $t \rightarrow t+1$, correspondiente a un lapso de tiempo pequeño τ , las partículas A crean antipartículas

\bar{B} en el mismo sitio, partículas B en los sitios primeros vecinos, \bar{B} en los sitios segundos vecinos, y así sucesivamente. Del mismo modo, partículas B crean A y \bar{A} :

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \dots \bar{B} \bar{B} \bar{B} \bar{B} \dots \\ B &\rightarrow \dots \bar{A} \bar{A} \bar{A} \bar{A} \dots \end{aligned} \quad (1)$$

Las mismas reacciones ocurren intercambiando partículas y antipartículas. El proceso de creación se extiende hacia la derecha e izquierda de cada sitio hasta los dos sitios opuestos en el círculo. Dado que N es un número impar, en estos dos sitios se crean partículas del mismo signo (partículas o antipartículas). Como veremos más adelante, para una distribución de partículas confinadas en una región pequeña de la red, el número de partículas (o antipartículas) creadas decae con la distancia d aproximadamente como $1/d^2$. Antes de escribir la ecuación maestra para la evolución temporal, podemos distinguir algunas características del proceso en forma cualitativa. Es fácil ver que el proceso tiene difusión: si empezamos, por ejemplo, con un cierto número de partículas A en un sitio, luego de dos pasos de tiempo, algunas antipartículas \bar{A} han sido creadas en el mismo sitio, reduciendo el número de partículas A , pero también algunas partículas A han aparecido en los sitios primeros vecinos. El efecto neto es difusión. Por otro lado, es menos obvio que aunque el proceso posee simetría izquierda-derecha, podemos tener deriva hacia la derecha o izquierda. Para ver esto, notemos que las partículas A repelen a las B de su sitio, ya que \bar{B} son creadas allí, en tanto que las partículas B atraen a las A vecinas a su sitio. Luego si tenemos una configuración asimétrica como AB , el centro de la distribución conjunta se moverá hacia B . La dirección de la deriva y su velocidad está codificada entonces en la forma en que se hallan distribuidos ambos tipos de partículas. Veremos más adelante que aunque la

^{*} Investigador independiente del CONICET, autor a quién debe dirigirse la correspondencia.

^{**} Becario de entrenamiento para alumnos avanzados de la CIC.

distribución de las partículas se deforma bastante luego de algunos pasos de tiempo, la dirección y velocidad de la deriva permanece invariante.

Una manera conveniente de etiquetar los sitios en la red circular es por medio de un índice s que vaya de $-L$ a L . Dado que el número de sitios en la red $N=2L+1$ es impar, el índice s será entero. Sean $a_s(t)$ y $b_s(t)$ el número de partículas tipo A y B respectivamente en el sitio s al tiempo t , normalizadas de cierta manera que especificaremos luego (de cualquier manera la ecuación maestra es independiente de normalización). Cuando $a_s(t)$ o $b_s(t)$ tomen valores negativos denotarán el número de antipartículas. En cada sitio de la red, el número de partículas cambia a medida que partículas (o antipartículas) son creadas en él por las partículas en los otros sitios. La evolución temporal del proceso está definida entonces por las ecuaciones

$$\begin{aligned} a_s(t+1) &= a_s(t) + \tau g^2 \sum_{d=-L}^L b_{[s+d]}(t) F(d) \\ b_s(t+1) &= b_s(t) - \tau g^2 \sum_{d=-L}^L a_{[s+d]}(t) F(d), \end{aligned} \quad (2)$$

donde los corchetes en los subíndices, $[s+d]$, denotan "módulo N ", esto es, con un valor en el intervalo cerrado $[-L, L]$; g está relacionado con la constante de red a por $g=(2\pi)/(Na)$ (corresponde a la constante de la red recíproca); τ es una escala de tiempo lo suficientemente pequeña para que $\tau g^2 N^2 \ll 1$, y la función de la distancia $F(d)$ está definida como

$$F(d) = \frac{1}{N} \sum_{k=-L}^L k^2 e^{i \frac{2\pi}{N} kd} = \begin{cases} (-1)^d \frac{\cos(\pi d / N)}{2 \sin^2(\pi d / N)} & \text{si } d = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L \\ \frac{1}{12} (N^2 - 1) & \text{si } d = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Para uso posterior definiremos una función similar $G(d)$ como:

$$G(d) = \frac{i}{N} \sum_{k=-L}^L k e^{i \frac{2\pi}{N} kd} = \begin{cases} \frac{(-1)^d}{2 \sin(\pi d / N)} & \text{si } d = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L \\ 0 & \text{si } d = 0 \end{cases} \quad (4)$$

El signo alternado en la definición de $F(d)$ corresponde al hecho de que partículas y antipartículas son creadas en sitios alternados, y el signo diferente en la ec. (2) es debido al rol diferente que tienen las partículas y antipartículas en la relación (1). Si las partículas están confinadas en una pequeña región dentro de una red grande, la contribución principal en las sumas de la ec. (2) proviene de términos con distancias $|d| \ll N$. En este límite $|F(d)| \approx 1/d^2$ como mencionamos anteriormente.

El número de partículas A o B no se conserva durante la evolución temporal, tampoco se conserva la suma de partículas. Una cantidad que se conserva durante el proceso es la suma del número al cuadrado de partículas A más la suma del número al cuadrado de partículas B : $\sum_s (a_s^2(t) + b_s^2(t))$. Esta cantidad conservada puede utilizarse para normalizar la distribución, y le podemos asignar el significado físico de energía o probabilidad total. Tiene sentido definir entonces una densidad conjunta $a_s^2(t) + b_s^2(t)$, asociada a esta cantidad conservada.

Veremos que la velocidad de deriva de esta distribución, dada por

$$\langle v \rangle = 4g \sum_{s,r} a_s(t) b_r(t) G(s-r), \quad (5)$$

es una cantidad que también se conserva en la evolución temporal. Además, dada una distribución $\{a_s(t), b_s(t)\}$, podemos cambiar la velocidad de deriva en una cantidad v , sin cambiar la forma de la distribución conjunta, por medio de la transformación local

$$\begin{aligned} a'_s(t) &= a_s(t) \cos(vas/2) - b_s(t) \sin(vas/2) \\ b'_s(t) &= a_s(t) \sin(vas/2) + b_s(t) \cos(vas/2), \end{aligned} \quad (6)$$

donde v tiene que ser de la forma $v=2kg$ con k entero y menor que una constante que depende de la distribución, según se verá más adelante.

Las características mencionadas fueron verificadas en una simulación por computadora del proceso. Fue utilizada una red circular con $N=801$ sitios ($L=400$) y con una constante de red $a=1$. Se probaron varias formas para la distribución inicial: gaussianas, uniformes y al azar, con diversas extensiones y velocidades de deriva. Se estudió la dependencia temporal de $M(t) = \sum_s (a_s^2(t) + b_s^2(t))$ y de la velocidad de deriva dada por la ec. (5). Tomando un paso de tiempo $\tau=10^{-3}$ encontramos que estas cantidades permanecen constantes luego de $t=1000$ pasos de tiempo, con variaciones relativas inferiores a 10^{-5} para el caso gaussiano, 4×10^{-4} para la distribución uniforme y 0.04 para la distribución al azar. Para pasos de tiempo más grandes, $\tau=0.005$, estas cantidades permanecen constantes (menos de 1% de variación relativa) para los casos gaussiano y uniforme luego de 1000 pasos, pero para la distribución al azar empiezan a variar en forma significativa. Para $\tau=0.010$, solamente en el caso gaussiano estas cantidades permanecieron constantes (con una variación inferior al 0.1%). La evolución temporal de la distribución conjunta se asemeja fuertemente a la evolución temporal de un paquete de ondas en mecánica cuántica. Por ejemplo, una distribución gaussiana de partículas A y B , modificadas mediante la ec. (6) para tener deriva, evolucionará aumentando su ancho, derivando, pero manteniendo la

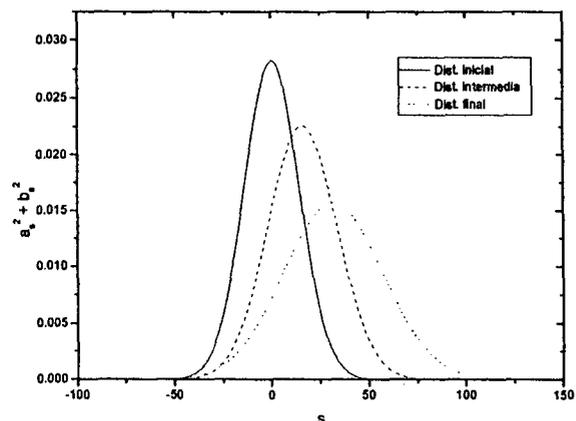


Figura 1. Evolución temporal de una distribución inicial gaussiana.

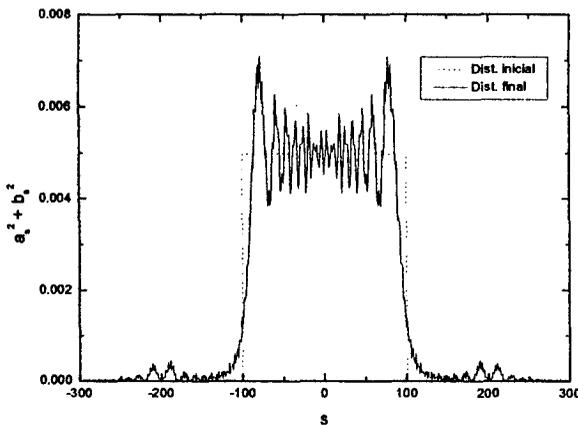


Figura 2. Evolución temporal de una distribución inicial uniforme.

forma gaussiana, como podemos ver en la Fig. 1. Una distribución uniforme, desarrollará lóbulos a los lados durante la evolución (Fig. 2). Una característica destacable es que el proceso suaviza las fluctuaciones al azar de la distribución inicial.

Mostraremos que el proceso aquí definido corresponde a una partícula cuántica libre en una red. Tomemos un espacio de Hilbert de dimensión N , con N impar. Sea $\{\varphi_s\}$, $s=-L, -L+1, \dots, L$, una base correspondiente al operador posición X , esto es $X\varphi_s = s\varphi_s$. Debido a que el espacio de Hilbert es de dimensión finita, no podemos definir el operador impulso P por medio de las relaciones usuales de conmutación canónicas. Una manera alternativa de definir P es elegir primero una base $\{\phi_k\}$ insesgada⁽⁵⁻⁷⁾ respecto a $\{\varphi_s\}$,

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{s=-L}^L e^{i\frac{2\pi}{N}ks} \varphi_s, \quad (7)$$

y con ésta, definimos el operador impulso por su descomposición espectral

$$P = \sum_{k=-L}^L gk\phi_k \langle \phi_k, \cdot \rangle \\ = \frac{1}{N} \sum_{k,s,r} gke^{i\frac{2\pi}{N}k(s-r)} \varphi_s \langle \varphi_r, \cdot \rangle. \quad (8)$$

Los autovalores del operador y las fases relativas para construir la base $\{\phi_k\}$ fueron elegidas de tal manera que P resulte el generador de las translaciones. Esto es, con dicha elección, el operador $U_\sigma = \exp(-i\sigma P)$ es tal que $U_\sigma \varphi_s = \varphi_{s+\sigma}$. La translación es cíclica en el borde, $U_\sigma \varphi_L = \varphi_L$. Si hubiéramos tomado N par, habríamos encontrado que $U_\sigma \varphi_L = -\varphi_L$, y esto complicaría el modelo de la Relación (1), siendo necesario introducir cambios de signos en los lugares apropiados. Para mantener un modelo de red simple para la partícula cuántica libre nos restringiremos a valores impares de N .

El estado de una partícula cuántica libre, dado por

$$\Psi(t) = \sum_{s=-L}^L c_s(t) \varphi_s, \quad (9)$$

cambiará de acuerdo al operador de evolución temporal (hemos puesto $\hbar = 2m = 1$)

$$U_t = \exp(-iP^2 t). \quad (10)$$

Consideremos la evolución de los coeficientes de la expansión dados en la ec. (9), en un paso de tiempo discreto: $t_0 = \tau$ y $t_l = \tau(t+1)$ con una escala de tiempo τ pequeña y t un entero positivo. Tendremos

$$c_s(t+1) = \sum_{r=-L}^L c_r(t) \langle \varphi_s, U_\tau \varphi_r \rangle. \quad (11)$$

Para τ tal que $\tau \|P^2\| \ll 1$, esto es $\tau \ll (a/\pi)^2$, podemos quedarnos sólo con el término lineal del desarrollo de la exponencial del operador de evolución temporal, y obtener

$$c_s(t+1) = c_s(t) - i\tau \sum_{r=-L}^L c_r(t) \langle \varphi_s, P^2 \varphi_r \rangle. \quad (12)$$

Utilizando la ec. (8) podemos calcular el elemento de matriz

$$\langle \varphi_s, P^2 \varphi_r \rangle = g^2 \frac{1}{N} \sum_{k=-L}^L k^2 e^{i\frac{2\pi}{N}k(s-r)}. \quad (13)$$

Tendremos entonces

$$c_s(t+1) = c_s(t) - i\tau g^2 \sum_{r=-L}^L c_r(t) F(s-r). \quad (14)$$

Reordenando los términos en la suma, y utilizando la notación "módulo N ", tenemos

$$c_s(t+1) = c_s(t) - i\tau g^2 \sum_{d=-L}^L c_{[s+d]}(t) F(d). \quad (15)$$

Finalmente si escribimos en forma explícita los coeficientes en término de sus partes real e imaginaria, $c_s(t) = a_s(t) + ib_s(t)$, obtenemos la ec. (2).

Podemos verificar que $M(t) = \sum_s |c_s(t)|^2$ se conserva.

$$M(t+1) = M(t) + \tau^2 g^4 \sum_{r,u} c_r(t) c_u^*(t) \sum_s F(s-r) F(s-u). \quad (16)$$

El término lineal en τ se anula debido a que la función simétrica F aparece multiplicada por un factor antisimétrico. Tenemos entonces que la "derivada" $(M(t+1) - M(t))/\tau$ se anula cuando τ tiende a cero, lo que concuerda con las simulaciones numéricas del proceso. Si escribimos a las funciones F en su representación de sumas y, realizando la suma sobre s , obtenemos

$$\sum_s F(s-r) F(s-u) = \frac{1}{N} \sum_{k=-L}^L k^4 e^{i\frac{2\pi}{N}k(r-u)}. \quad (17)$$

Esta suma puede ser evaluada como lo fueran las ecs. (3) y (4), pero no es necesario. En el límite $N \gg d = |r-u|$, esto es cuando las partículas están confinadas en una pequeña región de una red grande, tenemos

$$M(t+1) = M(t) + \tau^2 \frac{\pi^4}{5} \left(2 \sum_{r \neq u} c_r(t) c_u^*(t) \frac{(-1)^{r-u}}{(r-u)^2} + M(t) \right). \quad (18)$$

Un resultado similar es obtenido para la velocidad de deriva, que es proporcional al valor de expectación de \mathbf{P} .

$$\langle \mathbf{P} \rangle_t = -ig \sum_{s,r} c_s^*(t) c_r(t) G(s-r). \quad (19)$$

En términos de $a_s(t)$ y $b_s(t)$ esta ecuación se transforma en la ec. (5) más arriba (hay que agregar un factor 2, debido a que $2m=1$). Aquí también, si consideramos la evolución temporal $\langle \mathbf{P} \rangle_{t+1}$, tendremos que el término lineal en τ se anula porque contiene $\sum_s [F(u-s)G(s-r) - G(u-s)F(s-r)]$ que es cero como se puede verificar de las representaciones en sumatorias de las funciones F y G . Obtenemos entonces

$$\langle \mathbf{P} \rangle_{t+1} = \langle \mathbf{P} \rangle_t - i\tau^2 g^5 \sum_{u,v} c_u^*(t) c_v(t) \sum_{s,r} F(u-s)G(s-r)F(r-v). \quad (20)$$

es decir que la “derivada” de la velocidad de deriva se anula con τ de acuerdo con las simulaciones numéricas del proceso.

Para probar la relación (6), construimos el operador de “impulsión” $U_k = \exp(iXg)$, que satisface $U_k \phi_k = \phi_{k+1}$, con condiciones de contorno cíclicas $U_k \phi_L = \phi_1$. Aplicando este operador $2k$ veces sobre el estado definido en la ec. (9) (el factor 2, se debe nuevamente al hecho que $2m=1$), obtenemos la relación (6). Debido a las condiciones cíclicas de la transformación de impulsión, k no debe exceder un valor máximo para obtener la transformación deseada. Este valor máximo dependerá de la forma de la distribución en la base del operador impulso (o k -espacio). Valores mayores de k salen de la “celda de Brillouin”, generando un valor efectivo distinto del deseado.

Hemos visto que el modelo de red unidimensional presentado aquí provee una representación simple de la posición e impulso de una partícula cuántica libre, con la condición de que el número de sitios de la red, N , sea impar. Veamos que ocurre en el caso de que N sea par. El modelo evoluciona de acuerdo a la ec. (2), con las sumas entre $-N/2$ y $N/2$, y con la misma función $F(d)$ definida en la ec. (3). Notemos que en este caso, la función $F(d)$ se anula para los valores extremos de d , esto es $F(\pm N/2) = 0$. Sin embargo, este modelo ya no es equivalente al sistema cuántico, la conexión se pierde en el paso que va de la ec. (14) a la ec. (15). Para los casos en que el argumento $s-r$ de la función F en la ec. 14 excedan $N/2$, deberíamos introducir un cambio de signo para pasar a la ec. (15) utilizando la notación “módulo N ”. El motivo de este cambio se debe al cambio de signo que introduce el operador de translación cuando se cruza el sitio $\pm L$, como mencionamos en el párrafo siguiente a la ec. (8). Sería posible, entonces, incluir valores pares de N , pero al costo de complicar el modelo. Para esto tendríamos que cambiar las reglas de la Relación (1), intercambiando partículas y antipartículas al cruzar el sitio $\pm L$. Estas complicaciones son indeseables, y preferimos aceptar el hecho que posición e impulso de una partícula cuántica puede ser modelada fácilmente sólo con una red cíclica con un número impar de sitios. En el caso de una partícula cuántica confinada en una pequeña región de una red muy grande, no tiene importancia si la misma tiene un número par o impar de sitios, para todo tiempo

hasta que, por difusión o deriva, la distribución alcance sitios cercanos a $\pm N/2$. Sin embargo, para redes pequeñas, o distribuciones extendidas, sí tiene importancia, y únicamente en el caso N impar, la Relación (1) describe una partícula cuántica. Estas características fueron verificadas computacionalmente y son una indicación más del carácter no-local de la mecánica cuántica. Hay otro caso en mecánica cuántica en que un número par o impar de estados tiene consecuencias cualitativas importantes, esto es en realizaciones finitas de impulso angular. Mientras el impulso angular *intrínseco*, el espín, de una partícula puede tener un número par o impar de estados, el impulso angular *orbital*, proveniente de posición e impulso, sólo puede tener realizaciones con un número impar de estados.

El modelo presentado puede ser extendido de la partícula libre al caso de un potencial dependiente de la posición. La estructura general del proceso mostrado en la Relación (1), permanece inalterada, pero la función F de la ec. (2) será distinta a la dada por la ec. (3) y tendrá que ser calculada del operador de evolución temporal adecuado. El modelo también puede ser extendido a dos o tres dimensiones espaciales, pero con requerimientos computacionales mayores para las simulaciones.

Desde los inicios de la mecánica cuántica, ha habido numerosos intentos de formar una imagen clásica del comportamiento cuántico. Por las razones mencionadas al inicio, los intentos en términos de partículas son inútiles. El modelo aquí presentado, sugiere la posibilidad de una imagen clásica en términos de dos campos A y B cada uno de los cuales actúa como fuente de polarización del otro. Como ocurre con el campo electromagnético, la energía o cualquier otra cantidad conservada, está dada por la suma del cuadrado de ambos campos. El modelo presenta además una extensión inmediata al continuo, donde las ecuaciones de movimiento para los campos A y B resultan particularmente sencillas. Considerar estos campos puede proveer un nuevo punto de vista para el estudio de las peculiaridades de la mecánica cuántica.

Referencias

- 1- Albano, E.V. Heter. Chem. Rev. **3**, 389 (1996). Barabási, A.L., Stanley, H.E. *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press (1995).
- 2- Einstein, A., Podolsky, B., Rosen, N. Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- 3- Bell, J.S. Physics, **1**, 195 (1964).
- 4- Freedman, S.J., Clauser J.F. Phys. Rev. Let. **28**, 938 (1972).
- 5- Wootters, W.K. Ann. Phys. **176**, 1 (1987).
- 6- Peres, A. *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer Acad. Pub. (1993).
- 7- de la Torre, A.C. Iguain, J.L. Am. J. Phys. **66**, (1998).