

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE GRADUAÇÃO EM FÍSICA BACHARELADO

Jaime Gomes da Silva Neto

O PROBLEMA DA DIFUSÃO CLÁSSICA: UMA
ABORDAGEM VIA OPERADORES DA MECÂNICA
QUÂNTICA.

São Cristóvão - SE

2017

JAIME GOMES DA SILVA NETO

O PROBLEMA DA DIFUSÃO CLÁSSICA: UMA ABORDAGEM VIA OPERADORES DA
MECÂNICA QUÂNTICA.

Monografia apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal de Sergipe, como requisito parcial para obtenção do Grau de Bacharel em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Gerson Cortês Duarte Filho

São Cristóvão - SE

2017

Dedico aos meus pais por esta conquista e a todos que de alguma forma contribuíram para minha formatura .

Agradecimentos

Ao professor Gerson Cortês Duarte Filho por me orientar nesta monografia e poder concluir o curso de Física Bacharelado.

Aos meus professores do Departamento de Física Stoian Ivanov Zlatev, Mario Everaldo de Souza, Gerson Cortês, Marcos Antônio Couto, Osmar de Souza, Nelson Orlando e etc.

Aos meus pais Maria Eliane dos Santos Gomes e Sebastião Gomes da Silva Neto que sempre estão do meu lado apoiando-me de todas as maneiras.

Aos meus amigos Jailsson Silva Lima, Carlos Alves (primo), Patrick Alexandre Hallan e Rita Holanda Bezerra Santos que tiveram um papel especial para a realização da monografia.

Aos meus colegas de curso que ao longo do curso tiveram um papel fundamental para esta conquista.

A diretora Cláudia Rejane Aragão que em diversos momentos se dispôs a ser maleável com os horários do trabalho para que eu pudesse conciliar trabalho e estudo, aos vigilantes Allison Gomes, Fernando Conceição, Francisco (Seu Chico), Rubens e Bruno por permitir a troca de escala de trabalho; as merendeiras Rosângela, Dona Arlene e Fabiane Prejuízo; enfim, a todos o servidores da Escola Estadual Armindo Guaraná que mesmo não sendo citados de alguma forma contribuíram para que isso fosse possível.

Lista de Figuras

1.1	Potencial do oscilador harmônico simples.	3
1.2	Forma esquemática de ver a ação dos operadores de criação e aniquilação.	4
2.1	Difusão em dois sítios.	6
2.2	Difusão em N sítios.	8
3.1	Configurações do Sistema de duas partículas e duas caixas.	10
3.2	Probabilidades do sistema de duas partículas e dois sítios. Utilizando a condição inicial $ 1\rangle$	18
3.3	Probabilidades do sistema de duas partículas e dois sítios. Utilizando a condição inicial $ 2\rangle$	19
3.4	Probabilidades do sistema de duas partículas e dois sítios. Utilizando a condição inicial $ 3\rangle$	20
3.5	Número médio de partículas com a configuração inicial com duas partículas na caixa 1 e nenhuma partícula na caixa 2.	21
3.6	Configurações do sistema de uma partícula e três caixas.	22
3.7	Probabilidades do sistema de uma partícula e três caixas. Utilizando a condição inicial $ 1\rangle$	28
3.8	Número médio de partículas para a configuração inicial com uma partícula na caixa 1 e nenhuma partícula nas caixas 2 e 3.	29
3.9	Configurações do sistema de uma partícula e quatro caixas.	30
3.10	Configurações do sistema de uma partícula e cinco caixas.	33
3.11	Configurações do sistema de duas partículas e três caixas.	37
3.12	Probabilidades do sistema para as seis configurações possíveis.	38
3.13	Número médio de partículas para a configuração inicial com duas partículas na caixa 1 e nenhuma partícula nas caixas 2 e 3	40

Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	vi
Resumo	viii
Abstract	ix
1 Equação Mestra e Osciladores Harmônicos Simples Quântico (Operadores de Criação e Aniquilação)	1
1.1 Equação-Mestra	1
1.2 OHSQ (Operadores de Criação e Aniquilação)	2
2 Mapeamento da Equação Mestra Em Uma Equação de Schroedinger	6
2.1 Difusão em dois sítios	6
2.2 Generalização para N sítios em uma cadeia linear	8
3 Resultados	10
3.1 Exemplo 2 partículas e 2 caixas	10
3.2 Exemplo 1 partícula e 3 caixas	22
3.3 Exemplo 1 partícula e 4 caixas	30
3.4 Exemplo 1 partícula e 5 caixas	32
3.5 Difusão de N partículas numa cadeia: Probabilidades Conjuntas	36
4 Conclusão	41
A Determinação da inversa de uma matriz	42

Resumo

Este trabalho tem como objetivo utilizar a ferramenta da Equação-Mestra para estudar o caso da difusão de partículas. Inicialmente foi feito um resumo do oscilador harmônico simples quântico com a finalidade de formular a aplicação dos operadores de criação e aniquilação; posteriormente foi estudado o caso de duas partículas e dois sítios obtendo o Hamiltoniano do sistema podendo generalizar para o caso de N sítios em uma cadeia linear, as partículas podem saltar para o vizinho mais próximo no processo de difusão. Foram analisados casos de partículas bosônicas que se comportam em caixas como: duas partículas e duas caixas, uma partícula e três caixas, uma partícula e quatro caixas, uma partícula e cinco caixas, duas partículas e três caixas para obtenção de suas probabilidades e número médio de partículas em função do tempo. Para o caso de duas partículas e três caixas utilizou-se o fato de que as partículas estão descorrelacionadas, não tendo restrições quanto ao número de partículas numa caixa, obtendo probabilidades no caso de uma única partícula para calcular as probabilidades conjuntas no caso de mais partículas numa cadeia (difusão de N partículas numa cadeia).

Palavras-chave: Monografia. LaTeX. Equação-Mestra. Difusão. Operadores. Bósons

Abstract

This work aims to use the Master-Equation to study the diffusion of particles. Initially, we summarized the simple quantum harmonic oscillator in order to formulate the application of the creation and annihilation operators. We, then, studied the Hamiltonian of the two-particle and two-site case, which was later generalized to the linear chain N -site case. In the generalized case particles can jump into their closest neighbor by diffusion. We also analyzed the case of the box-like behaved bosons: two particles and two boxes, one particle and three boxes, one particle and four boxes, one particle and five boxes, two particles and three boxes to obtain their probabilities and the average number of particles as a function of time. In the case of one particle and five boxes we considered that the number of particles is independent of the diffusion that happens among themselves. For the case in two parts and three boxes we used the fact that the particles are uncorrelated, not having restriction for the amount of particles that fit in each box. We obtained the probability for the case of a single particle to calculate the combined probabilities for the case of many particles in a chain (N particle chain diffusion).

Keywords: Monograph. LaTeX. Equation-Master. Diffusion. Operators. Bosons

Capítulo 1

Equação Mestra e Osciladores Harmônicos Simples Quântico (Operadores de Criação e Aniquilação)

1.1 Equação-Mestra

O movimento browniano consiste no movimento aleatório das partículas microscópicas imersas em um fluido. Este movimento aleatório provém da colisão dos átomos ou moléculas dos fluidos nessas partículas microscópicas. Descoberto por Robert Brown em 1827, que ao analisar partículas de grão de pólen na água se movendo, não conseguiu determinar o mecanismo que causara este movimento. Muitas décadas depois, surgiram as primeiras teorias sobre o movimento browniano, publicadas por Einstein (1905) e Smoluchowski (1906), conseguindo explicar o mecanismo do movimento, sendo que o movimento do pólen na água tratava-se do resultado dos choques das moléculas da água no pólen. Através desta explicação, confirmou-se definitivamente a existência de átomos e moléculas, sendo verificada experimentalmente por Jean Baptiste Perrin em 1908.

Para descrever os movimentos brownianos foi usado um método chamado equação de Langevin, que calcula a evolução temporal das médias de posição e velocidades da partícula browniana. Também temos a equação de Fokker-Planck que estuda a evolução temporal das distribuições de probabilidade das médias de posição e velocidades da partícula browniana. Indo além destas equações, surgiu a Equação-Mestra, que permite calcular as probabilidades de encontrar o sistema em um determinado microestado do sistema.

A Equação-Mestra pode ser deduzida através de justificativas probabilísticas diretamente da relação de Chapman-Kolmogorov para processos estocásticos markovianos, não entraremos em detalhes de como foi formulado podendo ser consultado, por exemplo, no livro Introdução a Física Estatística do

Salinas [1].

A maioria dos sistemas está fora do equilíbrio e a formulação, por exemplo, via equação de Fokker-Plank não permite um estudo microscópico adequado, já que trabalha com evolução de distribuição de probabilidades de observáveis. A Equação-Mestra é uma ferramenta que permite modelar o processo estocástico de acordo com os detalhes microscópicos do sistema. O estudo de sistemas fora de equilíbrio utilizando a equação-mestra é particularmente interessante quando queremos entender a emergência da irreversibilidade em processos físicos. Ver por exemplo: F. Reif [6], capítulo 15.

Explorada em diversos ramos da ciência, a Equação-Mestra pode ser aplicada no modelo cinética química [1], no modelo de Ising cinético [1], na ressonância magnética [6], na dinâmica de polarização nuclear [6], em sistemas atômicos interagindo com campos de radiação [7], entre outros.

A Equação-Mestra descreve a evolução temporal das probabilidades de um determinado sistema $P(\eta, t)$, ser encontrado em uma configuração η no instante t .

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\eta, t) = \sum_{\eta'} [T_{\eta' \rightarrow \eta}P(\eta', t) - T_{\eta \rightarrow \eta'}P(\eta, t)], \quad (1.1)$$

onde $T_{\eta' \rightarrow \eta}$ representa a taxa de transição da configuração η' para a configuração η com o aumento de probabilidade $P(\eta, t)$, enquanto que $T_{\eta \rightarrow \eta'}$ representa a taxa de transição da configuração η para a configuração η' com a diminuição de probabilidade $P(\eta, t)$, podendo ser pensado como a simetria de ganho e perda de probabilidade do sistema, sendo que $T_{\eta' \rightarrow \eta}$ e $T_{\eta \rightarrow \eta'}$ são as transições de configurações, notando-se que elas não dependem do tempo t .

Iremos usar a Equação-Mestra para tratar o problema de difusão de uma rede onde a partícula tem a probabilidade de ir à direita e à esquerda, mapeando assim, a Equação-Mestra em uma equação tipo de Schroedinger com uma representação do Hamiltoniano associado em termos de operadores de criação e aniquilação. Primeiramente, vamos analisar o caso mais simples que é de duas caixas e duas partículas, partindo para a análise da configuração inicial até a configuração final no tempo longo. Em seguida, estudaremos o caso de uma partícula e três caixas onde veremos que aumentando o número de caixas aumentaremos consequentemente a matriz hamiltoniana do sistema. Nos casos dos problemas de várias partículas descorrelacionadas em uma cadeia formada por várias caixas, pode-se estudar como problema de uma única partícula difundindo pelas caixas. Após se resolver esse problema de partícula única, pode-se encontrar as probabilidades associadas ao sistema de várias partículas, utilizando o conceito de probabilidade conjunta.

1.2 OHSQ (Operadores de Criação e Aniquilação)

Nesta seção, vamos fazer um resumo do oscilador harmônico simples quântico, estudado na matéria de Mecânica Quântica no nível de graduação, para formular os operadores de criação e aniquilação no caso bosônico.

Considere a equação de Schroedinger independente do tempo para uma partícula de massa m

preso a uma constante de mola de força K com uma oscilação harmônica de frequência w , está sujeito a um potencial dado pela eq.

$$V(x) = \frac{1}{2}mw^2x^2, \quad (1.2)$$

resolvendo assim, a equação de Schroedinger independente do tempo com este potencial. Temos então

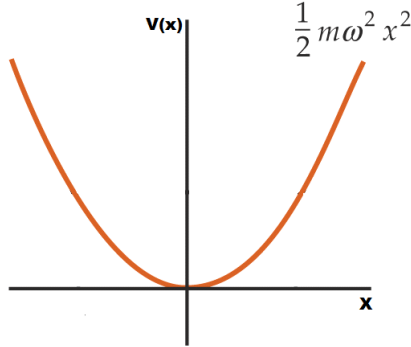


Figura 1.1: Potencial do oscilador harmônico simples.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}mw^2x^2\psi = E\psi. \quad (1.3)$$

Sendo mais conveniente expressar eq. 1.3 na forma

$$\frac{1}{2m}[p^2 + (mwx)^2]\psi = E\psi, \quad (1.4)$$

onde o operador momento na representação de posição é $p^2 = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2}$.

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (mwx)^2]. \quad (1.5)$$

Desta forma, definimos os operadores de criação e aniquilação sendo detalhado no livro do Griffiths [4]

$$a^\dagger = \frac{1}{(2\hbar mw)^{\frac{1}{2}}}(-ip + mwx), \quad (1.6)$$

$$a = \frac{1}{(2\hbar mw)^{\frac{1}{2}}}(ip + mwx). \quad (1.7)$$

Ao multiplicarmos estes operadores temos,

$$a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar mw}[p^2 + (mwx)^2 + imw(xp - px)]; \quad (1.8)$$

$$= \frac{1}{2\hbar mw}[p^2 + (mwx)^2] - \frac{i}{2\hbar}[x, p]; \quad (1.9)$$

$$= \frac{1}{2\hbar mw}[p^2 + (mwx)^2] - \frac{1}{2}. \quad (1.10)$$

$$a^\dagger a = \frac{1}{\hbar w}H - \frac{1}{2}. \quad (1.11)$$

Onde obtemos o Hamiltoniano em termos dos operadores criação e aniquilação,

$$H = \hbar\omega[a^\dagger a + \frac{1}{2}]. \quad (1.12)$$

Nós também definimos o operador número $N = a^\dagger a$ achando a relação entre o operador número e operador Hamiltoniano

$$H = \hbar\omega[N + \frac{1}{2}]. \quad (1.13)$$

Seguindo o mesmo raciocínio de 1.8, fazendo o produto aa^\dagger , acharemos

$$H = \hbar\omega[aa^\dagger - \frac{1}{2}]. \quad (1.14)$$

Aplicando o operador criação em ψ , $(a^\dagger\psi)$ satisfazendo a equação de Schroedinger com energia E , logo a energia aumentará com o fator $\hbar\omega$, e analogamente se aplicarmos o operador aniquilação em ψ , $(a\psi)$ satisfazendo a equação de Schroedinger com energia E , a energia diminuirá com o fator $-\hbar\omega$. Conseguiremos obter um mecanismo que gera soluções com energias maiores e menores.

Aplicando

$$H(a^\dagger\psi) = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})(a^\dagger\psi) = \hbar\omega(a^\dagger aa^\dagger + \frac{1}{2}a^\dagger)\psi = \hbar\omega a^\dagger(aa^\dagger + \frac{1}{2})\psi; \quad (1.15)$$

$$= a^\dagger(H + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)a^\dagger\psi. \quad (1.16)$$

e de maneira análoga iremos obter

$$H(a\psi) = a(H - \hbar\omega)\psi = (E - \hbar\omega)a\psi. \quad (1.17)$$

Podemos fazer uma analogia com a escada para estes níveis de energia: aplicando o operador levantamento subimos o degrau e aplicando o operador abaixamento descemos um degrau da escada. Como pode ser visto na figura 1.2

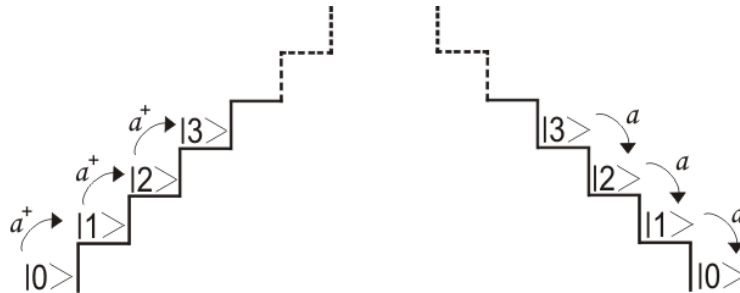


Figura 1.2: Forma esquemática de ver a ação dos operadores de criação e aniquilação.

Como o Hamiltoniano é apenas uma função linear de N , N pode ser diagonalizado

simultaneamente com o Hamiltoniano. Denotamos um valor de energia de N pelo seu autovalor n , então

$$N|n\rangle = n|n\rangle. \quad (1.18)$$

Aplicando o Hamiltoniano eq. 1.13 nos autoestados $|n\rangle$, obtemos

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle. \quad (1.19)$$

Obtendo a energia deste estado

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (1.20)$$

Vamos utilizar esse esquema de operadores criação e aniquilação para estudar a difusão numa cadeia linear.

A configuração do i -ésimo sítio da cadeia com partículas n_i , pode ser representado por $|n_i\rangle$. E para o sítio em que não tem partícula, ou seja, estado de vácuo; será representado por $|0\rangle$, colocaremos restrições para este estado.

$$\begin{cases} a_i|0\rangle = 0 \\ \langle 0|0\rangle = 1 \end{cases}. \quad (1.21)$$

De uma forma geral podemos expressar a configuração do sistema por $\eta = \{n_i\}$, que corresponde ao vetor $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$, de modo que:

$$|\eta\rangle = |\{n_i^\alpha\}\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} (a_3^\dagger)^{n_3} \dots |0\rangle. \quad (1.22)$$

Com isso, iremos introduzir os operadores bosônicos definidos no espaço de Fock [2] como,

$$a^\dagger|n_i\rangle = |n_i + 1\rangle, \quad (1.23)$$

e

$$a|n_i\rangle = n_i|n_i - 1\rangle. \quad (1.24)$$

Nota-se, que essa convenção é diferente da que aparece na mecânica quântica.

Capítulo 2

Mapeamento da Equação Mestra Em Uma Equação de Schroedinger

2.1 Difusão em dois sítios

Por simplicidade, vamos considerar inicialmente o caso da difusão de dois sítios, onde o salto de uma partícula do sítio 2 para o sítio 1, ocorre com a uma taxa de difusão D .

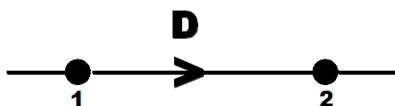


Figura 2.1: Difusão em dois sítios.

Para isso iremos mapear a Equação-Mestra em uma Equação de Schroedinger. A evolução temporal da distribuição de probabilidade $P(\eta, t)$, onde $P(\eta, t)$ é a probabilidade de encontrar o sistema na configuração η no instante de tempo t , pode ser mapeada através do vetor de onda $|\psi(t)\rangle$, definido como

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\eta} P(\eta, t)|\eta\rangle, \quad (2.1)$$

onde $|\eta\rangle$ é a representação na notação de Dirac dos vetores estado que formam um base do espaço de Fock [2]. Neste caso específico que estamos tratando, temos a configuração $\eta = (n_1, n_2)$, onde n_1 e n_2 representa o número de partículas nos sítios 1 e 2. Escrevendo $|\psi(t)\rangle$ em termos dos operadores criação

definidos no capítulo anterior

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) |n_1, n_2\rangle = \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle. \quad (2.2)$$

Derivando o vetor estado em função do tempo, eq. 2.1, temos

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) |n_1, n_2\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle. \quad (2.3)$$

Na difusão de partículas, a configuração $\eta = (n_1 + 1, n_2 - 1)$ está relacionada com o aumento da probabilidade $P(n_1, n_2, t)$ já que a partícula pode saltar do sítio 1 para o sítio 2. A probabilidade $P(n_1, n_2, t)$ diminui na configuração $\eta = (n_1, n_2)$, já que agora um partícula no sítio 1 pode pular para o sítio 2 e vice-versa. Obtemos assim, a equação-mestra para esse processo de difusão

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n_1, n_2, t) = D(n_1 + 1)P(n_1 + 1, n_2 - 1, t) - Dn_1 P(n_1, n_2, t). \quad (2.4)$$

Substituindo a eq. 2.4 na eq. 2.3, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} \left[D(n_1 + 1)P(n_1 + 1, n_2 - 1, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle - Dn_1 P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle \right]. \quad (2.5)$$

A partir dos operadores bosônicos de criação e aniquilação, $a_i^\dagger |n_i\rangle = |n_i + 1\rangle$ e $a_i |n_i\rangle = n_i |n_i - 1\rangle$, respectivamente, teremos $(n_1 + 1) |n_1\rangle = a_1 |n_1 + 1\rangle$ e $|n_2\rangle = a_2^\dagger |n_2 - 1\rangle$, aplicando estes operadores na eq. 2.5, teremos a seguinte expressão:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = Da_2^\dagger a_1 \sum_{n_1, n_2} P(n_1 + 1, n_2 - 1, t) (a_1^\dagger)^{n_1+1} (a_2^\dagger)^{n_2-1} |0\rangle - Da_1^\dagger a_1 \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle. \quad (2.6)$$

Podemos notar que os termos da somatória é a própria definição de $|\psi(t)\rangle$, logo teremos:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = Da_2^\dagger a_1 |\psi(t)\rangle - Da_1^\dagger a_1 |\psi(t)\rangle = D(a_2^\dagger - a_1^\dagger) a_1 |\psi(t)\rangle. \quad (2.7)$$

O Hamiltoniano de difusão é igual a menos a variação em função do tempo do vetor estado $\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_{1 \rightarrow 2}(a_1^\dagger, a_2^\dagger, a_1)$, onde $H_{1 \rightarrow 2}(a_1^\dagger, a_2^\dagger, a_1) = -D(a_2^\dagger - a_1^\dagger) a_1$.

Calcularemos agora a situação em que uma partícula volta para o sítio 1 partindo do sítio 2, teremos então a seguinte distribuição de probabilidades

$$\frac{\partial}{\partial t} P(n_1, n_2, t) = D(n_2 + 1)P(n_1 - 1, n_2 + 1, t) - Dn_2 P(n_1, n_2, t). \quad (2.8)$$

Fazendo o mesmo procedimento, aplicaremos a distribuição de probabilidade da eq. 2.8 na variação

temporal do vetor estado da eq. 2.3 desta forma teremos,

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2} \left[D(n_2 + 1)P(n_1 - 1, n_2 + 1, t) - Dn_2P(n_1, n_2, t) \right] (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle; \quad (2.9)$$

$$= \sum_{n_1, n_2} \left[D(n_2 + 1)P(n_1 - 1, n_2 + 1, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle - Dn_2P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle \right]. \quad (2.10)$$

Aplicando similarmente os operadores bosônicos de criação e aniquilação, teremos:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = Da_1^\dagger a_2 \sum_{n_1, n_2} P(n_1 - 1, n_2 + 1, t) (a_1^\dagger)^{n_1 - 1} (a_2^\dagger)^{n_2 + 1} |0\rangle - Da_2^\dagger a_1 \sum_{n_1, n_2} P(n_1, n_2, t) (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} |0\rangle. \quad (2.11)$$

Notamos que os termos da somatória também é a própria definição de $|\psi(t)\rangle$, obtendo

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = Da_1^\dagger a_2 |\psi(t)\rangle - Da_2^\dagger a_1 |\psi(t)\rangle = D(a_1^\dagger - a_2^\dagger) a_2 |\psi(t)\rangle. \quad (2.12)$$

Logo o Hamiltoniano de difusão da partícula pular do sítio 2 para o sítio 1, é de fato $H_{2 \rightarrow 1}(a_1^\dagger, a_2^\dagger, a_2) = -D(a_1^\dagger - a_2^\dagger) a_2$

Obtendo os dois resultados dos Hamiltonianos da partícula pulando do sítio 1 para o sítio 2 e vice-versa, obtemos o Hamiltoniano total do sistema através da soma $H_{1 \rightarrow 2} + H_{2 \rightarrow 1}$

$$H_{1 \rightarrow 2} + H_{2 \rightarrow 1} = D(a_1^\dagger - a_2^\dagger)(a_2 - a_1). \quad (2.13)$$

2.2 Generalização para N sítios em uma cadeia linear

Com o resultado do Hamiltoniano para difusão em dois sítios, podemos usar o caso geral em que a partícula pode saltar para o sítio mais próximo em uma cadeia linear.

Como mostra na fig. 2.2 as partículas podem saltar para o sítio (ou caixa) j mais próximo até N caixas. Para o caso geral de N sítios, o Hamiltoniano para este tipo de cadeia linear (1 D) é dado pela expressão,

$$H = D \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger - a_j^\dagger)(a_{j+1} - a_j). \quad (2.14)$$

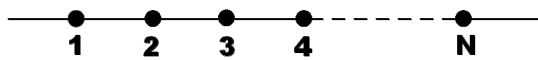


Figura 2.2: Difusão em N sítios.

Conseguimos mapear a Equação-Mestra em uma equação de Schroedinger para o caso de difusão de dois sítios, podendo agora estudar o caso diversas partículas descorrelacionadas nas caixas

para encontrar as probabilidades do sistema. A seguir, analisaremos vários exemplos com várias quantidades de partículas e de caixas.

Capítulo 3

Resultados

3.1 Exemplo 2 partículas e 2 caixas

Vamos analisar agora a situação de duas partículas e duas caixas, como trata-se de partículas bosônicas, as partículas podem se comportar na mesma caixa. Com duas partículas e duas caixas temos três possibilidades de ocupações, sendo: duas partículas na caixa 1, uma partícula na caixa 1 e outra partícula na caixa 2, e duas partículas na caixa 2; podendo assim chamar de $|20\rangle$, $|11\rangle$ e $|02\rangle$, respectivamente. Para o caso de duas partículas na caixa 1 vamos usar a notação vetor ket $|1\rangle$, para uma partícula em cada caixa iremos usar o vetor ket $|2\rangle$ e para duas partículas na caixa 2 usaremos $|3\rangle$. Como as partículas são distinguíveis, para a configuração $|11\rangle$ mostrado na fig. 3.1, é possível também que a partícula vermelha ocupe a caixa 1 e a verde ocupe a caixa 2 é uma configuração possível, tendo multiplicidade 2.

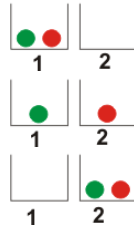


Figura 3.1: Configurações do Sistema de duas partículas e duas caixas.

A evolução temporal do estado do sistema é dado por

$$|\psi(t)\rangle = e^{-Ht}|\psi(0)\rangle, \quad (3.1)$$

onde $|\psi(0)\rangle$ é a condição inicial do sistema.

Precisaremos achar os autovalores de $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ e conseqüentemente achar os autovetores $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3$, para encontrarmos a forma matricial de e^{-Ht} através de

$$e^{-Ht} = Qe^{-Jt}Q^{-1}, \quad (3.2)$$

onde J é a matriz diagonal com os autovalores de H e Q é a matriz dos autovetores de H .

Podemos representar J na forma de matriz, como:

$$J = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

e e^{-Jt} , como:

$$e^{-Jt} = \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 t} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\lambda_2 t} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Para isso, iremos achar o Hamiltoniano do sistema,

$$H = \begin{pmatrix} \langle 1|H|1\rangle & \langle 1|H|2\rangle & \langle 1|H|3\rangle \\ \langle 2|H|1\rangle & \langle 2|H|2\rangle & \langle 2|H|3\rangle \\ \langle 3|H|1\rangle & \langle 3|H|2\rangle & \langle 3|H|3\rangle \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Onde a representação em termos de operadores de criação e aniquilação em cada sítio é:

$$H = D \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger - a_j^\dagger)(a_{j+1} - a_j), \quad (3.6)$$

sendo o N igual ao número de sítios.

Usaremos a taxa de difusão $D=1$ para todos os casos.

$$H = (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1). \quad (3.7)$$

Aplicaremos no Hamiltoniano todas as configurações possíveis, que para simplificar em algumas situações o cálculo usaremos as notações $|1\rangle$, $|2\rangle$ e $|3\rangle$.

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1)|1\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_1|1\rangle - a_1^\dagger a_2|1\rangle + a_1^\dagger a_1|1\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|20\rangle - a_2^\dagger a_1|20\rangle - a_1^\dagger a_2|20\rangle + a_1^\dagger a_1|20\rangle; \\ &= a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(2|10\rangle) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(2|10\rangle); \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$= -2|11\rangle + 2|20\rangle = 2|1\rangle - 2|2\rangle. \quad (3.9)$$

Donde obtemos os seguintes elementos da primeira coluna da representação matricial de H

$$\langle 1|H|1\rangle = \langle 1|(2|1\rangle - 2|2\rangle) = 2\langle 1|1\rangle - 2\langle 1|1\rangle = 2;$$

$$\langle 2|H|1\rangle = \langle 2|(2|1\rangle - 2|2\rangle) = 2\langle 2|1\rangle - 2\langle 2|2\rangle = -2;$$

$$\langle 3|H|1\rangle = \langle 3|(2|1\rangle - 2|2\rangle) = 2\langle 3|1\rangle - 2\langle 3|2\rangle = 0.$$

$$H|2\rangle = (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1)|2\rangle; \quad (3.10)$$

$$= a_2^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_1|2\rangle - a_1^\dagger a_2|2\rangle + a_1^\dagger a_1|2\rangle;$$

$$= a_2^\dagger a_2|11\rangle - a_2^\dagger a_1|11\rangle - a_1^\dagger a_2|11\rangle + a_1^\dagger a_1|11\rangle;$$

$$= a_2^\dagger(1|10\rangle) - a_2^\dagger(1|01\rangle) - a_1^\dagger(1|10\rangle) + a_1^\dagger(1|01\rangle);$$

$$= 1|11\rangle - 1|02\rangle - 1|20\rangle + 1|11\rangle = |2\rangle - |3\rangle - |1\rangle + |2\rangle. \quad (3.11)$$

Segunda coluna

$$\langle 1|H|2\rangle = \langle 1|(|2\rangle - |3\rangle - |1\rangle + |2\rangle) = \langle 1|2\rangle - \langle 1|3\rangle - \langle 1|1\rangle + \langle 1|2\rangle = -1;$$

$$\langle 2|H|2\rangle = \langle 2|(|2\rangle - |3\rangle - |1\rangle + |2\rangle) = \langle 2|2\rangle - \langle 2|3\rangle - \langle 2|1\rangle + \langle 2|2\rangle = 2;$$

$$\langle 3|H|2\rangle = \langle 3|(|2\rangle - |3\rangle - |1\rangle + |2\rangle) = \langle 3|2\rangle - \langle 3|3\rangle - \langle 3|1\rangle + \langle 3|2\rangle = -1.$$

$$H|3\rangle = (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1)|3\rangle; \quad (3.12)$$

$$= a_2^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_1|3\rangle - a_1^\dagger a_2|3\rangle + a_1^\dagger a_1|3\rangle;$$

$$= a_2^\dagger a_2|02\rangle - a_2^\dagger a_1|02\rangle - a_1^\dagger a_2|02\rangle + a_1^\dagger a_1|02\rangle;$$

$$= a_2^\dagger(2|01\rangle) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(2|01\rangle) + a_1^\dagger(0);$$

$$= 2|02\rangle - 2|11\rangle = 2|3\rangle - 2|2\rangle. \quad (3.13)$$

Terceira coluna

$$\langle 1|H|3\rangle = \langle 1|(2|3\rangle - 2|2\rangle) = 2\langle 1|3\rangle - 2\langle 1|2\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|3\rangle = \langle 2|(2|3\rangle - 2|2\rangle) = 2\langle 2|3\rangle - 2\langle 2|2\rangle = -2;$$

$$\langle 3|H|3\rangle = \langle 3|(2|3\rangle - 2|2\rangle) = 2\langle 3|3\rangle - 2\langle 3|2\rangle = 2.$$

Finalmente, encontramos a representação matricial de H

$$H = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Obtendo os valores do Hamiltoniano, podemos achar os autovalores e autovetores através do

$$\det(H - \lambda I_n) = 0; \quad (3.15)$$

$$= \left[\begin{pmatrix} (2-\lambda) & -1 & 0 \\ -2 & (2-\lambda) & -2 \\ 0 & -1 & (2-\lambda) \end{pmatrix} \right] = 0;$$

$$(2-\lambda)[(2-\lambda)(2-\lambda) - 2] + [(-2)(2-\lambda)] = 0;$$

$$(2-\lambda)[\lambda(\lambda - 4)] = 0;$$

sendo $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 2, \lambda_3 = 4$ os autovalores.

Podemos achar os autovetores através de $Ax = \lambda x$.

Para $\lambda_1 = 0$ temos,

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = 0 \\ -2x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 0 \\ -x_2 + 2x_3 = 0; \end{cases}$$

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

para $\lambda_2 = 2$ temos,

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = 2x_1 \\ -2x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 2x_2 \\ -x_2 + 2x_3 = 2x_3; \end{cases}$$

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

para $\lambda_3 = 4$ temos,

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 4 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = 4x_1 \\ -2x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 4x_2 \\ -x_2 + 2x_3 = 4x_3; \end{cases}$$

$$\vec{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Finalmente, encontramos a matriz dos autovetores de H

$$Q = \begin{matrix} & \lambda = 0 & \lambda = 2 & \lambda = 4 \\ \begin{pmatrix} x_1 & x'_1 & x''_1 \\ x_2 & x'_2 & x''_2 \\ x_3 & x'_3 & x''_3 \end{pmatrix}; \end{matrix}$$

$$Q = \begin{matrix} & \lambda = 0 & \lambda = 2 & \lambda = 4 \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{matrix} \quad (3.19)$$

Queremos agora obter a inversa da matriz Q , que será demonstrado no Apêndice A com o método utilizado pelo livro *Álgebra Linear e Aplicações* [3].

$$\sim \begin{matrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & \vdots & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & \vdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (3.20)$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L_2 \\ L'_3 \rightarrow L_3 - L_1 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & -2 & \vdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \vdots & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L'_2 \rightarrow \frac{L_2}{2} \\ L'_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & \vdots & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \vdots & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L''_2 \rightarrow L_1 - L'_2 \\ L'_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & \vdots & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \vdots & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L''_2 \\ L''_3 \rightarrow L'_3 + 2L_2 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & \vdots & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 4 & \vdots & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L''_2 \\ L'''_3 \rightarrow \frac{L''_3}{4} \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & \vdots & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L'''_2 \rightarrow L''_2 - L'''_3 \\ L'''_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & \vdots & \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L_2^{IV} \rightarrow L_2''' - L_3''' \\ L_3''' \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1' \rightarrow L_1 - L_2^{IV} \\ \sim L_2^{IV} \\ L_3''' \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1'' \rightarrow L_1' - L_3''' \\ \sim L_2^{IV} \\ L_3''' \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \vdots & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix};$$

Encontramos finalmente a inversa de Q

$$Q^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix};$$

$$Q^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

Com isso podemos achar e^{-Ht} através da eq. 3.2

$$\begin{aligned} e^{-Ht} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 t} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\lambda_2 t} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix} \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}; \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 t} & e^{-\lambda_1 t} & e^{-\lambda_1 t} \\ 2e^{-\lambda_2 t} & 0 & -2e^{-\lambda_2 t} \\ e^{-\lambda_3 t} & -e^{-\lambda_3 t} & e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix}; \end{aligned}$$

$$e^{-Ht} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 t} + 2e^{-\lambda_2 t} + e^{-\lambda_3 t} & e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_3 t} & e^{-\lambda_1 t} - 2e^{-\lambda_2 t} + e^{-\lambda_3 t} \\ 2e^{-\lambda_1 t} - 2e^{-\lambda_3 t} & 2e^{-\lambda_1 t} + 2e^{-\lambda_3 t} & 2e^{-\lambda_1 t} - 2e^{-\lambda_3 t} \\ e^{-\lambda_1 t} - 2e^{-\lambda_2 t} + e^{-\lambda_3 t} & e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_3 t} & e^{-\lambda_1 t} + 2e^{-\lambda_2 t} + e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix}.$$

Lembrando que $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 2$ e $\lambda_3 = 4$, temos então

$$e^{-Ht} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 2 - 2e^{-4t} & 2 + 2e^{-4t} & 2 - 2e^{-4t} \\ 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Usando a condição inicial $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ na eq. 3.1

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 2 - 2e^{-4t} & 2 + 2e^{-4t} & 2 - 2e^{-4t} \\ 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 2 - 2e^{-4t} \\ 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 - 2e^{-4t} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \left(1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \left(2 - 2e^{-4t} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \left(1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$|\psi(t)\rangle = P_1(t)|1\rangle + P_2(t)|2\rangle + P_3(t)|3\rangle. \quad (3.23)$$

$$P_1(t) = \frac{1}{4}(1 + 2e^{-2t} + e^{-4t}); \quad (3.24)$$

$$P_2(t) = \frac{1}{4}(2 - 2e^{-4t}); \quad (3.25)$$

$$P_3(t) = \frac{1}{4}(1 - 2e^{-2t} + e^{-4t}). \quad (3.26)$$

Os $P'_i(t)$ são as probabilidades de encontrar o sistema em um dos três estados ou configurações

e seus comportamentos em função tempo são mostrados na figura 3.2.

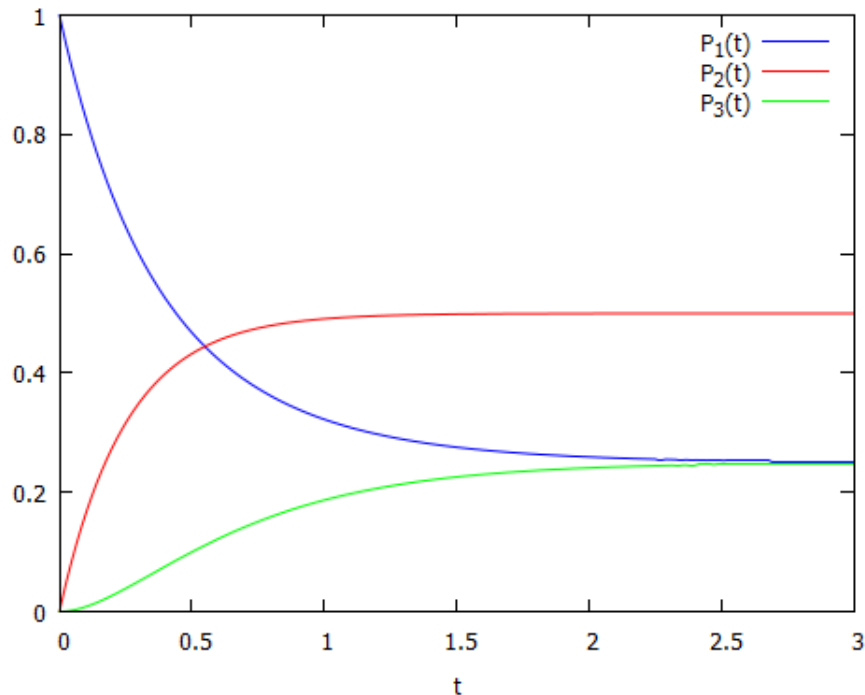


Figura 3.2: Probabilidades do sistema de duas partículas e dois sítios. Utilizando a condição inicial $|1\rangle$.

Na fig. 3.2 percebe-se que em três segundos já dá para notar o valor das probabilidades estacionadas; note que a $P_2(t)$ (linha vermelha), no assintótico, tem probabilidade maior do que as probabilidades $P_1(t)$ (linha azul) e $P_3(t)$ (linha verde), isto se dá pelo fato de que a configuração $|11\rangle$ (uma partícula verde e outra vermelha em cada caixa), podem permutar a localização das partículas na caixa obtendo multiplicidade dois do sistema. Enquanto $P_2(t)$ vai para $1/2$, $P_1(t)$ e $P_3(t)$ vão para o valor de $1/4$, para o tempo longo.

Usando a condição inicial $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ na eq. 3.1.

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 2 - 2e^{-4t} & 2 + 2e^{-4t} & 2 - 2e^{-4t} \\ 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 - e^{-4t} \\ 2 + 2e^{-4t} \\ 1 - e^{-4t} \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 - e^{-4t} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 + 2e^{-4t} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 - e^{-4t} \end{pmatrix}.$$

Temos então,

$$|\psi(t)\rangle = P_1'(t)|1\rangle + P_2'(t)|2\rangle + P_3'(t)|3\rangle; \quad (3.27)$$

$$P_1'(t) = \frac{1}{4}(1 - e^{-4t}); \quad (3.28)$$

$$P_2'(t) = \frac{1}{4}(2 + 2e^{-4t}); \quad (3.29)$$

$$P_3'(t) = \frac{1}{4}(1 - e^{-4t}). \quad (3.30)$$

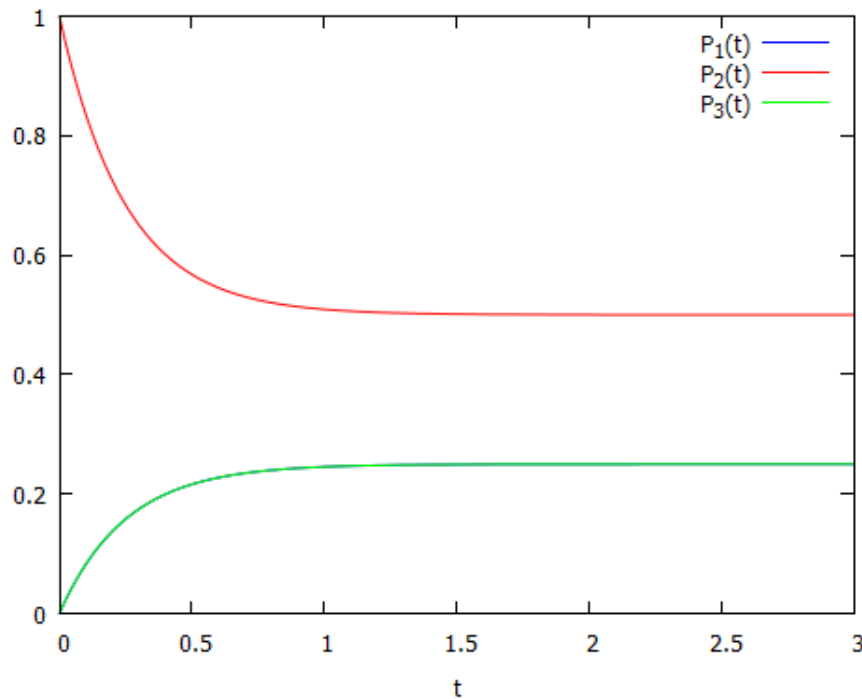


Figura 3.3: Probabilidades do sistema de duas partículas e dois sítios. Utilizando a condição inicial $|2\rangle$.

Na fig. 3.3 com a condição inicial $|2\rangle$, nota-se que a $P_2(t)$ tem inicialmente o valor próximo de 1 e com o passar do tempo seu valor vai para $1/2$. Já as probabilidades $P_1(t)$ e $P_3(t)$ seus valores são próximos do zero e com o passar do tempo seus valores vão para $1/4$.

Usando a condição inicial $|3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ na eq. 3.1.

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 2 - 2e^{-4t} & 2 + 2e^{-4t} & 2 - 2e^{-4t} \\ 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} & 1 - e^{-4t} & 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 2 - 2e^{-4t} \\ 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 - 2e^{-2t} + e^{-4t} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 - 2e^{-4t} \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 + 2e^{-2t} + e^{-4t} \end{pmatrix};$$

$$|\psi(t)\rangle = P_1''(t)|1\rangle + P_2''(t)|2\rangle + P_3''(t)|3\rangle; \quad (3.31)$$

$$P_1''(t) = \frac{1}{4}(1 - 2e^{-2t} + e^{-4t}); \quad (3.32)$$

$$P_2''(t) = \frac{1}{4}(2 - 2e^{-4t}); \quad (3.33)$$

$$P_3''(t) = \frac{1}{4}(1 + 2e^{-2t} + e^{-4t}). \quad (3.34)$$

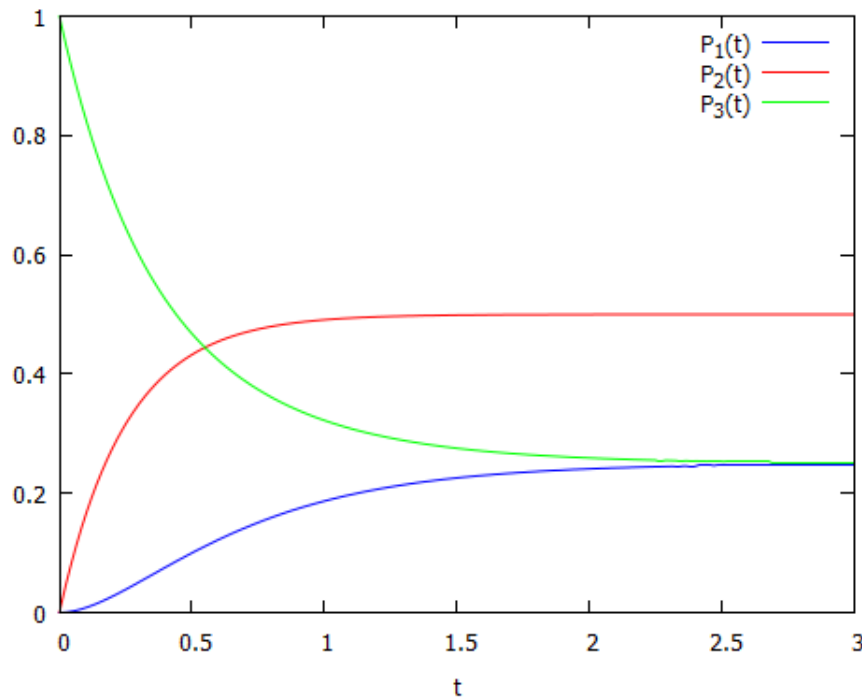


Figura 3.4: Probabilidades do sistema de duas partículas e dois sítios. Utilizando a condição inicial $|3\rangle$.

Na fig. 3.4 com a configuração inicial $|3\rangle$, inicialmente a probabilidade $P_3(t)$ (linha verde) tem o valor próximo de 1 e com o passar do tempo sua probabilidade cai para $1/4$, já as probabilidades $P_1(t)$ (linha azul) e $P_2(t)$ (linha vermelha) inicialmente seu valor é próximo de zero e seus valores vão para $1/4$ e $1/2$, respectivamente.

Obtendo as probabilidades nas configurações possíveis podemos agora calcular o número médio de partículas nas caixas, onde $n_j(t)$ é o número médio de partículas na caixa j considerando que o sistema se encontra na configuração η e $\langle n_j(t) \rangle$ é o número médio de partículas ocupando a caixa j em um instante de tempo t .

Vamos calcular o número médio de partículas na condição inicial em que as duas partículas estão

na primeira caixa, estado $|1\rangle$.

$$\langle n_j(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^3 n_j^\eta P_\eta(t), \quad (3.35)$$

Escolhendo a caixa 1, temos:

$$\langle n_1(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^3 n_1^\eta P_\eta(t) = n_1^1 P_1(t) + n_1^2 P_2(t) + n_1^3 P_3(t); \quad (3.36)$$

$$= 2.P_1(t) + 1.P_2(t) + 0.P_3(t) = 2P_1(t) + 1P_2(t);$$

$$= 2 \left[\frac{1}{4}(1 + 2e^{-2t} + e^{-4t}) \right] + \frac{1}{4}(2 - 2e^{-4t});$$

$$= 1 + e^{-2t}. \quad (3.37)$$

Escolhendo a caixa 2, temos:

$$\langle n_2(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^3 n_2^\eta P_\eta(t) = n_2^1 P_1(t) + n_2^2 P_2(t) + n_2^3 P_3(t); \quad (3.38)$$

$$= 0.P_1(t) + 1.P_2(t) + 2.P_3(t) = P_2(t) + 2P_3(t);$$

$$= \frac{1}{4}(2 - 2e^{-4t}) + 2 \left[\frac{1}{4}(1 - 2e^{-2t} + 2e^{-4t}) \right];$$

$$= 1 - e^{-2t}. \quad (3.39)$$

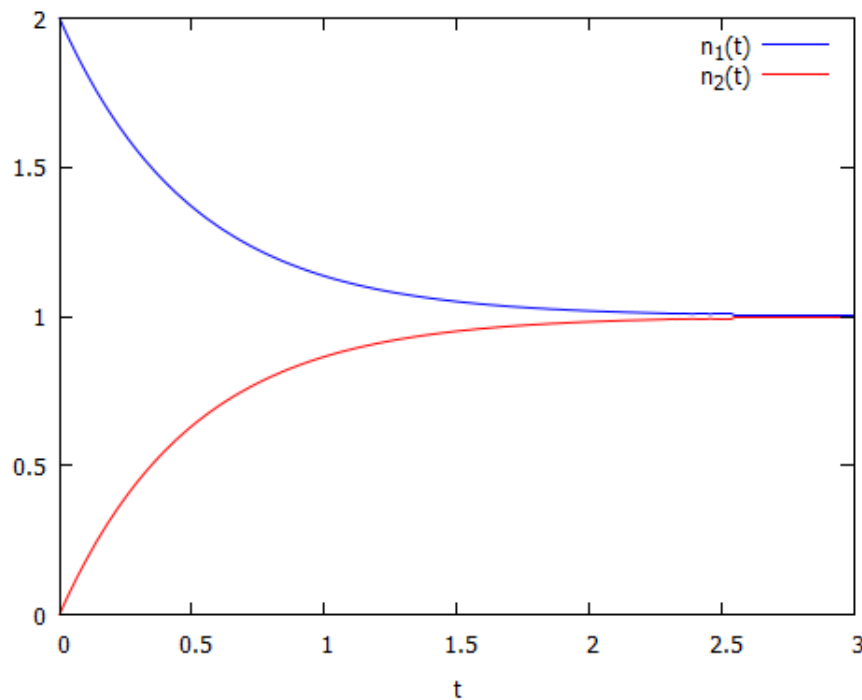


Figura 3.5: Número médio de partículas com a configuração inicial com duas partículas na caixa 1 e nenhuma partícula na caixa 2.

Observa-se no gráfico da fig. 3.5 que no instante $t = 0$ o número médio de partículas corresponde a duas partículas na caixa 1 e nenhuma partícula na caixa 2, a medida que o tempo passa, no assintótico, o número médio de partículas vai exponencialmente para a configuração de uma partícula na caixa 1 e uma partícula na caixa 2.

3.2 Exemplo 1 partícula e 3 caixas

Para o caso de uma partícula e três caixas temos as seguintes configurações $|100\rangle$, $|010\rangle$ e $|001\rangle$; que significa os três estados possíveis, de uma partícula na caixa 1, uma partícula na caixa 2 e uma partícula na caixa 3. Para o caso de uma partícula na caixa 1 vamos usar a notação vetor ket $|1\rangle$, para uma partícula na caixa 2 o vetor ket $|2\rangle$ e para uma partícula na caixa 3 o vetor ket $|3\rangle$. Como pode ser visto na fig. 3.6.

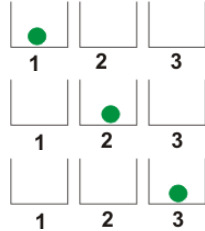


Figura 3.6: Configurações do sistema de uma partícula e três caixas.

Como visto no capítulo anterior o hamiltoniano para um número N de caixas é dado por

$$H = D \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger - a_j^\dagger)(a_{j+1} - a_j). \quad (3.40)$$

Usando o Hamiltoniano para estas configurações, ou seja, $N = 3$, teremos:

$$\begin{aligned} H &= (a_2^\dagger - a_1^\dagger)(a_2 - a_1) + (a_3^\dagger - a_2^\dagger)(a_3 - a_2); \\ &= a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Vamos agora calcular os elementos de matriz da representação matricial de H . Primeiramente, vamos aplicar H nos vetores da base:

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2)|1\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_1|1\rangle - a_1^\dagger a_2|1\rangle + a_1^\dagger a_1|1\rangle + a_3^\dagger a_3|1\rangle - a_3^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_3|1\rangle + a_2^\dagger a_2|1\rangle; \\ H|100\rangle &= a_2^\dagger a_2|100\rangle - a_2^\dagger a_1|100\rangle - a_1^\dagger a_2|100\rangle + a_1^\dagger a_1|100\rangle + a_3^\dagger a_3|100\rangle - a_3^\dagger a_2|100\rangle - a_2^\dagger a_3|100\rangle + a_2^\dagger a_2|100\rangle; \\ &= a_2^\dagger(o) - a_2^\dagger|000\rangle - a_1^\dagger(o) + a_1^\dagger|000\rangle + a_3^\dagger(o) - a_3^\dagger(o) - a_2^\dagger(o) + a_2^\dagger(o); \\ &= -|010\rangle + |100\rangle = -|2\rangle + |1\rangle. \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$H|2\rangle = (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2)|2\rangle; \quad (3.43)$$

$$= a_2^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_1|2\rangle - a_1^\dagger a_2|2\rangle + a_1^\dagger a_1|2\rangle + a_3^\dagger a_3|2\rangle - a_3^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_3|2\rangle + a_2^\dagger a_2|2\rangle;$$

$$H|010\rangle = a_2^\dagger a_2|010\rangle - a_2^\dagger a_1|010\rangle - a_1^\dagger a_2|010\rangle + a_1^\dagger a_1|010\rangle + a_3^\dagger a_3|010\rangle - a_3^\dagger a_2|010\rangle - a_2^\dagger a_3|010\rangle + a_2^\dagger a_2|010\rangle;$$

$$= a_2^\dagger|000\rangle - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger|000\rangle + a_1^\dagger(0) + a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger|000\rangle - a_2^\dagger(0) + a_2^\dagger|000\rangle;$$

$$|010\rangle - |100\rangle - |001\rangle + |010\rangle = |2\rangle - |1\rangle - |3\rangle + |2\rangle. \quad (3.44)$$

$$H|3\rangle = (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2)|3\rangle; \quad (3.45)$$

$$= a_2^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_1|3\rangle - a_1^\dagger a_2|3\rangle + a_1^\dagger a_1|3\rangle + a_3^\dagger a_3|3\rangle - a_3^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_3|3\rangle + a_2^\dagger a_2|3\rangle;$$

$$H|001\rangle = a_2^\dagger a_2|001\rangle - a_2^\dagger a_1|001\rangle - a_1^\dagger a_2|001\rangle + a_1^\dagger a_1|001\rangle + a_3^\dagger a_3|001\rangle - a_3^\dagger a_2|001\rangle - a_2^\dagger a_3|001\rangle + a_2^\dagger a_2|001\rangle;$$

$$= a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(0) + a_3^\dagger|000\rangle - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger|000\rangle + a_2^\dagger(0);$$

$$|001\rangle - |010\rangle = |3\rangle - |2\rangle. \quad (3.46)$$

Encontramos os seguintes elementos para a primeira coluna de H :

$$\langle 1|H|1\rangle = \langle 1|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 1|2\rangle + \langle 1|1\rangle = 1;$$

$$\langle 2|H|1\rangle = \langle 2|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 2|2\rangle + \langle 2|1\rangle = 1;$$

$$\langle 3|H|1\rangle = \langle 3|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 3|2\rangle + \langle 3|1\rangle = 0.$$

Para a segunda coluna:

$$\langle 1|H|2\rangle = \langle 1|(|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle + |2\rangle) = \langle 1|2\rangle - \langle 1|1\rangle - \langle 1|3\rangle + \langle 1|2\rangle = -1;$$

$$\langle 2|H|2\rangle = \langle 2|(|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle + |2\rangle) = \langle 2|2\rangle - \langle 2|1\rangle - \langle 2|3\rangle + \langle 2|2\rangle = 2;$$

$$\langle 3|H|2\rangle = \langle 3|(|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle + |2\rangle) = \langle 3|2\rangle - \langle 3|1\rangle - \langle 3|3\rangle + \langle 3|2\rangle = -1.$$

E finalmente para a terceira:

$$\langle 1|H|3\rangle = \langle 1|(|3\rangle - |2\rangle) = \langle 1|3\rangle - \langle 1|2\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|3\rangle = \langle 2|(|3\rangle - |2\rangle) = \langle 2|3\rangle - \langle 2|2\rangle = -1;$$

$$\langle 3|H|3\rangle = \langle 3|(|3\rangle - |2\rangle) = \langle 3|3\rangle - \langle 3|2\rangle = 1.$$

Temos então a representação matricial de H

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

Obtendo o Hamiltoniano do sistema, podemos achar os autovalores e os autovetores através do

$$\det(H - \lambda I_n) = 0; \quad (3.48)$$

$$\det(H - \lambda) = \left[\begin{pmatrix} (1 - \lambda) & -1 & 0 \\ -1 & (2 - \lambda) & -1 \\ 0 & -1 & (1 - \lambda) \end{pmatrix} \right] = 0;$$

$$(1 - \lambda)[(2 - \lambda)(1 - \lambda) - 1] + [(-1)(1 - \lambda)] = 0;$$

$$(1 - \lambda)[\lambda(\lambda - 3)] = 0.$$

Encontramos os autovalores $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 1$, $\lambda_3 = 3$ e conseqüentemente, podemos obter os autovetores.

Para $\lambda_1 = 0$, temos:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = 0 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 = 0 \\ -x_2 + x_3 = 0; \end{cases}$$

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Para $\lambda_2 = 1$, temos:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = x_1 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 = x_2 \\ -x_2 + x_3 = x_3; \end{cases}$$

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Para $\lambda_2 = 3$, temos:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix};$$

$$\begin{cases} x_1 - x_2 = 3x_1 \\ -x_1 + 2x_2 - x_3 = 3x_2 \\ -x_2 + x_3 = 3x_3; \end{cases}$$

$$\vec{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos então escrever a matriz dos autovetores de H

$$Q = \begin{matrix} \lambda = 0 & \lambda = 1 & \lambda = 3 \\ \begin{pmatrix} x_1 & x'_1 & x''_1 \\ x_2 & x'_2 & x''_2 \\ x_3 & x'_3 & x''_3 \end{pmatrix}; \end{matrix}$$

$$Q = \begin{matrix} \lambda = 0 & \lambda = 1 & \lambda = 3 \\ \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{matrix} \tag{3.49}$$

Queremos agora obter a inversa da matriz Q , que será demonstrado no Apêndice *A* com o método utilizado pelo livro *Álgebra Linear e Aplicações* [3].

$$\sim \begin{matrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \end{matrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & \vdots & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & \vdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \tag{3.50}$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L_2 \\ L'_3 \rightarrow L_3 - L_2 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & \vdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & \vdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L'_2 \rightarrow L_2 - L_1 \\ L'_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -3 & \vdots & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & \vdots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L'_2 \\ L''_3 \rightarrow \frac{L'_3}{6} - \frac{L'_2}{6} \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -3 & \vdots & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L_1 \\ \sim L''_2 \rightarrow -L'_2 - 3L''_3 \\ L''_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \vdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L'_1 \rightarrow L_1 - L''_2 \\ \sim L''_2 \\ L''_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix};$$

$$\begin{array}{l} L''_1 \rightarrow L'_1 - L''_3 \\ \sim L''_2 \\ L''_3 \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \vdots & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 & 0 & \vdots & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \vdots & \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix};$$

Finalmente, obtemos a matriz inversa de Q

$$Q^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Encontramos e^{-Ht} através da eq. 3.2

$$\begin{aligned} e^{-Ht} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\lambda_1 t} & 0 & 0 \\ 0 & e^{-\lambda_2 t} & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{6} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{pmatrix}; \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} \\ \frac{1}{2}e^{-\lambda_2 t} & 0 & -\frac{1}{2}e^{-\lambda_2 t} \\ \frac{1}{6}e^{-\lambda_3 t} & -\frac{1}{3}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{6}e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix}; \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} + \frac{1}{2}e^{-\lambda_2 t} + \frac{1}{6}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} - \frac{1}{3}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} - \frac{1}{2}e^{-\lambda_2 t} + \frac{1}{6}e^{-\lambda_3 t} \\ \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} - \frac{1}{3}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} + \frac{2}{3}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} - \frac{1}{3}e^{-\lambda_3 t} \\ \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} - \frac{1}{2}e^{-\lambda_2 t} + \frac{1}{6}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} - \frac{1}{3}e^{-\lambda_3 t} & \frac{1}{3}e^{-\lambda_1 t} + \frac{1}{2}e^{-\lambda_2 t} + \frac{1}{6}e^{-\lambda_3 t} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Aplicando os autovalores $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 3$, temos então:

$$e^{-Ht} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} & \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} & \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{3}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} & \frac{1}{3} + \frac{2}{3}e^{-3t} & \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} & \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} & \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

O vetor estado é dado por $|\psi(t)\rangle = e^{-Ht}|\psi(0)\rangle$ e usando a condição inicial $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ no espaço

vetor, temos

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{3}e^{-3t} \end{pmatrix};$$

$$P_1(t) = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t}; \quad (3.53)$$

$$P_2(t) = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t}; \quad (3.54)$$

$$P_3(t) = \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{3}e^{-3t}. \quad (3.55)$$

Usando a condição inicial $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ no espaço vetor, temos

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} + \frac{2}{3}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \end{pmatrix};$$

$$P'_1(t) = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t}; \quad (3.56)$$

$$P'_2(t) = \frac{1}{3} + \frac{2}{3}e^{-3t}; \quad (3.57)$$

$$P'_3(t) = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t}. \quad (3.58)$$

E usando a condição inicial $|3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ no espaço vetor, temos

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \\ \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \end{pmatrix};$$

$$P''_1(t) = \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t}; \quad (3.59)$$

$$P''_2(t) = \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t}; \quad (3.60)$$

$$P''_3(t) = \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t}. \quad (3.61)$$

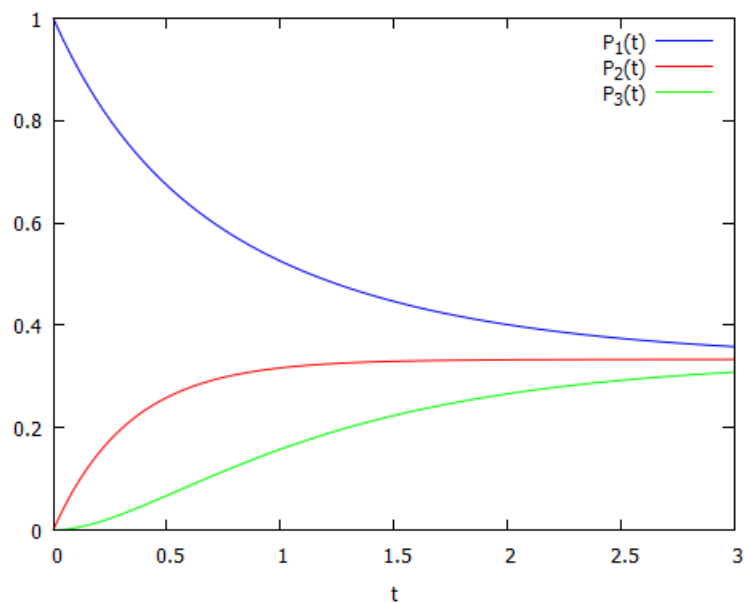


Figura 3.7: Probabilidades do sistema de uma partícula e três caixas. Utilizando a condição inicial $|1\rangle$.

Nota-se na fig. 3.7 que utilizando a condição inicial $|1\rangle$ a partícula se encontra na caixa 1 e com o passar do tempo as probabilidades $P_1(t)$, $P_2(t)$ e $P_3(t)$ de encontrar a partícula em cada caixa é de $1/3$.

Vamos agora calcular o número médio de ocupação de cada caixa para a condição inicial $|1\rangle$.

Para a caixa 1:

$$\langle n_1(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^3 n_1^\eta P_\eta(t) = n_1^1 P_1(t) + n_1^2 P_2(t) + n_1^3 P_3(t); \quad (3.62)$$

$$= 1.P_1(t) + 0.P_2(t) + 0.P_3(t) = P_1(t);$$

$$= \frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t}. \quad (3.63)$$

Para caixa 2:

$$\langle n_2(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^3 n_2^\eta P_\eta(t) = n_2^1 P_1(t) + n_2^2 P_2(t) + n_2^3 P_3(t); \quad (3.64)$$

$$= 0.P_1(t) + 1.P_2(t) + 0.P_3(t) = P_2(t);$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t}. \quad (3.65)$$

Para caixa 3:

$$\langle n_3(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^3 n_3^\eta P_\eta(t) = n_3^1 P_1(t) + n_3^2 P_2(t) + n_3^3 P_3(t);$$

$$= 0.P_1(t) + 0.P_2(t) + 1.P_3(t) = P_3(t);$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t}. \quad (3.66)$$

Os números médio de ocupações são representados na fig. 3.8 .

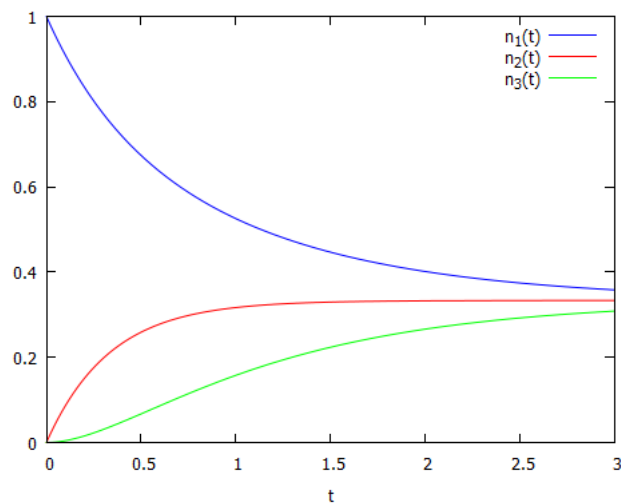


Figura 3.8: Número médio de partículas para a configuração inicial com uma partícula na caixa 1 e nenhuma partícula nas caixas 2 e 3.

Observando o gráfico da fig. 3.8, inicialmente o número médio de partículas é de uma partícula na caixa 1, mas a medida que o tempo passa nota-se que a sua configuração muda com o tempo, no assintótico, chegando a configuração final de número médio de partícula de $1/3$ para cada caixa.

3.3 Exemplo 1 partícula e 4 caixas

Vamos agora começar a aumentar o número de caixas, neste exemplo iremos estudar o caso de uma partícula e quatro caixas.

Para o caso de uma partícula e 4 caixas temos as seguintes configurações possíveis $|1000\rangle, |0100\rangle, |0010\rangle$ e $|0001\rangle$, correspondente a seguintes situações: uma partícula na caixa 1, uma partícula na caixa 2, uma partícula na caixa 3 e uma partícula na caixa 4, respectivamente. Para o caso de uma partícula na caixa 1 vamos usar o vetor ket $|1\rangle$, para uma partícula na caixa 2 o vetor ket $|2\rangle$, para uma partícula na caixa 3 o vetor ket $|3\rangle$ e para uma partícula na caixa 4 o vetor ket $|4\rangle$.

Uma representação gráfica desse sistema pode ser vista na figura 3.8.

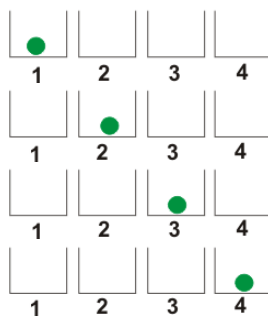


Figura 3.9: Configurações do sistema de uma partícula e quatro caixas.

Iremos repetir os procedimentos dos exemplos anteriores, para $N = 4$.

$$H = D \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger - a_j^\dagger)(a_{j+1} - a_j); \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} H &= D(a_2^\dagger - a_1^\dagger)(a_2 - a_1) + (a_3^\dagger - a_2^\dagger)(a_3 - a_2) + (a_4^\dagger - a_3^\dagger)(a_4 - a_3); \\ &= a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2 + a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 + a_3^\dagger a_3. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Vamos obter a representação matricial para esse caso. Aplicando H nos vetores da base

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2 + a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 + a_3^\dagger a_3)|1\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_1|1\rangle - a_1^\dagger a_2|1\rangle + a_1^\dagger a_1|1\rangle + a_3^\dagger a_3|1\rangle - a_3^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_3|1\rangle + a_2^\dagger a_2|1\rangle + a_4^\dagger a_4|1\rangle - a_4^\dagger a_3|1\rangle - a_3^\dagger a_4|1\rangle + a_3^\dagger a_3|1\rangle; \\ H|1000\rangle &= a_2^\dagger a_2|1000\rangle - a_2^\dagger a_1|1000\rangle - a_1^\dagger a_2|1000\rangle + a_1^\dagger a_1|1000\rangle + a_3^\dagger a_3|1000\rangle - a_3^\dagger a_2|1000\rangle - a_2^\dagger a_3|1000\rangle \\ &\quad + a_2^\dagger a_2|1000\rangle + a_4^\dagger a_4|1000\rangle - a_4^\dagger a_3|1000\rangle - a_3^\dagger a_4|1000\rangle + a_3^\dagger a_3|1000\rangle; \\ &= a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger|0000\rangle - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger|1000\rangle + a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) + a_2^\dagger(0) + a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) + a_3^\dagger(0); \end{aligned}$$

$$= -|0100\rangle + |1000\rangle = -|2\rangle + |1\rangle. \quad (3.69)$$

$$\begin{aligned} H|2\rangle &= (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2 + a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 + a_3^\dagger a_3)|2\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_1|2\rangle - a_1^\dagger a_2|2\rangle + a_1^\dagger a_1|2\rangle + a_3^\dagger a_3|2\rangle - a_3^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_3|2\rangle + a_2^\dagger a_2|2\rangle + a_4^\dagger a_4|2\rangle - a_4^\dagger a_3|2\rangle - a_3^\dagger a_4|2\rangle + a_3^\dagger a_3|2\rangle; \\ H|0100\rangle &= a_2^\dagger a_2|0100\rangle - a_2^\dagger a_1|0100\rangle - a_1^\dagger a_2|0100\rangle + a_1^\dagger a_1|0100\rangle + a_3^\dagger a_3|0100\rangle - a_3^\dagger a_2|0100\rangle - a_2^\dagger a_3|0100\rangle \\ &\quad + a_2^\dagger a_2|0100\rangle + a_4^\dagger a_4|0100\rangle - a_4^\dagger a_3|0100\rangle - a_3^\dagger a_4|0100\rangle + a_3^\dagger a_3|0100\rangle; \\ &= a_2^\dagger|0000\rangle - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger|0000\rangle + a_1^\dagger(0) + a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger|0000\rangle - a_2^\dagger(0) + a_2^\dagger|0000\rangle + a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) + a_3^\dagger(0); \\ &= |0100\rangle - |1000\rangle - |0010\rangle + |0100\rangle = 2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle. \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$\begin{aligned} H|3\rangle &= (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2 + a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 + a_3^\dagger a_3)|3\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_1|3\rangle - a_1^\dagger a_2|3\rangle + a_1^\dagger a_1|3\rangle + a_3^\dagger a_3|3\rangle - a_3^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_3|3\rangle + a_2^\dagger a_2|3\rangle + a_4^\dagger a_4|3\rangle - a_4^\dagger a_3|3\rangle - a_3^\dagger a_4|3\rangle + a_3^\dagger a_3|3\rangle; \\ H|0010\rangle &= a_2^\dagger a_2|0010\rangle - a_2^\dagger a_1|0010\rangle - a_1^\dagger a_2|0010\rangle + a_1^\dagger a_1|0010\rangle + a_3^\dagger a_3|0010\rangle - a_3^\dagger a_2|0010\rangle - a_2^\dagger a_3|0010\rangle + \\ &\quad a_2^\dagger a_2|0010\rangle + a_4^\dagger a_4|0010\rangle - a_4^\dagger a_3|0010\rangle - a_3^\dagger a_4|0010\rangle + a_3^\dagger a_3|0010\rangle; \\ &= a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(0) + a_3^\dagger|0000\rangle - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger|0000\rangle + a_2^\dagger(0) + a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger|0000\rangle - a_3^\dagger(0) + a_3^\dagger|0000\rangle; \\ &= |0010\rangle - |0100\rangle - |0001\rangle + |0010\rangle = 2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle. \end{aligned} \quad (3.71)$$

$$\begin{aligned} H|4\rangle &= (a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + a_2^\dagger a_2 + a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 + a_3^\dagger a_3)|4\rangle; \\ &= a_2^\dagger a_2|4\rangle - a_2^\dagger a_1|4\rangle - a_1^\dagger a_2|4\rangle + a_1^\dagger a_1|4\rangle + a_3^\dagger a_3|4\rangle - a_3^\dagger a_2|4\rangle - a_2^\dagger a_3|4\rangle + a_2^\dagger a_2|4\rangle + a_4^\dagger a_4|4\rangle - a_4^\dagger a_3|4\rangle - a_3^\dagger a_4|4\rangle + a_3^\dagger a_3|4\rangle; \\ H|0001\rangle &= a_2^\dagger a_2|0001\rangle - a_2^\dagger a_1|0001\rangle - a_1^\dagger a_2|0001\rangle + a_1^\dagger a_1|0001\rangle + a_3^\dagger a_3|0001\rangle - a_3^\dagger a_2|0001\rangle - a_2^\dagger a_3|0001\rangle \\ &\quad + a_2^\dagger a_2|0001\rangle + a_4^\dagger a_4|0001\rangle - a_4^\dagger a_3|0001\rangle - a_3^\dagger a_4|0001\rangle + a_3^\dagger a_3|0001\rangle; \\ &= a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(0) + a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) + a_2^\dagger(0) + a_4^\dagger|0000\rangle - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger|0000\rangle + a_3^\dagger(0); \\ &= |0001\rangle - |0010\rangle = |4\rangle - |3\rangle. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Encontramos os seguintes elementos para a primeira coluna de H :

$$\langle 1|H|1\rangle = \langle 1|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 1|2\rangle + \langle 1|1\rangle = 1;$$

$$\langle 2|H|1\rangle = \langle 2|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 2|2\rangle + \langle 2|1\rangle = -1;$$

$$\langle 3|H|1\rangle = \langle 3|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 3|2\rangle + \langle 3|1\rangle = 0;$$

$$\langle 4|H|1\rangle = \langle 4|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 4|2\rangle + \langle 4|1\rangle = 0.$$

Para a segunda coluna:

$$\langle 1|H|2\rangle = \langle 1|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 1|2\rangle - \langle 1|1\rangle - \langle 1|3\rangle = -1;$$

$$\langle 2|H|2\rangle = \langle 2|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 2|2\rangle - \langle 2|1\rangle - \langle 2|3\rangle = 2;$$

$$\langle 3|H|2\rangle = \langle 3|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 3|2\rangle - \langle 3|1\rangle - \langle 3|3\rangle = -1;$$

$$\langle 4|H|2\rangle = \langle 4|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 4|2\rangle - \langle 4|1\rangle - \langle 4|3\rangle = 0.$$

Para a terceira coluna:

$$\langle 1|H|3\rangle = \langle 1|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 1|3\rangle - \langle 1|2\rangle - \langle 1|4\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|3\rangle = \langle 2|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 2|3\rangle - \langle 2|2\rangle - \langle 2|4\rangle = -1;$$

$$\langle 3|H|3\rangle = \langle 3|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 3|3\rangle - \langle 3|2\rangle - \langle 3|4\rangle = 2;$$

$$\langle 4|H|3\rangle = \langle 4|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 4|3\rangle - \langle 4|2\rangle - \langle 4|4\rangle = -1.$$

e finalmente para a quarta:

$$\langle 1|H|4\rangle = \langle 1|(|4\rangle - |3\rangle) = \langle 1|4\rangle - \langle 1|3\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|4\rangle = \langle 2|(|4\rangle - |3\rangle) = \langle 2|4\rangle - \langle 2|3\rangle = 0;$$

$$\langle 3|H|4\rangle = \langle 3|(|4\rangle - |3\rangle) = \langle 3|4\rangle - \langle 3|3\rangle = -1;$$

$$\langle 4|H|4\rangle = \langle 4|(|4\rangle - |3\rangle) = \langle 4|4\rangle - \langle 4|3\rangle = 1.$$

Temos a representação matricial do hamiltoniano de difusão de uma única partícula em uma cadeia com 4 sítios

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

3.4 Exemplo 1 partícula e 5 caixas

Para o caso de uma partícula e 5 caixas temos as seguintes configurações $|10000\rangle, |01000\rangle, |00100\rangle, |00010\rangle$ e $|00001\rangle$, que corresponde a seguintes situações: uma partícula na caixa 1, uma partícula na caixa 2, uma partícula na caixa 3, uma partícula na caixa 4 e uma partícula na caixa 5, respectivamente. Para o caso de uma partícula na caixa 1 temos o vetor ket $|1\rangle$, para uma partícula na caixa 2 temos o vetor ket $|2\rangle$, para uma partícula na caixa 3 temos o vetor ket $|3\rangle$, para

uma partícula na caixa 4 temos o vetor ket $|4\rangle$ e para uma partícula na caixa 5 temos o vetor ket $|5\rangle$.

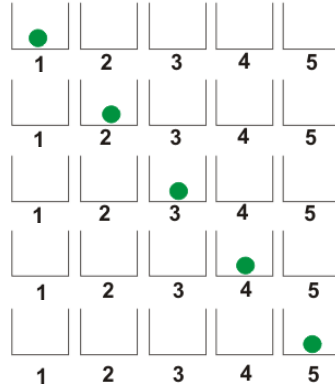


Figura 3.10: Configurações do sistema de uma partícula e cinco caixas.

Iremos repetir os procedimentos dos exemplos anteriores, para $N = 5$ e considerando novamente o hamiltoniano de difusão temos

$$H = D \sum_{j=1}^{N-1} (a_{j+1}^\dagger - a_j^\dagger)(a_{j+1} - a_j). \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} H &= D(a_2^\dagger - a_1^\dagger)(a_2 - a_1) + (a_3^\dagger - a_2^\dagger)(a_3 - a_2) + (a_4^\dagger - a_3^\dagger)(a_4 - a_3) + (a_5^\dagger - a_4^\dagger)(a_5 - a_4); \quad (3.75) \\ &= 2a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + 2a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + 2a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 + a_5^\dagger a_5 \\ &\quad - a_5^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_5. \end{aligned}$$

Aplicando o Hamiltoniano nos vetores da base:

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= (2a_2^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 + 2a_3^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_3 + 2a_4^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_4 \\ &\quad + a_5^\dagger a_5 - a_5^\dagger a_4 - a_4^\dagger a_5)|1\rangle; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H|1\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_1|1\rangle - a_1^\dagger a_2|1\rangle + a_1^\dagger a_1|1\rangle + 2a_3^\dagger a_3|1\rangle - a_3^\dagger a_2|1\rangle - a_2^\dagger a_3|1\rangle + 2a_4^\dagger a_4|1\rangle \\ &\quad - a_4^\dagger a_3|1\rangle - a_3^\dagger a_4|1\rangle + a_5^\dagger a_5|1\rangle - a_5^\dagger a_4|1\rangle - a_4^\dagger a_5|1\rangle; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H|10000\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|10000\rangle - a_2^\dagger a_1|10000\rangle - a_1^\dagger a_2|10000\rangle + a_1^\dagger a_1|10000\rangle + 2a_3^\dagger a_3|10000\rangle - a_3^\dagger a_2|10000\rangle \\ &\quad - a_2^\dagger a_3|10000\rangle + 2a_4^\dagger a_4|10000\rangle - a_4^\dagger a_3|10000\rangle - a_3^\dagger a_4|10000\rangle + a_5^\dagger a_5|10000\rangle - a_5^\dagger a_4|10000\rangle - a_4^\dagger a_5|10000\rangle; \\ &= 2a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger|00000\rangle - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger|00000\rangle + 2a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) + 2a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) \\ &\quad + a_5^\dagger(0) - a_5^\dagger(0) - a_4^\dagger(0); \\ &= -|01000\rangle + |10000\rangle = -|2\rangle + |1\rangle. \quad (3.76) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H|2\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_1|2\rangle - a_1^\dagger a_2|2\rangle + a_1^\dagger a_1|2\rangle + 2a_3^\dagger a_3|2\rangle - a_3^\dagger a_2|2\rangle - a_2^\dagger a_3|2\rangle + 2a_4^\dagger a_4|2\rangle - a_4^\dagger a_3|2\rangle - a_3^\dagger a_4|2\rangle \\
&\quad + a_5^\dagger a_5|2\rangle - a_5^\dagger a_4|2\rangle - a_4^\dagger a_5|2\rangle;
\end{aligned} \tag{3.77}$$

$$\begin{aligned}
H|01000\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|01000\rangle - a_2^\dagger a_1|01000\rangle - a_1^\dagger a_2|01000\rangle + a_1^\dagger a_1|01000\rangle + 2a_3^\dagger a_3|01000\rangle - a_3^\dagger a_2|01000\rangle \\
&\quad - a_2^\dagger a_3|01000\rangle + 2a_4^\dagger a_4|01000\rangle - a_4^\dagger a_3|01000\rangle - a_3^\dagger a_4|01000\rangle + a_5^\dagger a_5|01000\rangle - a_5^\dagger a_4|01000\rangle - a_4^\dagger a_5|01000\rangle; \\
&= 2a_2^\dagger|00000\rangle - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger|00000\rangle + a_1^\dagger(0) + 2a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger|00000\rangle - a_2^\dagger(0) + 2a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) + a_5^\dagger(0) - a_5^\dagger(0) - a_4^\dagger(0); \\
&= 2|01000\rangle - |10000\rangle - |00100\rangle = 2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle.
\end{aligned} \tag{3.78}$$

$$\begin{aligned}
H|3\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_1|3\rangle - a_1^\dagger a_2|3\rangle + a_1^\dagger a_1|3\rangle + 2a_3^\dagger a_3|3\rangle - a_3^\dagger a_2|3\rangle - a_2^\dagger a_3|3\rangle + 2a_4^\dagger a_4|3\rangle - a_4^\dagger a_3|3\rangle \\
&\quad - a_3^\dagger a_4|3\rangle + a_5^\dagger a_5|3\rangle - a_5^\dagger a_4|3\rangle - a_4^\dagger a_5|3\rangle;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H|00100\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|00100\rangle - a_2^\dagger a_1|00100\rangle - a_1^\dagger a_2|00100\rangle + a_1^\dagger a_1|00100\rangle + 2a_3^\dagger a_3|00100\rangle - a_3^\dagger a_2|00100\rangle \\
&\quad - a_2^\dagger a_3|00100\rangle + 2a_4^\dagger a_4|00100\rangle - a_4^\dagger a_3|00100\rangle - a_3^\dagger a_4|00100\rangle + a_5^\dagger a_5|00100\rangle - a_5^\dagger a_4|00100\rangle - a_4^\dagger a_5|00100\rangle; \\
&= 2a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(0) + 2a_3^\dagger|00000\rangle - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger|00000\rangle + 2a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger|00000\rangle - a_3^\dagger(0) + a_5^\dagger(0) - a_5^\dagger(0) - a_4^\dagger(0); \\
&= 2|00100\rangle - |01000\rangle - |00010\rangle = 2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle.
\end{aligned} \tag{3.79}$$

$$\begin{aligned}
H|4\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|4\rangle - a_2^\dagger a_1|4\rangle - a_1^\dagger a_2|4\rangle + a_1^\dagger a_1|4\rangle + 2a_3^\dagger a_3|4\rangle - a_3^\dagger a_2|4\rangle - a_2^\dagger a_3|4\rangle + 2a_4^\dagger a_4|4\rangle - a_4^\dagger a_3|4\rangle - a_3^\dagger a_4|4\rangle \\
&\quad + a_5^\dagger a_5|4\rangle - a_5^\dagger a_4|4\rangle - a_4^\dagger a_5|4\rangle;
\end{aligned} \tag{3.80}$$

$$\begin{aligned}
H|00010\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|00010\rangle - a_2^\dagger a_1|00010\rangle - a_1^\dagger a_2|00010\rangle + a_1^\dagger a_1|00010\rangle + 2a_3^\dagger a_3|00010\rangle - a_3^\dagger a_2|00010\rangle \\
&\quad - a_2^\dagger a_3|00010\rangle + 2a_4^\dagger a_4|00010\rangle - a_4^\dagger a_3|00010\rangle - a_3^\dagger a_4|00010\rangle + a_5^\dagger a_5|00010\rangle - a_5^\dagger a_4|00010\rangle - a_4^\dagger a_5|00010\rangle; \\
&= 2a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(0) + 2a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) + 2a_4^\dagger|00010\rangle - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger|00000\rangle + a_5^\dagger(0) - a_5^\dagger|00000\rangle - a_4^\dagger(0); \\
&= |00010\rangle - |00100\rangle - |00001\rangle = 2|4\rangle - |3\rangle - |5\rangle.
\end{aligned} \tag{3.81}$$

$$\begin{aligned}
H|5\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|5\rangle - a_2^\dagger a_1|5\rangle - a_1^\dagger a_2|5\rangle + a_1^\dagger a_1|5\rangle + 2a_3^\dagger a_3|5\rangle - a_3^\dagger a_2|5\rangle - a_2^\dagger a_3|5\rangle + 2a_4^\dagger a_4|5\rangle - a_4^\dagger a_3|5\rangle - a_3^\dagger a_4|5\rangle \\
&\quad + a_5^\dagger a_5|5\rangle - a_5^\dagger a_4|5\rangle - a_4^\dagger a_5|5\rangle;
\end{aligned} \tag{3.82}$$

$$\begin{aligned}
H|00001\rangle &= 2a_2^\dagger a_2|00001\rangle - a_2^\dagger a_1|00001\rangle - a_1^\dagger a_2|00001\rangle + a_1^\dagger a_1|00001\rangle + 2a_3^\dagger a_3|00001\rangle - a_3^\dagger a_2|00001\rangle \\
&\quad - a_2^\dagger a_3|00001\rangle + 2a_4^\dagger a_4|00001\rangle - a_4^\dagger a_3|00001\rangle - a_3^\dagger a_4|00001\rangle + a_5^\dagger a_5|00001\rangle - a_5^\dagger a_4|00001\rangle - a_4^\dagger a_5|00001\rangle; \\
&= 2a_2^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) - a_1^\dagger(0) + a_1^\dagger(0) + 2a_3^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) - a_2^\dagger(0) + 2a_4^\dagger(0) - a_4^\dagger(0) - a_3^\dagger(0) + a_5^\dagger|00000\rangle - a_5^\dagger(0) - a_4^\dagger|00000\rangle; \\
&= |00001\rangle - |00010\rangle = |5\rangle - |4\rangle.
\end{aligned} \tag{3.83}$$

Encontramos os seguintes elementos para a primeira coluna de H :

$$\langle 1|H|1\rangle = \langle 1|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 1|2\rangle + \langle 1|1\rangle = 1;$$

$$\langle 2|H|1\rangle = \langle 2|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 2|2\rangle + \langle 2|1\rangle = -1;$$

$$\langle 3|H|1\rangle = \langle 3|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 3|2\rangle + \langle 3|1\rangle = 0;$$

$$\langle 4|H|1\rangle = \langle 4|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 4|2\rangle + \langle 4|1\rangle = 0;$$

$$\langle 5|H|1\rangle = \langle 4|(-|2\rangle + |1\rangle) = -\langle 5|2\rangle + \langle 5|1\rangle = 0.$$

Para a segunda coluna:

$$\langle 1|H|2\rangle = \langle 1|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 1|2\rangle - \langle 1|1\rangle - \langle 1|3\rangle = -1;$$

$$\langle 2|H|2\rangle = \langle 2|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 2|2\rangle - \langle 2|1\rangle - \langle 2|3\rangle = 2;$$

$$\langle 3|H|2\rangle = \langle 3|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 3|2\rangle - \langle 3|1\rangle - \langle 3|3\rangle = -1;$$

$$\langle 4|H|2\rangle = \langle 4|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 4|2\rangle - \langle 4|1\rangle - \langle 4|3\rangle = 0;$$

$$\langle 5|H|2\rangle = \langle 4|(2|2\rangle - |1\rangle - |3\rangle) = 2\langle 5|2\rangle - \langle 5|1\rangle - \langle 5|3\rangle = 0.$$

Para a terceira coluna:

$$\langle 1|H|3\rangle = \langle 1|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 1|3\rangle - \langle 1|2\rangle - \langle 1|4\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|3\rangle = \langle 2|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 2|3\rangle - \langle 2|2\rangle - \langle 2|4\rangle = -1;$$

$$\langle 3|H|3\rangle = \langle 3|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 3|3\rangle - \langle 3|2\rangle - \langle 3|4\rangle = 2;$$

$$\langle 4|H|3\rangle = \langle 4|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 4|3\rangle - \langle 4|2\rangle - \langle 4|4\rangle = -1;$$

$$\langle 5|H|3\rangle = \langle 4|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 5|3\rangle - \langle 5|2\rangle - \langle 5|4\rangle = 0.$$

Para a quarta coluna:

$$\langle 1|H|4\rangle = \langle 1|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 1|4\rangle - \langle 1|3\rangle - \langle 1|5\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|4\rangle = \langle 2|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 2|4\rangle - \langle 2|3\rangle - \langle 2|5\rangle = 0;$$

$$\langle 3|H|4\rangle = \langle 3|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 3|4\rangle - \langle 3|3\rangle - \langle 3|5\rangle = -1;$$

$$\langle 4|H|4\rangle = \langle 4|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 4|4\rangle - \langle 4|3\rangle - \langle 4|5\rangle = 2;$$

$$\langle 5|H|4\rangle = \langle 5|(2|3\rangle - |2\rangle - |4\rangle) = 2\langle 5|4\rangle - \langle 5|3\rangle - \langle 5|5\rangle = -1.$$

Para a quinta coluna:

$$\langle 1|H|5\rangle = \langle 1|(|5\rangle - |4\rangle) = \langle 1|5\rangle - \langle 1|4\rangle = 0;$$

$$\langle 2|H|5\rangle = \langle 2|(|5\rangle - |4\rangle) = \langle 2|5\rangle - \langle 2|4\rangle = 0;$$

$$\langle 3|H|5\rangle = \langle 3|(|5\rangle - |4\rangle) = \langle 3|5\rangle - \langle 3|4\rangle = 0;$$

$$\langle 4|H|5\rangle = \langle 4|(|5\rangle - |4\rangle) = \langle 4|5\rangle - \langle 4|4\rangle = -1;$$

$$\langle 5|H|5\rangle = \langle 5|(|5\rangle - |4\rangle) = \langle 5|5\rangle - \langle 5|4\rangle = 1.$$

E finalmente a matriz de 5 sítios,

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.84)$$

3.5 Difusão de N partículas numa cadeia: Probabilidades Conjuntas

Vamos utilizar o fato de que a difusão de uma partícula independe da difusão da outra partícula, ou seja, não temos restrições quanto ao número de partículas numa caixa (partículas bosônicas), para utilizar as probabilidades obtidas para o caso da difusão de uma única partícula e assim, calcular as probabilidades conjuntas no caso de mais partículas na cadeia.

Para o caso de duas partículas e 3 caixas temos as seguintes configurações $|200\rangle, |110\rangle, |101\rangle, |011\rangle, |020\rangle$ e $|002\rangle$, que corresponde a seguintes situações: duas partículas na caixa 1, uma partícula na caixa 1 e uma partícula na caixa 2, uma partícula na caixa 1 e uma partícula na caixa 3, uma partícula na caixa 2 e uma partícula na caixa 3, duas partículas na caixa 2 e duas partículas na caixa 3, respectivamente.

Nota-se na fig. 3.11 para os casos em que se encontra uma partícula em cada caixa, temos uma multiplicidade 2 devido a permutação das partículas verde e vermelha.

Vamos calcular agora as médias de ocupação de cada caixa utilizando o conceito de probabilidade conjunta e as probabilidades em função do tempo para o caso de uma partícula e três caixas discutido na seção 3.2.

$$\langle n_j(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^6 n_j^{\eta} P_{\eta}(t). \quad (3.85)$$

Por simplicidade e, sem perda de generalidade, vamos calcular a média de ocupação da primeira

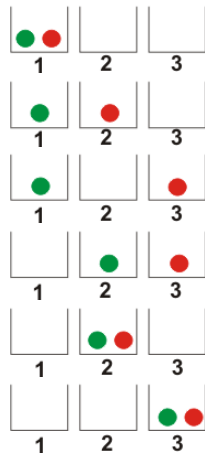


Figura 3.11: Configurações do sistema de duas partículas e três caixas.

caixa (fazendo $j=1$)

$$\langle n_1(t) \rangle = n_1^1 P_{\eta=1}(t) + n_1^2 P_{\eta=2}(t) + n_1^3 P_{\eta=2}(t) + n_1^4 P_{\eta=4}(t) + n_1^5 P_{\eta=5}(t) + n_1^6 P_{\eta=6}(t) \quad (3.86)$$

$$\eta = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$

Utilizando as probabilidades obtidas na seção 3.2, obtemos as seguintes probabilidades para esse caso

$$P_{\eta=1}(t) = P_1(t)P_1(t), n_1^1 = 2; \quad (3.87)$$

$$P_{\eta=2}(t) = 2P_1(t)P_2(t), n_1^2 = 1; \quad (3.88)$$

$$P_{\eta=3}(t) = 2P_1(t)P_3(t), n_1^3 = 1; \quad (3.89)$$

$$P_{\eta=4}(t) = 2P_2(t)P_3(t), n_1^4 = 0; \quad (3.90)$$

$$P_{\eta=5}(t) = P_2(t)P_2(t), n_1^5 = 0; \quad (3.91)$$

$$P_{\eta=6}(t) = P_3(t)P_3(t), n_1^6 = 0. \quad (3.92)$$

Para as situações que temos uma partícula em cada caixa, temos a multiplicidade dois desses estados já que as partículas são distinguíveis como mostra na fig. 3.11.

Na figura 3.12 mostramos a dependência dessas probabilidades com o tempo.

$$\begin{aligned} P_{\eta=1}(t) &= \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right] \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right]; \\ &= \frac{1}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} + \frac{1}{4}e^{-2t} + \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{6}e^{-4t} + \frac{1}{36}e^{-6t}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$P_{\eta=2}(t) = 2 \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right] \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \right]; \quad (3.94)$$

$$= \frac{2}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}.$$

$$\begin{aligned} P_{\eta=3}(t) &= 2 \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right] \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right]; \\ &= \frac{2}{9} - \frac{1}{2}e^{-2t} + \frac{2}{9}e^{-3t} + \frac{1}{18}e^{-6t}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

$$\begin{aligned} P_{\eta=4}(t) &= 2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \right] \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right]; \\ &= \frac{2}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

$$\begin{aligned} P_{\eta=5}(t) &= \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \right] \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{3}e^{-3t} \right]; \\ &= \frac{1}{9} - \frac{2}{9}e^{-3t} + \frac{1}{9}e^{-6t}. \end{aligned} \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} P_{\eta=6}(t) &= \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right] \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2}e^{-t} + \frac{1}{6}e^{-3t} \right]; \\ &= \frac{1}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} + \frac{1}{4}e^{-2t} + \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{6}e^{-4t} + \frac{1}{36}e^{-6t}. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Na figura 3.12 mostramos a dependência dessas probabilidades com o tempo.

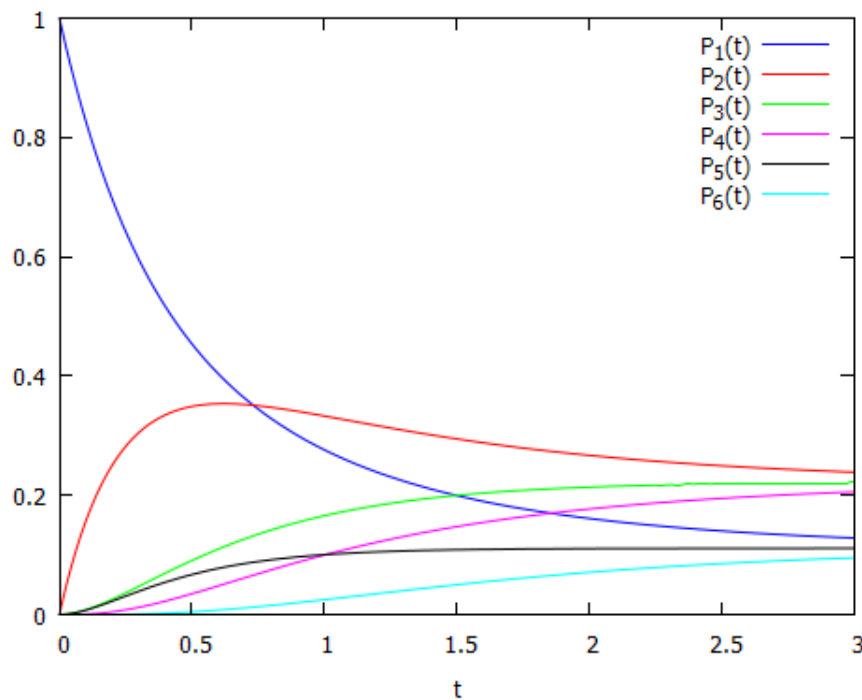


Figura 3.12: Probabilidades do sistema para as seis configurações possíveis.

As probabilidades das configurações em que duas partículas estão em uma caixa como nos casos de $|200\rangle$, $|020\rangle$ e $|002\rangle$, tendem a $1/9$ para tempos longos, podendo ser observado nas equações 3.93, 3.97

e 3.98; e nos casos das configurações em que temos uma partícula por caixa como nos casos de $|110\rangle$, $|101\rangle$ e $|011\rangle$ as probabilidades tendem a $2/9$ para tempos longos, podendo ser observado nas equações 3.94, 3.95 e 3.96; estas probabilidades de ocorrer são maiores devido as configurações ter multiplicidade 2.

É possível constatar que essas probabilidades são normalizadas:

$$\begin{aligned} \sum P_i &= P_{\eta=1}(t) + P_{\eta=2}(t) + P_{\eta=3}(t) + P_{\eta=4}(t) + P_{\eta=5}(t) + P_{\eta=6}(t) = 1; \quad (3.99) \\ &= \left(\frac{1}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} + \frac{1}{4}e^{-2t} + \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{6}e^{-4t} + \frac{1}{36}e^{-6t}\right) + \left(\frac{2}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}\right) \\ &\quad + \left(\frac{2}{9} - \frac{1}{2}e^{-2t} + \frac{2}{9}e^{-3t} + \frac{1}{18}e^{-6t}\right) + \left(\frac{2}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}\right) \\ &\quad + \left(\frac{1}{9} - 2\frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{9}e^{-6t}\right) + \left(\frac{1}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} + \frac{1}{4}e^{-2t} - \frac{1}{12}e^{-4t} + \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{6}e^{-4t} + \frac{1}{36}e^{-6t}\right) = 1; \end{aligned}$$

Com as probabilidades conjuntas podemos calcular agora a ocupação média de partículas nas caixas e de acordo com as configurações possíveis temos,

$$\langle n_j(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^6 n_j^\eta P_i(t) = n_j^1 P_{\eta=1}(t) + n_j^2 P_{\eta=2}(t) + n_j^3 P_{\eta=2}(t) + n_j^4 P_{\eta=4}(t) + n_j^5 P_{\eta=5}(t) + n_j^6 P_{\eta=6}(t); \quad (3.100)$$

O número médio de partículas da caixa 1,

$$\begin{aligned} \langle n_1(t) \rangle &= n_1^1 P_{\eta=1}(t) + n_1^2 P_{\eta=2}(t) + n_1^3 P_{\eta=2}(t) + n_1^4 P_{\eta=4}(t) + n_1^5 P_{\eta=5}(t) + n_1^6 P_{\eta=6}(t); \\ &= 2.P_1 P_1(t) + 1.P_1 P_2(t) + 1.P_1 P_3(t) + 0.P_2 P_3(t) + 0.P_2 P_2(t) + 0.P_3 P_3(t); \\ &= 2\left[\frac{1}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} + \frac{1}{4}e^{-2t} + \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{6}e^{-4t} + \frac{1}{36}e^{-6t}\right] + 1\left[\frac{2}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}\right] \\ &\quad + 1\left[\frac{2}{9} - \frac{1}{2}e^{-2t} + \frac{2}{9}e^{-3t} + \frac{1}{18}e^{-6t}\right]; \\ &= \frac{2}{3} + e^{-t} + \frac{1}{3}e^{-3t}. \quad (3.101) \end{aligned}$$

Repetimos o mesmo raciocínio para a caixa 2 e 3 como segue abaixo

$$\langle n_2(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^6 n_2^\eta P_\eta(t) = n_2^1 P_{\eta=1}(t) + n_2^2 P_{\eta=2}(t) + n_2^3 P_{\eta=2}(t) + n_2^4 P_{\eta=4}(t) + n_2^5 P_{\eta=5}(t) + n_2^6 P_{\eta=6}(t); \quad (3.102)$$

$$= 0.P_1 P_1(t) + 1.P_1 P_2(t) + 0.P_1 P_3(t) + 1.P_2 P_3(t) + 2.P_2 P_2(t) + 0.P_3 P_3(t); \quad (3.103)$$

$$\begin{aligned} &= \left[\frac{2}{9} + \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}\right] + \left[\frac{2}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}\right] + 2\left[\frac{1}{9} - \frac{2}{9}e^{-3t} + \frac{1}{9}e^{-6t}\right]; \\ &\quad \frac{2}{3} - \frac{2}{3}e^{-3t}. \quad (3.104) \end{aligned}$$

$$\langle n_3(t) \rangle = \sum_{\eta=1}^6 n_3^\eta P_\eta(t) = n_3^1 P_{\eta=1}(t) + n_3^2 P_{\eta=2}(t) + n_3^3 P_{\eta=2}(t) + n_3^4 P_{\eta=4}(t) + n_3^5 P_{\eta=5}(t) + n_3^6 P_{\eta=6}(t); \quad (3.105)$$

$$= 0.P_1 P_1(t) + 0.P_1 P_2(t) + 1.P_1 P_3(t) + 1.P_2 P_3(t) + 0.P_2 P_2(t) + 2.P_3 P_3(t);$$

$$\begin{aligned} &= 1\left[\frac{2}{9} - \frac{1}{2}e^{-2t} + \frac{2}{9}e^{-3t} + \frac{1}{18}e^{-6t}\right] + 1\left[\frac{2}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} - \frac{1}{9}e^{-3t} + \frac{1}{3}e^{-4t} - \frac{1}{9}e^{-6t}\right] \\ &\quad + 2\left[\frac{1}{9} - \frac{1}{3}e^{-t} + \frac{1}{4}e^{-2t} - \frac{1}{12}e^{-4t} + \frac{1}{9}e^{-3t} - \frac{1}{6}e^{-4t} + \frac{1}{36}e^{-6t}\right]; \end{aligned}$$

$$= \frac{2}{3} - e^{-t} + \frac{3}{9}e^{-3t}. \quad (3.106)$$

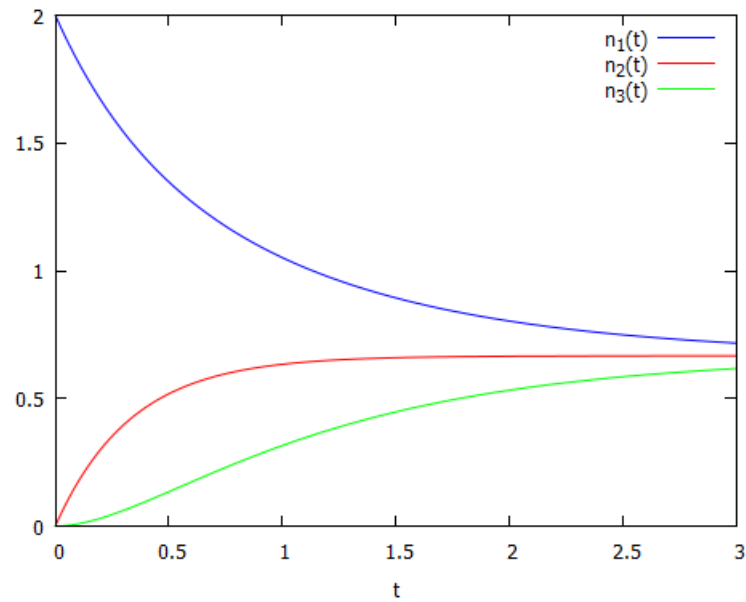


Figura 3.13: Número médio de partículas para a configuração inicial com duas partículas na caixa 1 e nenhuma partícula nas caixas 2 e 3 .

De acordo com o gráfico da fig. 3.13 as partículas inicialmente encontram-se comportadas na caixa 1, a medida que o tempo passa, no assintótico, o número médio de partículas de cada caixa vai para $2/3$. Com este mesmo raciocínio podemos utilizar para cadeias maiores e com mais partículas.

Capítulo 4

Conclusão

Este trabalho de conclusão (monografia) estudou a utilização da Equação-Mestra no processo de difusão de partículas. Mapeando a Equação-Mestra em uma equação de Schroedinger, podemos encontrar as probabilidades e os números médios de partículas bosônicas no processo de difusão de N sítios em cadeia linear, dando exemplos diversos de quantidades de partículas e caixas para obtenção das probabilidades conjuntas. Utilizou-se o fato da independência do número de partículas numa caixa, já que se trata de partículas bosônicas, porém em trabalhos futuros pode-se estudar o caso para férmions que limita a quantidade de partículas na caixa (para somente uma ou nenhuma partícula na caixa) devido ao princípio de exclusão de Pauli, sendo um estudo para a difusão de partículas com exclusão de volume.

Através dos resultados obtidos para os exemplos feito neste trabalho, puderam-se fazer os gráficos das probabilidades e consequentemente dos números médios de partículas. Possibilitando-nos fazer uma análise de como se comportam as partículas na configuração inicial até sua configuração final do sistema, achando os valores das probabilidades e dos números médios de partículas em um tempo inicial 0 s até a um tempo longo que foi usado de 3 s, que já dá para chegar a valores estacionados. Concluindo também que as probabilidades são maiores nas configurações em que as partículas estão em caixas diferentes, devido a possibilidade da permutação das partículas (que são distinguíveis) ter multiplicidade 2.

Além de ser digitado em LATEX, pode-se usar um programa chamado Máxima para os casos de uma partícula e quatro caixas, uma partícula e cinco caixas; para a obtenção dos autovalores e autovetores já que quando o número de caixas vai aumentando o Hamiltoniano do sistema também aumenta e obviamente não tem como fazer na mão. Então, umas das ferramentas é o Máxima (ou programas similares) que é um programa de computação algébrica e para estudos futuros podemos usar o MAPLE para álgebra de operadores.

Apêndice A

Determinação da inversa de uma matriz

A determinação da inversa da matriz Q , sendo uma matriz inversível, é dado através da equivalência de suas linhas.

Definição. Dada uma matriz Q entendemos por operações elementares com as linhas de Q , uma qualquer das seguintes alternativas:

- (I) *Permutar* duas linhas de Q ;
- (II) *Multiplicar* uma linha de Q por um número diferente de zero.
- (III) *Somar* a uma linha de Q outra linha de Q multiplicada por um número.

Se uma matriz B puder ser obtida de Q através de um número finito dessas operações, diz-se que B é equivalente a Q e escreve-se $B \sim Q$. Para esta relação valem as propriedades reflexiva, simétrica e transitiva.

Teorema. Uma matriz Q é inversível se, e somente se, $I_n \sim Q$. Neste caso, a mesma sucessão de operações elementares que transformam Q em I_n , transformam I_n em Q^{-1} .

Referências Bibliográficas

- [1] Sílvio R. A Salinas, *Introdução a Física Estatística*, 2nd ed., Edusp, 2005
- [2] Johannes Knebel, *Application of Statistical Field Theory to Reaction-Diffusion Problems* , University of Cambridge, 2010.
- [3] Carlos A. Callioli, *Álgebra Linear e Aplicações*, 6nd ed., Atual, 1990 .
- [4] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, 3nd ed., Prentice Hall, 2004.
- [5] J.J.Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*, Revised ed., Addison Wesley Longman, 1994
- [6] Federick Reif *Fundamentals Of Statistical and Thermal Physics*
- [7] Edwin Pedrozo PeñFiel *Ideias Básicas da Equação Mestra*, Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 19/06/2012