



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MEXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE FÍSICA**

---

---

**“ESTUDIO ESTADÍSTICO DE LA  
DISPERSIÓN DE ONDAS EN GUÍAS DE  
ONDAS DESORDENADAS”**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:**

**DOCTOR EN CIENCIAS**

**PRESENTA:**

**MIZTLI YOLOTZIN YÉPEZ MARTÍNEZ**

**DIRECTOR DE TESIS: DR. PIER ACHILLE MELLO PICCO**

**MIEMBROS DEL COMITÉ TUTORAL:**

**Dr. FELIX IZRAILEV**

**Dr. MOISÉS MARTÍNEZ MARES**



**posgrado en ciencias físicas  
u n a m**

**2009**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# Dedicatoria

Dedico este trabajo

**A mis padres:** por darme la vida, y haberme guiado sabiamente en todo momento.

*A mi madre:* por mostrarme:

***QUE EN MOMENTOS DIFÍCILES DE LA VIDA, RENDIRSE NO ES OPCIÓN***

*A mi padre:* por darme su

***EJEMPLO Y COMPARTIRME SU EXPERIENCIA***

**A mis hermanos *Huitzilin y Tochtli*:** por ser los mejores amigos que tengo, por creer en mí, por darme la fuerza que me hacía falta para continuar, por su compañía, por los grandes momentos vividos y los que viviremos siempre unidos.

**A *Laura*:** Por llegar a mi vida e iluminarla como el Sol ilumina a la Tierra.

***PASE LO PASE, HAGAS LO QUE HAGAS, Y VAYAS A DONDE VAYAS, NUNCA OLVIDES QUIEN ERES NI DE DONDE VIENES.***



# Agradecimientos

## Primera parte

Quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México, que durante estos últimos 15 años (en los que realice mis estudios de nivel medio superior, superior y de posgrado) me dio una educación de calidad y un entorno favorable para mi crecimiento personal y profesional. De manera muy especial quiero agradecer al Instituto de Ciencias Nucleares, donde fui estudiante asociado al inicio de mi doctorado (agosto 2003-junio 2004) y al Instituto de Física, donde fui estudiante hasta el final de mi doctorado (agosto 2004-septiembre 2009).

Al Dr. Pier Achille Mello Picco por la invaluable formación que me ha dado. Por estar siempre al tanto de mi trabajo y de mi crecimiento profesional. Por las innumerables reuniones en las que, sin importar el día, la hora o el cansancio (suyo o mío), siempre conte con su opinión objetiva, sus críticas constructivas, sus sabias recomendaciones y su gran asesoramiento. No sólo por compartir conmigo un poco de lo mucho que sabe o sus experiencias con grandes personalidades de la física (de México y del extranjero), sino por mostrarme un panorama de la física y del medio, que abrirá las puertas para mi desarrollo futuro. Muchas gracias Pier.

A los Doctores que fueron miembros de mi comité, en diferentes etapas de mi doctorado: Dr. Salvador Godoy Salas, Dr. Julio Herrera Velazquez, Dr. Julio Martinell Benito, Dr. Felix Izrailev y Dr. Moisés Martínez Mares.

A los miembros de mi Jurado: Dr. Gastón García Calderón, Dr. Rafael Alberto Méndez Sánchez, Dr. Eleuterio Castaño Tostado, Dr. Felix Izrailev, Dr. Moisés Martínez Mares y Dr. José Antonio Méndez Bermúdez por haber revisado con detenimiento mi tesis, así como por sus valiosas sugerencias.

Al Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM. De manera muy especial quiero agradecer el apoyo financiero que me brindó para pudiera participar en los congresos internacionales:

1. “From disordered systems to complex systems”, que se llevo acabo en Mar del Plata Argentina del 11 al 19 de diciembre de 2006.
2. “Penetrating Physics by Random Matrices Symposium in honour of Hans A. Weidenmüller”, que se llevo acabo en Cuernavaca, Morelos México del 2 al 6 de marzo de 2009

Al Dr. Juan José Saénz, catedrático de la Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Dpto. Física de la Materia Condensada, por haberme invitado a

colaborar de febrero a mayo de 2008 en dicha institución, así como por ofrecerme una estancia posdoctoral, que a la brevedad iniciaré.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, institución que a través de su Programa Nacional de Posgrado, financió mis estudios de doctorado de agosto de 2003 a junio de 2008, siendo mi número de registro 179710.

A la Coordinación de Estudios de Posgrado que a través del Programa de Fomento a la Graduación de los alumnos de posgrado de la UNAM, me apoyo con una beca de noviembre de 2008 a febrero de 2009.

Al Sistema Nacional de Investigadores que me otorgó una beca (con número de expediente 768) como Ayudante de Investigador Nacional nivel III durante la parte final de mi doctorado: de septiembre de 2008 a agosto de 2009.

Al Dr. Enrique Camarillo por su sincera amistad.

Al Actuario Carlos Ernesto López Natarén de la secretaría técnica de cómputo y telecomunicaciones del Instituto de Física, por su asesoría en la operación de los servidores “brodix” y “ollin” del Instituto de Física, así como por su ayuda en el desarrollo del programa que se usó en el presente trabajo.

## Segunda parte

De manera muy especial quiere agradecer a la Laura [Laurita bonita, ..., @=)@], por acompañarme paso a paso, día a día, y momento a momento, en estos últimos 3 años. Porque sin importar la circunstancia, el día, o la hora, siempre tuviste para mí una sonrisa, un abrazo, un beso y tu apoyo. Porque sin ti el camino hubiese sido más largo y difícil. Gracias por tu calidez, por tu amor y por ser MI GRAN ALEGRÍA: TE AMO.

De manera muy especial quiero agradecer a mi tía Chayo por el gran apoyo que mi familia recibió de su parte en momentos realmente difíciles. Gracias tía. De igual manera a mis primos Moisés y Chayito (la beba) con quienes tuve la fortuna de compartir mi infancia y momentos maravillosos. A mis primas Lupe y Cyntia por el cariño que siempre han tenido con mi familia, especialmente con mi madre.

A los amigos con quienes he vivido momentos inolvidables: Ivonne (amiga de tantos años), Andrea y Leticia (mis cómplices), a Ostap (por tantas risas y anécdotas), Zeus, Juan Carlos Almazán, Julio, Roberto, Sergio, Cesar, Anna Delia, Juan Carlos Hidalgo Isabel, Karen.

A mis amigos del “gallinero”: Sergio, Josue, Ricardo (el rich), Lorea, Nicolás, Felix, Eduardo, Octavio, Lorena, Sirio, Saul, Carlos, Erica, Federico. A mis amigos del cubículo 212: Roberto, Abraham, Yanet, Ricardo, Cristel, Selene. A mis amigos del posgrado: Nadia, Juan Carlos Degollado, Gustavo y Jorge.

Al Doctor Castañeda por estar siempre atento al cuidado de nuestra salud y por su amistad. Al Dr. Enrique Camarillo por su sincera amistad. Al entrenador Gilberto Parra del gimnasio del fronton cerrado.

Si alguien faltó no fue personal, fue la prisa, pero de todos modos gracias.

# Resumen

En el presente trabajo se estudian las propiedades estadísticas del transporte de ondas en una guía de ondas desordenada. Las propiedades estadísticas del bloque constitutivo de longitud  $\delta L$  se derivan a partir de un modelo de potencial y se usan para encontrar la evolución con la longitud de los valores esperados de cantidades físicas. En el modelo del potencial las unidades dispersoras son rebanadas delgadas, que se idealizan como potenciales delta, perpendiculares a la dirección longitudinal de la guía de onda; la variación del potencial en la dirección transversal se considera arbitraria. Los parámetros que definen una rebanada se consideran estadísticamente independientes de los correspondientes a cualquier otra rebanada e idénticamente distribuidos. En el límite denso de dispersión débil, en el que los potenciales de las rebanadas son muy débiles y la densidad lineal de éstas es muy grande, de tal manera que los caminos libres medios resultantes son fijos, las correspondientes propiedades estadísticas de la guía sólo dependen de los caminos libres medios y no de otra propiedad de la distribución de la rebanada. La universalidad que se obtiene demuestra la existencia de un teorema de límite central generalizado. Nuestro resultado principal es una ecuación de difusión en el espacio de matrices de transferencia de nuestro sistema, que describe la evolución con la longitud de las propiedades de transporte de interés. A diferencia de trabajos anteriores, en el presente análisis la energía de la partícula incidente se toma en cuenta en la descripción. Para un sólo modo de propagación,  $N = 1$ , hemos sido capaces de resolver la ecuación de difusión para un número particular de observables y la solución tiene un buen acuerdo con los resultados de cálculos microscópicos. En general, no hemos podido hallar una solución de la ecuación de difusión, por lo que se desarrolló un método numérico, llamado “caminante aleatorio en el espacio de matrices de transferencia”, en el que numéricamente se implementan las propiedades estadísticas de un “bloque constitutivo”, y entonces varios bloques constitutivos se combinan para encontrar las propiedades estadísticas la guía completa. Los resultados así obtenidos (en el cual se hizo uso de la “aproximación de longitud de onda corta”) muestran un buen acuerdo con los correspondientes cálculos microscópicos, tanto en el caso de desorden de volumen como de superficie.

El bloque constitutivo es por sí mismo un sistema de interés físico, ya que sus propiedades estadísticas también pueden estudiarse experimentalmente en el laboratorio. Por esta razón hemos incluido un estudio del bloque constitutivo usando un método perturbativo basado en la serie de Born, que sólo es válido en el régimen balístico y en la aproximación de longitud de onda corta. Este método ha permitido obtener analíticamente el comportamiento de observables de interés para los que no hemos podido resolver la ecuación de difusión. A diferencia del método de la ecuación de difusión, en el que la

contribución de los canales cerrados se toma en cuenta de manera aproximada, en este tratamiento la contribución de los canales cerrados se toma en cuenta explícitamente. En trabajos anteriores se obtuvo evidencia numérica que muestra que el valor esperado de ciertos observables (por ejemplo la conductancia e intensidades) es insensible al número de canales cerrados que se consideren en el cálculo; mediante este método se pudo demostrar que la contribución de los canales cerrados es relevante para las amplitudes, pero despreciable en el caso de las intensidades y la conductancia. Todos los resultados obtenidos mediante este método muestran un buen acuerdo con los correspondientes resultados numéricos.

Con la intención de presentar la tesis de manera pedagógica, hemos incluido, para el beneficio de expertos e inexpertos, dos capítulos de referencia en los que se pueden consultar todos los conceptos y herramientas que se utilizarán en la tesis. De igual manera hemos escrito un conjunto de apéndices en los que se exponen los cálculos más complicados y material complementario.

# Summary

We study the statistical properties of wave scattering in a disordered waveguide. The statistical properties of a “building block” of length  $\delta L$  are derived from a potential model and used to find the evolution with length of the expectation value of physical quantities. In the potential model the scattering units consist of thin potential slices, idealized as delta slices, perpendicular to the longitudinal direction of the waveguide; the variation of the potential in the transverse direction may be arbitrary. The sets of parameters defining a given slice are taken to be statistically independent from those of any other slice and identically distributed. In the dense-weak-scattering limit, in which the potential slices are very weak and their linear density is very large so that the resulting mean free paths are fixed, the corresponding statistical properties of the full waveguide depend only on the mean free paths and on no other property of the slice distribution. The universality that arises demonstrates the existence of a generalized central-limit-theorem. Our main result is a diffusion equation in the space of transfer matrices of our system, which describes the evolution with the length  $L$  of the disordered waveguide of the transport properties of interest. In contrast to earlier works, in the present analysis the energy of the incident particle is fully taken into account. For one propagating mode,  $N = 1$ , we have been able to solve the diffusion equation for a number of particular observables, and the solution is in excellent agreement with the results of microscopic calculations. In general, we have not succeeded in finding a solution of the diffusion equation. We have thus developed a numerical simulation, to be called “random walk in the transfer matrix space”, in which the universal statistical properties of a “building block” are first implemented numerically, and then the various building blocks are combined to find the statistical properties of the full waveguide. The reported results thus obtained (in which used was made of a “short-wave-length approximation”) are in very good agreement with those arising from truly microscopic calculations, for both bulk and surface disorder.

The building block has a physical interest in itself because its statistical properties can also be studied experimentally in the laboratory. For this purpose we have included a studied of a building block using a perturbative method based on Born series, which is valid only in the ballistic regime and in the short-wave-length approximation. This method has allowed to find, analytically, the behavior of quantities of interest that we have not been able to find from diffusion equation. In contrast with the diffusion equation method, which takes into account approximately the contribution of closed channels, this method takes them explicitly. In earlier works, numerical evidence was found that the expectation values of some interesting quantities are insensitive to the number of closed channels that were used on the calculations; with this method, we

could show that closed channels are relevant for the expectation values of amplitudes, but irrelevant for the intensities and conductance expectation values. The results of this method show a good agreement with numerical simulations.

Since the thesis has a clear pedagogical aim, we have included for the benefit of experts and nonexperts, two chapters in which we can review the concepts that we will use through this thesis; analogously, we have written a number of appendixes that contain the more involved calculations.

# Índice general

Introducción	1
<b>1. Dispersión electromagnética y cuántica</b>	<b>9</b>
1.1. Introducción	9
1.2. Ecuaciones integrales y función de Green	10
1.3. Dispersión electromagnética	11
1.3.1. Dispersión para longitudes de onda grandes: aproximación dipolar	12
1.3.2. Teoría perturbativa de la dispersión	15
1.4. Dispersión cuántica	23
1.4.1. Dispersión debida a un potencial	23
<b>2. Dispersión cuántica en guías de ondas bidimensionales</b>	<b>27</b>
2.1. Introducción	27
2.2. Planteamiento del problema	28
2.3. El caso libre	29
2.4. El problema de la dispersión	31
2.4.1. Ecuaciones de Lippmann-Schwinger acopladas	34
2.4.2. El comportamiento asintótico de las funciones de onda: las amplitudes de reflexión y transmisión	35
2.5. Las matrices de dispersión y transferencia	42
2.5.1. Las matrices <i>reducidas</i>	42
2.5.2. Propiedades de las matrices <i>reducidas</i>	45
2.5.3. Las matrices <i>extendidas</i>	55
2.5.4. Propiedades de las matrices <i>extendidas</i>	62
2.6. La serie de Born	74
2.6.1. La serie de Born en el caso de una guía de ondas bidimensional	74
2.6.2. Obtención de la serie de Born	78
<b>3. Modelo microscópico del potencial</b>	<b>83</b>
3.1. Introducción	83
3.2. Definición del modelo microscópico	84
3.2.1. Descripción general del potencial microscópico	84
3.2.2. Idealización de la unidad dispersora: el potencial delta	85
3.2.3. Modelo microscópico del potencial <i>cuasi-unidimensional</i> $U_{ab}(x)$	86

3.3.	Estudio de la dispersión de un potencial delta . . . . .	88
3.3.1.	Matrices de dispersión y de transferencia extendidas de un potencial delta . . . . .	91
3.3.2.	Las matrices de dispersión y transferencia reducidas de un potencial delta: el potencial efectivo . . . . .	94
<b>4.</b>	<b>Dispersión cuántica en guías de ondas desordenadas</b>	<b>99</b>
4.1.	Introducción . . . . .	99
4.2.	Transporte en sistemas cuasi-unidimensionales. . . . .	100
4.3.	Construcción del bloque constitutivo . . . . .	104
4.3.1.	Matriz de transferencia del bloque constitutivo . . . . .	104
4.3.2.	Propiedades estadísticas del bloque constitutivo . . . . .	106
4.4.	Coefficientes de difusión y ecuación de difusión . . . . .	112
4.4.1.	Los regímenes . . . . .	112
4.4.2.	Ecuación de difusión el régimen general: dependiente de la energía	114
4.4.3.	Ecuación de difusión: la aproximación de longitud de onda corta (SWLA), ó de desorden débil . . . . .	115
<b>5.</b>	<b>Aplicación de la ecuación de difusión</b>	<b>119</b>
5.1.	Introducción . . . . .	119
5.2.	Solución exacta de la ecuación de difusión para un observable particular con un canal abierto . . . . .	120
5.2.1.	El régimen general: $k\ell$ arbitrario . . . . .	120
5.2.2.	La aproximación de longitud de onda corta: $k\ell \rightarrow \infty$ . . . . .	124
5.3.	La ecuación de difusión en la aproximación de longitud de onda corta: el caso multicanal . . . . .	128
5.3.1.	La ecuación de difusión para las amplitudes . . . . .	128
5.3.2.	La ecuación de difusión para las intensidades . . . . .	132
5.3.3.	Consistencia de la ecuación de difusión . . . . .	133
<b>6.</b>	<b>El Caminante Aleatorio vs Modelo Microscópico.</b>	<b>141</b>
6.1.	Introducción . . . . .	141
6.2.	Un modelo microscópico del potencial . . . . .	142
6.3.	Caminante aleatorio en el espacio de matrices de transferencia . . . . .	144
6.3.1.	Valores esperados en el caso de desorden volumétrico . . . . .	145
6.3.2.	Valores esperados en el caso de desorden superficial . . . . .	147
6.4.	Un modelo microscópico alternativo . . . . .	149
6.4.1.	Modelo para la dependencia transversal del potencial . . . . .	150
6.4.2.	El modelo estadístico . . . . .	151
6.4.3.	Breve discusión de la simulación numérica . . . . .	152
6.4.4.	Resultados numéricos del modelo microscópico alternativo . . . . .	154
<b>7.</b>	<b>Estudio de la dispersión en el régimen balístico</b>	<b>157</b>
7.1.	Introducción . . . . .	157
7.2.	Modelo estadístico del potencial cuasi-unidimensional . . . . .	158

7.2.1.	El modelo estadístico de los potenciales delta . . . . .	159
7.2.2.	Modelo de ruido blanco generalizado . . . . .	162
7.3.	Valores esperados: caso unidimensional . . . . .	165
7.3.1.	Valor esperado de la amplitud de transmisión: $\langle t \rangle_{k,L}$ . . . . .	167
7.3.2.	Valor esperado de la amplitud de reflexión: $\langle r \rangle_{k,L}$ . . . . .	188
7.3.3.	Valor esperado de las intensidades de transmisión $\langle T \rangle_{k,L}$ y de reflexión $\langle R \rangle_{k,L}$ . . . . .	194
7.4.	Valores esperados: caso multicanal . . . . .	197
7.4.1.	Valor esperado de la amplitud de transmisión: $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$ . . . . .	199
7.4.2.	Valor esperado de la amplitud de reflexión $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$ . . . . .	211
7.4.3.	Valor esperado de la intensidad de transmisión: $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$ . . . . .	224
7.4.4.	Valor esperado de la intensidad de reflexión: $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$ . . . . .	232
7.4.5.	La conservación de flujo: $\langle T_{-a_0} \rangle_{k,L} + \langle R_{-a_0} \rangle_{k,L} = 1$ . . . . .	241
7.4.6.	Covarianzas: caso multicanal . . . . .	244
<b>Conclusiones</b>		<b>257</b>
<b>A. Las matriz de dispersión de un potencial delta: <math>N = 2</math>, <math>N' = 0</math> y <math>E \rightarrow \mathcal{E}_2^+</math></b>		<b>261</b>
A.1.	La matriz de dispersión . . . . .	261
A.2.	El límite $k_2 \rightarrow 0^+$ . . . . .	262
<b>B. Algunos detalles de los resultados analíticos</b>		<b>265</b>
B.1.	Detalles de la solución exacta en el caso $N = 1$ . . . . .	265
B.1.1.	El régimen general: ecuación (4.37a) . . . . .	265
B.1.2.	La aproximación de longitud de onda corta (SWLA): ecuación (4.37b) . . . . .	268
B.2.	Detalles de la ecuación de difusión en la aproximación de longitud de onda corta . . . . .	269
B.2.1.	Obtención de las cantidades básicas . . . . .	269
B.2.2.	Obtención de la Ecuación de Difusión de $\langle t'_{mn} \rangle_L$ . . . . .	271
B.2.3.	Obtención de la Ecuación de Difusión de $\langle T'_{mn} \rangle_L$ . . . . .	272
<b>C. Detalles de los valores esperados de la serie de Born</b>		<b>277</b>
<b>D. Series asintóticas</b>		<b>281</b>
D.1.	Discusión general . . . . .	281
D.2.	Un ejemplo de serie asintótica: la función de Bessel $J_0(x)$ . . . . .	283
<b>Bibliografía</b>		<b>287</b>



# Índice de figuras

1.	La conductancia de un Si-MOSFET ( $10\mu m$ de largo y aproximadamente $0,05\mu m$ de ancho) como función del voltaje de compuerta para tres temperaturas. . . . .	1
2.	Solución numérica de la ecuación de Schrödinger para el coeficiente de transmisión $T$ como función de la energía de incidencia ( $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ) de una cavidad caótica abierta en dos dimensiones. . . . .	2
2.1.	Guía de Ondas Bidimensional de ancho $W$ y longitud infinita. El sistema dispersor de longitud $L$ se representa mediante el potencial arbitrario $V(x, y)$ . . . . .	28
2.2.	Dispersión producida por un potencial. Las ondas incidentes sólo pueden ser ondas planas viajeras de canales abiertos mientras que las salientes son ondas viajeras en los canales abiertos y ondas evanescentes en los canales cerrados. . . . .	42
2.3.	Dispersión múltiple producida por tres sistemas. En las regiones 1 y 2 hay ondas evanescentes de canales cerrados que se atenúan en ambas direcciones. . . . .	56
2.4.	Contribución de la dispersión múltiple (producida en la región $C$ ) a las matrices de dispersión extendidas totales $\tilde{t}$ y $\tilde{r}$ del sistema compuesto por dos subsistemas . . . . .	72
4.1.	Representación esquemática del sistema desordenado (de longitud $L$ ) y el bloque constitutivo (de longitud $\delta L$ ). (a) y (b) definen los regímenes (ver sección 4.4) definidos en las desigualdades de la ecuación (4.37) . . . . .	101
4.2.	Representación esquemática de la secuencia de potenciales delta. . . . .	105
5.1.	$\langle M^{11}M^{22} \rangle = \langle \alpha\alpha^* \rangle$ vs $kL = k\ell(L/\ell)$ . Los resultados numéricos (círculos) del modelo unidimensional son indistinguibles de los resultados analíticos (línea continua), Ec. (5.7a). Los resultados corresponden a $x_0 = 2k\ell = 200$ , $d/\ell = 10^{-3}$ y $10^7$ realizaciones del desorden microscópico. . . . .	124
5.2.	Partes real (arriba) e imaginaria (abajo) de $\langle M^{11}M^{12} \rangle = \langle \alpha\beta \rangle$ vs $kL = k\ell(L/\ell)$ . Los resultados numéricos (círculos) del modelo unidimensional son indistinguibles de los resultados analíticos (línea continua), Ec. (5.7b) Los resultados corresponden a $x_0 = 2k\ell = 200$ , $d/\ell = 10^{-3}$ y $10^7$ realizaciones del desorden microscópico. . . . .	125
5.3.	Los procesos de transmisión directa en el $n$ -ésimo canal abierto. . . . .	130
6.1.	Representación esquemática del modelo microscópico basado en potenciales aleatorios. Cada cuadro, o “celda”, representa una región de potencial aleatorio constante. . . . .	142

6.2. Desorden volumétrico en guías de ondas: valores promedio  $\langle T_{ii} \rangle$  (canal de entrada igual al de salida), como función de  $L/\ell$ . El recuadro muestra el resultado análogo para  $\langle T_{ij} \rangle$  con  $i \neq j$  para un conjunto representativo de índices de canal. Los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (cálculos microscópicos; símbolos) y el caminante aleatorio (línea continua) son indistinguibles. Los resultados se obtuvieron con cinco canales abiertos ( $N = 5$ ,  $kW = 5.5\pi$ ),  $U_0W^2 = 100$ ,  $\delta x/W = \delta y/W = 1/50$ , y  $10^5$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 145

6.3. Desorden volumétrico en guías de ondas: intensidades de reflexión promedio  $\langle R_{ij} \rangle$  como función de  $L/\ell$ . El grupo de curvas superiores (símbolos huecos) corresponden a procesos en los que se incide por un canal y se refleja en el mismo canal ( $i = j$ ), mientras que las curvas inferiores (símbolos llenos) corresponden (para un conjunto de índices representativos) a procesos en los que se incide por un canal y se refleja por otro diferente ( $i \neq j$ ). Los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (cálculos microscópicos representados por los símbolos) y los del Caminante Aleatorio (líneas continuas) son indistinguibles. Los resultados se obtuvieron con cinco canales abiertos ( $N = 5$ ,  $kW = 5.5\pi$ ),  $U_0W^2 = 100$ ,  $\delta x/W = \delta y/W = 1/50$ , y  $10^5$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 146

6.4. Desorden volumétrico en guías de ondas: distribución de la conductancia adimensional  $P(g)$ , para diferentes promedios de la conductancia,  $\langle g \rangle$ . Las tres curvas, basadas en diferentes tratamientos son indistinguibles. Los círculos corresponden al caminante aleatorio en la aproximación. La línea continua representa los resultados de la simulación de Montecarlo. El histograma representa los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger. El recuadro de la figura representa el promedio de la conductancia como función de  $L/\ell$  . . . . . 147

6.5. Desorden superficial en guías de ondas: distribución de la conductancia adimensional  $P(g)$ , para diferentes promedios de la conductancia,  $\langle g \rangle$ . Los círculos corresponden a las simulaciones del caminante aleatorio. El histograma corresponde a los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger. El resultado basado en la ecuación de DMPK (línea continua) no muestra un buen acuerdo con los otros dos tratamientos. . . . . 148

6.6. Desorden Superficial en Guías de Ondas: Coeficientes de transmisión promedio  $\langle T_{.a} \rangle$  como función de  $L/\ell$ . El acuerdo entre los resultados basados en una solución numérica de la ecuación de Schrödinger (cálculos microscópicos: líneas continuas) y la simulación del método del caminante aleatorio (líneas punteadas) no es tan buena como lo es para las distribuciones de la conductancia 149

6.7.  $\langle T_{aa_0} \rangle$  vs  $L/\ell$ : En la figura se muestran los resultados numéricos para  $\langle T_{aa} \rangle$  utilizando el modelo alternativo del potencial. En recuadro se muestra el resultado análogo para  $\langle T_{a \neq a_0} \rangle$ . Los cálculos se realizaron en el caso de cinco canales abiertos ( $N = 5$ ), despreciando la contribución de los canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $kl = 100$  y para  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 154

- 6.8.  $\langle R_{aa_0} \rangle$  vs  $L/\ell$ : Resultados numéricos para  $\langle R_{aa_0} \rangle$  utilizando el modelo alternativo del potencial. Los cálculos se realizaron en el caso de cinco canales abiertos ( $N = 5$ ), despreciando la contribución de los canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $k\ell = 100$  y para  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 155
- 7.1.  $Re \langle t \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) es indistinguible del resultado teórico del término dominante  $\langle t \rangle_L^{(0)} = e^{-L/\ell}$  (curva de segmentos) para todo valor de  $L/\ell$ . Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 175
- 7.2.  $Re \langle t \rangle - e^{-L/\ell}$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $Re \left[ (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de segmentos) y  $Re \left[ (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} + (k\ell)^{-3} \langle t \rangle_{k,L}^{(3)} \right]$  (curva de puntos) sólo muestran un acuerdo muy cerca del origen. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. 176
- 7.3.  $Re \langle t \rangle_{Num} - e^{-L/\ell}$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) muestra las fluctuaciones del cálculo numérico de la cantidad  $Re \langle t \rangle_{Num} - e^{-L/\ell}$ , las cuales a partir de  $L/\ell \sim 0.3$  dominan el comportamiento de la curva. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . 178
- 7.4.  $Im \langle t \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos),  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) y  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} + (k\ell)^{-3} \langle t \rangle_{k,L}^{(3)} \right]$  (curva de segmentos y de puntos) muestran un muy buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 179
- 7.5.  $Im \langle t \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos),  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) e  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} + (k\ell)^{-3} \langle t \rangle_{k,L}^{(3)} \right]$  (curva de segmentos y de puntos) muestran un muy buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 180
- 7.6. Comparación entre las sumas parciales pares  $S_2(L/\ell)$ ,  $S_4(L/\ell)$ ,  $S_6(L/\ell)$  y  $Re \langle t \rangle_{k\ell \rightarrow 0} = \Theta(L/\ell)$ . . . . . 183
- 7.7. Comparación entre las sumas parciales impares  $S_1(L/\ell)$ ,  $S_3(L/\ell)$ ,  $S_5(L/\ell)$  y  $Re \langle t \rangle_{k\ell \rightarrow 0} = \Theta(L/\ell)$ . . . . . 185
- 7.8. Comparación entre las sumas parciales  $S_4(L/\ell)$ ,  $S_5(L/\ell)$  y  $Re \langle t \rangle_{k\ell \rightarrow 0} = \Theta(L/\ell)$ . 186
- 7.9. Comparación de la parte real de  $\langle t \rangle_{k,L}$  en el límite de longitud de onda corta  $k\ell \rightarrow \infty$  (línea continua) y en el límite de bajas energías  $k\ell \rightarrow 0$  (línea de segmentos). . . . . 187
- 7.10.  $Re \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $Re \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos) y  $Re \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle r \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) muestran un buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. 191

7.11.  $\text{Im} \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos) y  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle r \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) muestran un buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. 192

7.12.  $\text{Re} \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ : Resultado numérico de la parte real del valor esperado de  $r$  (curva continua) más allá del régimen balístico y la solución de la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta idealizado  $k\ell \rightarrow \infty$  (curva de segmentos): ver ecuación (5.33). Los resultados numéricos corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 193

7.13.  $\text{Im} \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ : Resultado numérico de la parte imaginaria del valor esperado de  $r$  (curva continua) más allá del régimen balístico y la solución de la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta idealizado  $k\ell \rightarrow \infty$  (curva de segmentos): ver ecuación (5.33). Los resultados numéricos corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 194

7.14.  $\langle T \rangle, \langle R \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado numérico (líneas continuas) y la serie de Born (líneas de segmentos). Los resultados numéricos corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 196

7.15.  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{Born}$  [curva punteada, primer renglón de (7.80)] y la simulación numérica  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1\ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 205

7.16.  $\text{Im} \langle t_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $\text{Im} \langle t_{11} \rangle_{Born}$  [curva punteada, segundo renglón de (7.80)] y la simulación numérica  $\text{Im} \langle t_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1\ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 206

7.17.  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1\ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 209

7.18.  $\text{Im} \langle t_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre  $\text{Im} \langle t_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1\ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 210

7.19.  $\text{Re} \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $\text{Re} \langle r_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.99a)] y la simulación numérica  $\text{Re} \langle r_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1\ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 218

- 7.20.  $Im \langle r_{11} \rangle_{k,L} vs L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $Im \langle r_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.99a)] y la simulación numérica  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 219
- 7.21.  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . Comparación entre  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 220
- 7.22.  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . Comparación entre  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 223
- 7.23.  $\langle T_{11} \rangle vs L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle T_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.124)] y el resultado numérico  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 229
- 7.24.  $\langle T_{22} \rangle vs L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle T_{22} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.124)] y el resultado numérico  $\langle T_{22} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 230
- 7.25.  $\langle T_{12} \rangle vs L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle T_{12} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.124)] y el resultado numérico  $\langle T_{12} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 231
- 7.26.  $\langle T_{11} \rangle_{Num}, \langle T_{22} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . La curva superior muestra la comparación entre  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos), con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos) y con tres canales cerrados ( $N' = 3$ , línea de segmentos y puntos). La curva inferior muestra la comparación entre  $\langle T_{22} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos), con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos) y con tres canales cerrados ( $N' = 3$ , línea de segmentos y puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 233
- 7.27.  $\langle T_{12} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . La curva muestra la comparación entre  $\langle T_{12} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos), con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos) y con tres canales cerrados ( $N' = 3$ , línea de segmentos y puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 234

7.28.  $\langle R_{11} \rangle vs L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle R_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.138)] y el resultado numérico  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 238

7.29.  $\langle R_{22} \rangle vs L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle R_{22} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.138)] y el resultado numérico  $\langle R_{22} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 239

7.30.  $\langle R_{12} \rangle vs L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle R_{12} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.138)] y el resultado numérico  $\langle R_{12} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 240

7.31.  $\langle R_{11} \rangle_{Num}, \langle R_{22} \rangle_{Num}, \langle R_{12} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . Las curvas  $\langle R_{22} \rangle_{Num}, \langle R_{11} \rangle_{Num}$  y  $\langle R_{12} \rangle_{Num}$  que no consideran canales cerrados ( $N' = 0$ ) son indistinguibles de las correspondientes curvas que sí consideran canales cerrados ( $N' = 1, 2, 3$ ). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 241

7.32.  $\langle T_{\cdot 1} \rangle_{Num}, \langle R_{\cdot 1} \rangle_{Num}, \langle T_{\cdot 1} \rangle_{Num} + \langle R_{\cdot 1} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . Verificación numérica de la conservación de Flujo para  $\langle T_{\cdot 1} \rangle_{Num}$  (curva continua),  $\langle R_{\cdot 1} \rangle_{Num}$  (curva de segmentos) y  $\langle T_{\cdot 1} \rangle_{Num} + \langle R_{\cdot 1} \rangle_{Num}$  (curva de puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), cero canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 242

7.33.  $\langle T_{\cdot 2} \rangle_{Num}, \langle R_{\cdot 2} \rangle_{Num}, \langle T_{\cdot 2} \rangle_{Num} + \langle R_{\cdot 2} \rangle_{Num} vs L/\ell$ . Verificación numérica de la conservación de Flujo para  $\langle T_{\cdot 1} \rangle_{Num}$  (curva continua),  $\langle R_{\cdot 1} \rangle_{Num}$  (curva de segmentos) y  $\langle T_{\cdot 1} \rangle_{Num} + \langle R_{\cdot 1} \rangle_{Num}$  (curva de puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), cero canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 243

7.34.  $Cov(R_{ab}, R_{cd})_{Num}$  y  $Var(R_{ab})_{Num} vs L/\ell$ . Curvas numéricas de las Varianzas y Covarianzas en el régimen balístico. Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 247

7.35.  $Var(R_{11}) vs L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(R_{11})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 248

7.36.  $Var(R_{22}) vs L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(R_{22})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 249

7.37.  $Var(R_{12}) vs L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(R_{12})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 250

7.38.  $Cov(R_{11}, R_{22})$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la covarianza  $Cov(R_{11}, R_{22})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 251

7.39.  $Var(g)$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(g)$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 252

7.40.  $Cov(R_{aa_0}, R_{bb_0})_{Num}$  y  $Var(R_{aa_0})_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Covarianzas y varianzas numéricas de las intensidades de reflexión más allá del régimen balístico. Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 253

7.41. Varianza de la conductancia más allá del régimen balístico. Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico. . . . . 254

D.1. Función de Bessel superpuesta con las primeras tres sumas parciales . . . . . 284

D.2. Primera ampliación de la superposición de la Función de Bessel con las primeras tres sumas parciales . . . . . 285

D.3. Segunda ampliación de la superposición de la Función de Bessel con las primeras tres sumas parciales . . . . . 285



# Introducción

El estudio de fenómenos complejos de *dispersión de ondas*, como lo son las fluctuaciones estadísticas de la transmisión o reflexión, es de gran interés en diversos campos de la física [1–12], por ejemplo: en sistemas electromagnéticos, cuánticos y acústicos. La complejidad de estos fenómenos proviene de la naturaleza caótica de la dinámica clásica, como sucede en una cavidad de microondas y en los puntos cuánticos, o de la naturaleza aleatoria del potencial dispersor, como sucede en un conductor desordenado o, en general, en guías de ondas desordenadas. El último caso será el que estudiaremos en el presente trabajo. La complejidad del problema no sólo se debe a las fluctuaciones en el potencial, sino también a que se trata de un problema de ***dispersión múltiple y coherente***; el problema se estudiará para un *sistema cuántico*, pero la aplicabilidad del modelo puede extenderse a *sistemas de ondas clásicas*.

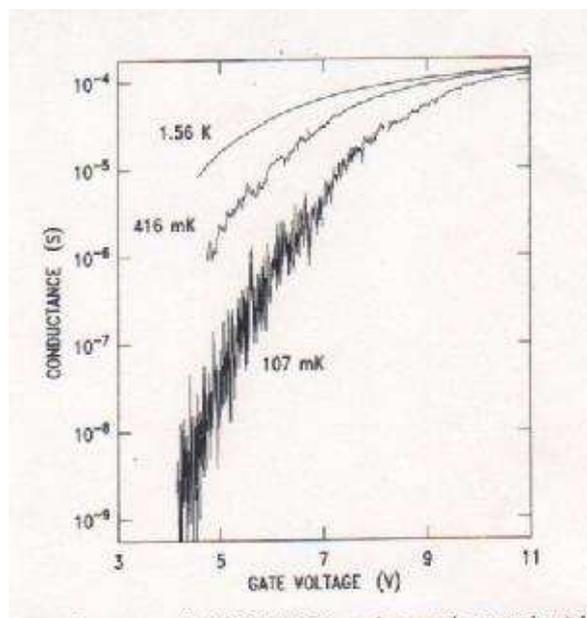


Figura 1: La conductancia de un Si-MOSFET ( $10\mu\text{m}$  de largo y aproximadamente  $0,05\mu\text{m}$  de ancho) como función del voltaje de compuerta para tres temperaturas.

El estudio de la dispersión en sistemas desordenados debe enfocarse desde un punto de vista estadístico, pues un cambio en algún parámetro externo cambia por completo el patrón de interferencia producido por estos sistemas; por lo tanto, sólo es factible

un tratamiento estadístico. Por esta razón el título de la presente tesis es: ***Estudio estadístico de la dispersión de ondas en guías de ondas desordenadas.***

A continuación mostramos algunos ejemplos en los que un cambio en un parámetro externo cambia por completo el patrón de interferencia:

- En la figura 1 se muestra la conductancia de una muestra específica de Si-MOSFET a tres diferentes temperaturas, la cual muestra fuertes fluctuaciones como función del voltaje de compuerta; estos patrones son reproducibles para cada muestra pero cambian completamente al cambiar la muestra. [4, figura 1 del prefacio].
- La figura 2 muestra los resultados numéricos para el coeficiente de transmisión  $T$  de una cavidad caótica bidimensional como función de la energía de incidencia. En la figura se observan fuertes fluctuaciones del coeficiente de transmisión de la cavidad abierta. Estas fluctuaciones se deben a que las resonancias de la cavidad se superponen. La superposición de las resonancias depende del número de canales abiertos siendo más importante conforme el número de canales aumenta. Las fluctuaciones del coeficiente de transmisión son reproducibles para cada muestra [10, figura 6.1].

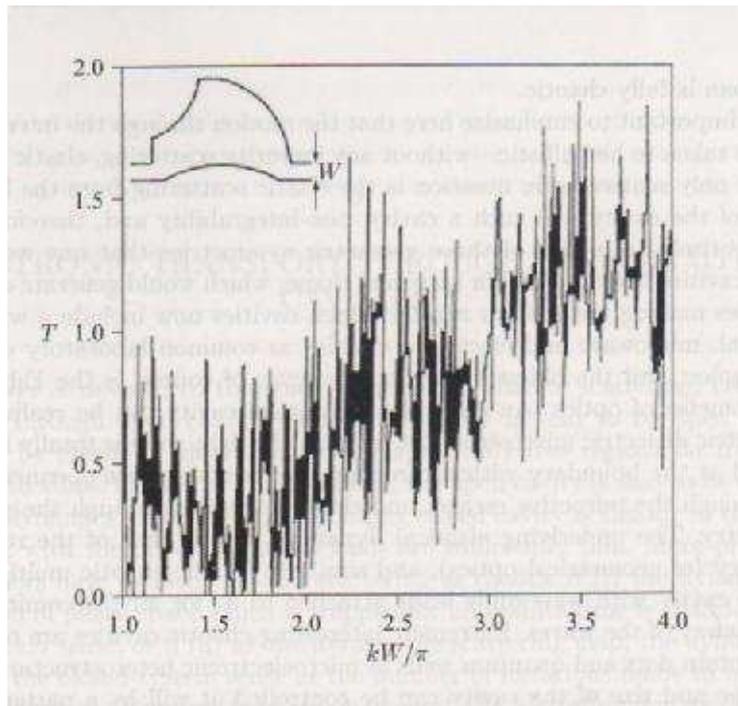


Figura 2: Solución numérica de la ecuación de Schrödinger para el coeficiente de transmisión  $T$  como función de la energía de incidencia ( $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ) de una cavidad caótica abierta en dos dimensiones.

En este trabajo estudiaremos la dispersión producida por un potencial aleatorio en el interior de una guía de ondas bidimensional. Dicho potencial representará el desorden

microscópico en la guía. El patrón de interferencia que produce una muestra diferirá de manera importante al cambiar la muestra, es decir, al cambiar la realización del desorden microscópico. Simulaciones numéricas muestran que el patrón es tan sensible a la configuración del desorden que si se consideran dos configuraciones que son idénticas salvo una impureza, entonces se observa que los patrones de éstas son completamente diferentes [13]; por lo tanto, se requiere un tratamiento estadístico.

La descripción estadística del problema considera un *ensemble* de guías de ondas, todas con longitud  $L$ ; a cada elemento del ensemble se le asocia una matriz de transferencia [ver sección 2.5, ecuación (2.49)] que representa una posible configuración del desorden microscópico. De esta manera, se construye un *ensemble* de matrices de transferencia, del cual se obtendrán los *valores esperados de observables macroscópicos*. Lo anterior sugiere aplicar un modelo de *matrices aleatorias* para el ensemble de matrices de transferencia. Como se explicará en el Capítulo 4, es conveniente describir la dispersión en términos de la matriz de transferencia en vez de hacerlo con la matriz de dispersión.

Los estudios previos en este tipo de sistemas han encontrado notables regularidades estadísticas, ya que la distribución de probabilidad de cantidades macroscópicas sólo depende de algunos parámetros físicos relevantes (por ejemplo el camino libre medio  $\ell$ ), siendo intrascendente la mayoría de los detalles microscópicos. Estas distribuciones límite reflejan la existencia un *teorema de límite central generalizado* (CLT por sus siglas en inglés: central limit theorem) que les da un carácter *universal*. A continuación se resumirá la manera en que algunos de estos trabajos han abordado el problema, las características de los modelos utilizados y los resultados más importantes obtenidos en algunos de estos trabajos:

- Mello y Shapiro [14] mostraron que en el límite denso de dispersión débil [DWSL por sus siglas en inglés: dense-weak-scattering limit; ver sección 4.3.2, ecuación (4.32)] se obtiene una *distribución límite* de cantidades físicas. Dicho resultado se obtuvo para una clase particular de modelos donde las unidades dispersoras microscópicas se definen mediante sus matrices de transferencia (ver sección 2.5) para las que se supuso una distribución isotrópica de las fases. Dicha distribución límite representa un *teorema de límite central* asociado con el producto de matrices de transferencia. En ese modelo, el único parámetro físico relevante que aparece en el resultado final (en el DWSL) y que está relacionado con algunos detalles microscópicos, es el camino libre medio  $\ell$  [ver ecuación (4.22)].
- El resultado obtenido en [14] es consistente con el resultado que se encuentra mediante el modelo de *máxima entropía* [15], el cual obtiene la ecuación de difusión de DMPK (Dorokhov [16] y Mello, Pereyra y Kumar [15]). A pesar de que la ecuación de DMPK tuvo éxito en el estudio de la distribución de la conductancia [6], ésta falla cuando la diferencia entre los modos de propagación es relevante. Por ejemplo, para guías de ondas con desorden de volumen, la ecuación de DMPK da una descripción excelente, mientras que para desorden superficial falla [11, 17].
- Mello y Tomsovic [18] estudiaron una clase de distribución límite más amplia que la estudiada en la referencia [14], donde la suposición de isotropía de las fases no se utilizó. Una vez más el DWSL jugó un papel esencial dando como resultado un teorema de límite central más generalizado que el que obtuvieron Mello y

Shapiro en la referencia [14]. Los parámetros relevantes en este modelo son los caminos libres medios relacionados con procesos de dispersión de los diferentes modos de propagación que admite la guía. Cuando todos los caminos libres medios son iguales se recupera la ecuación de difusión de DMPK [15]. Por esta razón, el modelo de Mello y Tomsovic es un candidato para estudiar la influencia que los diferentes modos tienen en la dispersión en una guía con desorden en la superficie. Las ideas utilizadas en este modelo son análogas a las que se utilizan en el estudio del movimiento Browniano [19]: a una guía de ondas de longitud  $L$  se le añade un subsistema de longitud  $\delta L \ll L$ , que llamaremos bloque constitutivo (BB por sus siglas en inglés: building block), pequeño a escala macroscópica, pero que aún contiene muchos dispersores en su interior. La longitud  $\delta L$  del bloque constitutivo es el análogo al intervalo de tiempo  $\delta t$  (pequeño macroscópicamente) en el que una partícula Browniana sufra muchas colisiones con las moléculas a su alrededor [20].

- En los modelos de las referencias [14, 15, 18] se hace la suposición de que el sistema es invariante ante inversiones temporales [TRI por sus siglas en inglés: time reversal invariance; ver ecuaciones (2.72)-(2.73)]. Hay que resaltar que estos modelos son generales, ya que se hacen para la matriz de transferencia sin hacer mención del potencial microscópico; además, dichos modelos son válidos en un régimen de altas energías en el que el camino libre medio  $\ell$  es mucho mayor que la longitud de onda  $\lambda$ .

La motivación del presente trabajo es obtener la ecuación de difusión que gobierna la evolución (con la longitud  $L$ ) de los valores esperados de observables físicos; sin embargo, a diferencia de los trabajos previos, lo anterior se hará a partir de un modelo del potencial, lo que nos permitirá relajar algunas de las aproximaciones hechas en otros trabajos; por ejemplo: la ecuación de difusión que obtendremos no está restringida al régimen de altas energías; de hecho, ese régimen se obtendrá a partir del modelo que desarrollaremos en el presente trabajo.

La organización de la Tesis es la siguiente:

En el Capítulo 1 presentaremos algunos conceptos básicos de la dispersión electromagnética y cuántica que usualmente se estudian en los libros de texto; por ejemplo: en ambos casos discutiremos el método de la función de Green (ver sección 1.2), el concepto de sección eficaz y la serie de Born; además, discutiremos las similitudes y diferencias entre ambos casos. En el caso electromagnético daremos la explicación elemental del azul del cielo fenómeno que, como sabemos, se explica al considerar las *fluctuaciones* en la densidad de partículas del aire.

En el Capítulo 2 expondremos con todo detalle la dispersión que produce un *potencial arbitrario* en una guía de ondas bidimensional. Lo anterior se hará en el lenguaje de la Mecánica Cuántica, por lo que partiremos de la ecuación de Schrödinger bidimensional, cuyo hamiltoniano no depende del spin y es invariante ante inversiones temporales (TRI). El objetivo de este Capítulo es plantear de manera general el problema de la dispersión en guías de ondas bidimensionales e introducir los conceptos que se usarán a lo largo de toda Tesis; por ejemplo: las matrices de transferencia y de dispersión, las propiedades de conservación de flujo [FC por sus siglas en inglés: flux conservation; ver ecuación (2.54)] e invariancia ante inversiones temporales (TRI) y la serie de Born; por lo tanto, este

Capítulo será una referencia para los capítulos posteriores y no será necesario que los lectores familiarizados con los temas ahí expuestos lean en detalle su contenido.

En el Capítulo 3 definiremos el modelo microscópico del potencial como una serie de dispersores individuales que idealizaremos como potenciales delta. En ese Capítulo se estudia la dispersión producida por un dispersor individual y se obtienen las matrices de transferencia y dispersión (ver sección 3.3.2). Dichas matrices se expresan en términos del potencial efectivo, Ec. (3.49), el cual jugará un papel trascendental en el resto de tesis, ya que en el Capítulo 4 se define el camino libre medio  $\ell_{ab}$ , Ec. (4.22), en términos de esta cantidad.

El Capítulo 4 es central en el presente trabajo, pues en éste obtendremos *la ecuación de difusión*, la cual gobierna la evolución de los valores esperados de observables macroscópicos: ver ecuación (4.41). Para obtener esta ecuación definiremos un modelo estadístico para el potencial efectivo, Ec. (4.16), a partir del cual *derivaremos* las propiedades estadísticas de la matriz de transferencia del bloque constitutivo. Posteriormente se utiliza la propiedad multiplicativa de la matriz de transferencia, Ec. (4.4), y la suposición de que el bloque (de longitud  $\delta L$ ) y el sistema de longitud  $L \gg \delta L$  (al que se le añade el bloque constitutivo) son estadísticamente independientes, lo que permite obtener, en el DWSL, Ec. (4.32), la ecuación de difusión.

La ecuación de difusión (4.41) sólo dependerá de los detalles de la distribución del potencial microscópico a través de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ , los cuales están relacionados con el segundo momento del potencial efectivo, Ec. (4.22). A diferencia de la ecuación de difusión que obtuvieron Mello y Tomsovic [18], la ecuación (4.41) es válida para una energía arbitraria. En la sección 4.4.3 definiremos la *aproximación de longitud de onda corta* (SWLA por sus siglas en inglés: short wave length approximation); esta aproximación nos permitirá recuperar el límite de altas energías, obteniendo así una ecuación de difusión, Ec. (4.56), que es casi la misma que la de la referencia [18].

En el Capítulo 5 mostraremos algunos casos particulares en los que pudimos resolver la ecuación de difusión. En la sección 5.2 resolveremos dicha ecuación en el caso unidimensional (dependiente de la energía) para un observable particular, el cual está relacionado con la resistencia de Landauer [21]: ver ecuación (5.24). Posteriormente en la sección 5.3 aplicaremos la ecuación de difusión en SWLA a las amplitudes de transmisión y de reflexión obteniendo los mismos resultados que Tomsovic [18]: ver ecuaciones (5.27c) y (5.33c). Desafortunadamente no hemos podido resolver la ecuación de difusión para observables de mayor interés (ni siquiera en en la aproximación de longitud de onda corta) como las intensidades de transmisión y de reflexión. Esto dio lugar al desarrollo de métodos numéricos (ver Capítulo 6) y perturbativos (ver Capítulo 7) que permitiesen información de este tipo de observables. Por último, en la sección 5.3.3 mostraremos la consistencia de la ecuación de difusión (en el SWLA) con las propiedades de conservación de flujo e invariancia ante inversiones temporales.

En el Capítulo 6 se presentará brevemente la simulación numérica del *caminante aleatorio en espacio de matrices de transferencia* (RWTMS por sus siglas en inglés: random walk in the transfer matrix space). Luis Froufe realizó esa simulación numérica, la cual forma parte del trabajo que publicado en la referencia [22]. Este método permitió obtener numéricamente los valores esperados de las intensidades de transmisión y de reflexión, así como la función de distribución de la conductancia para desorden de volumen y superficial: el acuerdo entre el caminante aleatorio y la solución numérica

de la ecuación de Schrödinger (basada en un modelo microscópico del potencial propuesto por Luis Froufe) es muy buena en ambos casos. Es oportuno aclarar que este método numérico no resuelve propiamente la ecuación de difusión, sino que utilizando las propiedades estadísticas del bloque constitutivo, se construye numéricamente un ensemble de matrices de transferencia del cual se obtienen los promedios estadísticos. Además del método del caminante aleatorio, en ese Capítulo se presentará un modelo microscópico del potencial alternativo al que propuso Luis Froufe, en el que basaremos las simulaciones numéricas del Capítulo 7.

Las referencias [23, 24] contienen, respectivamente, una versión preliminar y una resumida del material contenido en los capítulos 3, 4, 5 y 6, mientras el trabajo completo se publicó en la referencia [22].

El Capítulo 7 es la base de una publicación futura cuyo tema central es el estudio de la dispersión en el régimen balístico, es decir, cuando el tamaño del sistema es mucho menor que el camino libre medio; por ejemplo, el bloque constitutivo (BB) cumple con esta característica: ver ecuación (4.36). Si bien esta parte del trabajo no se ha concluido ni ha sido publicada, el método ha proporcionado muchos resultados interesantes (algunos novedosos) que han requerido verificación numérica, siendo bueno el acuerdo entre las predicciones teóricas y los correspondientes resultados numéricos; por lo tanto, hemos dedicado un Capítulo para presentar este método y sus resultados más importantes. A diferencia de los capítulos anteriores, en el Capítulo 7 se aborda el problema mediante el método perturbativo de la serie de Born (ver sección 2.6), por lo que este tratamiento es independiente de la ecuación de difusión. Las motivaciones que dieron lugar a esta última parte se explican a continuación:

- Obtener información analítica de los valores esperados de cantidades relacionadas con la matriz de dispersión, es decir, de las amplitudes e intensidades de transmisión y reflexión, así como de la conductancia. Esta motivación se debe a que, como veremos en el Capítulo 5, la ecuación de difusión *dependiente de la energía*, Ec. (4.41), no se ha podido resolver analíticamente para este tipo de observables, mientras que la ecuación simplificada del SWLA, Ec. (4.56), sí se puede resolver para las amplitudes, pero no para las intensidades: ver sección 5.3.2.
- Estudiar al bloque constitutivo como un sistema de interés físico por sí mismo y no sólo como un paso intermedio para obtener la ecuación de difusión. Este interés se debe a que dicho sistema tiene propiedades estadísticas universales (en el DWSL: ver Capítulo 4). Los resultados teóricos que obtengamos para este sistema balístico buscan motivar la realización de experimentos en el laboratorio; además, este sistema tiene una gran relevancia pues es la base para el desarrollo del caminante aleatorio (ver Capítulo 6), método que permite obtener (numéricamente) información de los valores esperados para los que no se ha podido resolver la ecuación de difusión.
- Obtener información analítica, en el régimen balístico de las *covarianzas de intensidades* y la *varianza de la conductancia*. Las covarianzas de las intensidades y la varianza de la conductancia han sido muy estudiadas en el régimen difusivo (en el que el camino libre medio es mucho menor que el tamaño del sistema) y considerando que el número de canales abiertos (modos viajeros), Ec. (2.10), es

muy grande [25–28]; bajo estas circunstancias se observa el fenómeno de las *fluctuaciones universales de la conductancia* (UCF por sus siglas en inglés: universal conductance fluctuations) en el que la varianza de la conductancia es una *constante universal* independiente del tamaño del sistema, del número de canales abiertos y del valor promedio de la conductancia; sin embargo, el comportamiento de las covarianzas de las intensidades, así como el de la varianza de la conductancia, no han sido muy estudiados en el régimen balístico, lo cual sí podemos hacer mediante el método que propondremos en el Capítulo 7.

- Como veremos en el Capítulo 4, para construir la ecuación de difusión se utiliza la *matriz transferencia reducida* tanto del sistema de longitud  $L$  como la del bloque constitutivo de longitud  $\delta L$ , Ecs. (4.1)-(4.4). Este procedimiento no toma en cuenta de manera apropiada la contribución de los canales cerrados (modos evanescentes), Ec. (2.21); no obstante lo anterior, hay evidencia numérica (por ejemplo los resultados del Capítulo 6) que muestra que los valores esperados de las *intensidades* y de la *conductancia* son “poco sensibles” al número de canales cerrados que se consideren en el cálculo; sin embargo, en el Capítulo 7 mostraremos explícitamente (en el régimen balístico y en la aproximación de longitud de onda corta), que los valores esperados de amplitudes y de intensidades *sí tienen contribuciones de canales cerrados* y que éstas son relevantes en el caso de las amplitudes, pero despreciables en caso de las intensidades. Este hecho se corroborará (incluso más allá del régimen balístico) con los resultados numéricos.



# Capítulo 1

## Dispersión electromagnética y cuántica

### 1.1. Introducción

La manera de estudiar las interacciones que gobiernan las partículas microscópicas es mediante procesos de dispersión, en los cuales una partícula en un estado inicial, con energía y momento conocidos, incide sobre un blanco e interacciona con éste; como resultado la partícula incidente sufre un cambio en su energía (si la colisión no es elástica) y su momento, por lo cual el estado final de ésta diferirá de su estado inicial. La dispersión de la partícula incidente se produce por la presencia de un potencial. Para describir el proceso de dispersión se consideran, tanto antes como después de la dispersión, los estados asintóticos de la partícula incidente los cuales son válidos lejos de la región de dispersión.

El proceso de dispersión puede ser de dos tipos: i) proceso elástico, el cual se caracteriza porque la energía cinética del estado inicial es igual a la del estado final, ii) proceso inelástico, el cual se caracteriza por una diferencia entre la energía cinética del estado inicial y la del estado final. En el presente trabajo sólo se tratará el caso de dispersión elástica.

Los procesos de dispersión que principalmente nos interesan son: 1) *dispersión electromagnética* y 2) *dispersión mecánico cuántica*. Estos dos tipos de dispersión tienen la misma naturaleza ondulatoria (el primero es de carácter vectorial y el segundo es de carácter escalar en ausencia de *spin*); por lo tanto, el método con el que se estudia ambos casos es el mismo: ver sección 1.2.

Como ya se mencionó en la Introducción de este trabajo, nuestro interés es estudiar la dispersión en el interior de una guía de ondas (ver capítulos 2 y 4), es decir, en sistemas de dimensionalidad  $D$ , los cuales están acotados en  $D - 1$  dimensiones y abiertos en una de ellas; sin embargo, en el presente capítulo se hará una revisión general de la dispersión tridimensional electromagnética (Sec. 1.3) y cuántica (Sec. 1.4) exhibiendo sus similitudes y diferencias.

## 1.2. Ecuaciones integrales y función de Green

Para estudiar el problema de dispersión electromagnética o cuántica se transforman las ecuaciones diferenciales de Maxwell o de Schrödinger en ecuaciones integrales, lo cual requiere el uso de la función de Green no perturbada. Estas ecuaciones integrales contienen la misma información que las ecuaciones diferenciales de Maxwell o de Schrödinger. Las ecuaciones integrales son igualmente difíciles de resolver que las ecuaciones diferenciales de las cuales se obtuvieron, pero éstas nos permiten aplicar métodos iterativos para obtener una solución aproximada.

A continuación presentaremos brevemente la manera en que se utiliza el método de la función de Green para obtener las ecuaciones integrales de la dispersión tridimensional electromagnética y cuántica. Por simplicidad la exposición se hará para una ecuación de onda escalar en el espacio tridimensional, pero el método es el mismo para una ecuación vectorial. La manera en que presentamos el método sigue la misma lógica que la referencia [29].

Considérese la siguiente ecuación escalar

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi(\mathbf{x}) = \widehat{O}(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}), \quad (1.1)$$

donde  $\widehat{O}(\mathbf{x})$  es, en general, un operador que actúa sobre la función  $\Psi(\mathbf{x})$ . Formalmente, el lado derecho de la Ec. (1.1) se puede considerar como un término de inhomogeneidad de la ecuación

$$(\nabla^2 + k^2) \varphi(\mathbf{x}) = 0, \quad (1.2a)$$

$$\rho(\mathbf{x}) = -\widehat{O}(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}). \quad (1.2b)$$

La solución más general de la ecuación (1.1) es la suma de una función  $\varphi(\mathbf{x})$  que es solución de la ecuación homogénea (1.2a) más una solución particular. La solución particular se obtiene mediante el método de la función de Green, la cual satisface la siguiente ecuación diferencial

$$(\nabla^2 + k^2) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'); \quad (1.3)$$

por lo tanto, la solución “formal” más general de la Ec. (1.1) se escribe como:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}) - \int G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \widehat{O}(\mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (1.4)$$

Existen (por lo menos) tres funciones de Green que resuelven la ecuación (1.1): la función de Green saliente  $G^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ , la entrante  $G^-(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  y la estacionaria  $G^1(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ :

$$G^\pm(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}, \quad (1.5a)$$

$$G^1(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{2\pi} \frac{\cos k|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}. \quad (1.5b)$$

Cada una de estas funciones de Green satisface condiciones de frontera diferentes; por lo tanto, para determinar la función de Green que se utilizará debe fijarse la condición de

frontera del problema particular que se esté considerando. La condición de frontera que se considera en el problema de la dispersión pide que el comportamiento asintótico de la función  $\Psi(\mathbf{x})$  sea una onda plana  $\varphi(\mathbf{x})$  más una onda esférica que salga de la región de dispersión. La función de Green que permite este comportamiento asintótico es la saliente  $G^+(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ ; por lo tanto, la solución saliente  $\Psi^+(\mathbf{x})$  se escribe de la siguiente manera:

$$\Psi^+(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \widehat{O}(\mathbf{x}') \Psi^+(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (1.6)$$

La expresión anterior es la ecuación integral de Lippmann-Schwinger tridimensional que substituye (en el problema de dispersión) a la ecuación diferencial (1.1). Al considerar el comportamiento asintótico de la función de onda saliente, Ec. (1.6), se obtiene

$$\Psi^+(\mathbf{x}) \sim \varphi(\mathbf{x}) + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \phi), \quad (1.7a)$$

$$f(\vartheta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \widehat{O}(\mathbf{x}') \Psi^+(\mathbf{x}') d\mathbf{x}', \quad (1.7b)$$

donde el vector  $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{n}}$  es el vector de onda en la dirección de observación definida por el vector unitario  $\hat{\mathbf{n}}$  y  $f(\vartheta, \phi)$  es la amplitud de dispersión, siendo  $\vartheta$  y  $\phi$  los ángulos que definen la dirección de observación  $\hat{\mathbf{n}}$ .

Un planteamiento análogo conducirá a la ecuación de Lippmann-Schwinger unidimensional, la cual se utilizará en el estudio de la dispersión en guías de ondas bidimensionales: ver sección 2.4.1. En esa exposición se hablará de las amplitudes de reflexión  $r$  y de transmisión  $t$  en vez de la amplitud de dispersión  $f(\vartheta, \phi)$ .

### 1.3. Dispersión electromagnética

Los diferentes enfoques de la dispersión electromagnética dependen de las escalas de longitud relativas que estén involucradas: la longitud de onda  $\lambda$  y el tamaño del blanco dispersor  $a$ .

i) Cuando la longitud de onda de la radiación es grande comparada con las dimensiones del obstáculo, se usa una descripción sencilla en términos de los multipolos inducidos a orden más bajo, es decir, se toma una *aproximación dipolar* (ver sección 1.3.1).

ii) Si la longitud de onda y el tamaño del obstáculo son comparables, debe usarse un tratamiento más sistemático con los campos multipolares.

iii) Si la longitud de onda es corta comparada con el tamaño del blanco, se pueden usar métodos semigeométricos para obtener las correcciones a la óptica geométrica.

Nuestro interés es estudiar el caso en el que la longitud de onda  $\lambda$  es grande comparada con el tamaño de los blancos dispersores.

El tratamiento que daremos en esta sección es, salvo algunas adaptaciones, análogo al que presenta Jackson [30].

### 1.3.1. Dispersión para longitudes de onda grandes: aproximación dipolar

#### Dispersión dipolar producida por un dispersor pequeño

Pensemos en la dispersión de ondas electromagnéticas producida por sistemas cuya dimensión  $a$  cumple la condición  $a \ll \lambda$ , es decir, que las variaciones espaciales del campo de la onda electromagnética incidente no son apreciables a la escala  $a$ . En estas interacciones conviene expresar el campo de radiación como un desarrollo multipolar, el cual oscila con una relación de fase bien definida entre los multipolos y el campo de la radiación incidente. Estos multipolos radiarán energía en todas direcciones produciendo así la radiación de dispersión.

La distribución angular de la energía radiada se obtiene por la superposición *coherente* de los multipolos que inducen los campos incidentes y en general depende de la polarización de la onda incidente. Si  $a \ll \lambda$ , sólo los multipolos de orden más bajo contribuyen. Bajo estas circunstancias los dipolos pueden calcularse de las condiciones de frontera estáticas [30].

Si se supone que la radiación incidente es una onda plana monocromática con longitud de onda  $\lambda \gg a$ , polarización  $\hat{\epsilon}_0$  y dirección de propagación  $\hat{\mathbf{n}}_0$ , entonces el campo eléctrico de la onda se escribe como:

$$\mathbf{E}_{inc}(\mathbf{x}', t) = E_0 e^{i(k\hat{\mathbf{n}}_0 \cdot \mathbf{x}' - \omega t)} \hat{\epsilon}_0. \quad (1.8)$$

De ahora en adelante se omitirá la dependencia temporal  $e^{-i\omega t}$ . Al incidir la onda electromagnética plana sobre el dispersor, ésta inducirá todos los términos del desarrollo multipolar en el dispersor, pero los momentos dipolares eléctrico  $\mathbf{p}$  y magnético  $\mathbf{m}$  son los que dan la contribución más importante al campo de radiación; por lo tanto, sólo consideraremos las contribuciones de éstos. Los momentos dipolares  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{m}$  dependen de la magnitud  $E_0$ , de la polarización  $\hat{\epsilon}_0$  del campo incidente, Ec. (1.8), así como de la posición del dispersor localizado en  $\mathbf{x}'$ . La dependencia de los dipolos en la posición  $\mathbf{x}'$  se debe a que éstos son funciones del campo incidente, el cual se evalúa en la posición  $\mathbf{x}'$  del dispersor. Por simplicidad consideraremos que el dispersor está en  $\mathbf{x}' = 0$ .

Los dipolos  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{m}$  que induce el campo incidente (1.8) en el dispersor generan el siguiente campo de radiación:

$$\mathbf{E}_{sc} = \frac{k^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ikr}}{r} \left[ (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{p}) \times \hat{\mathbf{n}} - \frac{1}{c} \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{m} \right], \quad (1.9)$$

donde  $\hat{\mathbf{n}}$  es el vector en la dirección de observación y  $r$  es la distancia desde el dispersor a un punto de observación lejano al dispersor.

La sección transversal diferencial de dispersión se define en términos del campo dispersado, Ec. (1.9), de la siguiente manera:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\epsilon}; \hat{\mathbf{n}}_0, \hat{\epsilon}_0) = \frac{r^2 |\hat{\epsilon}^* \cdot \mathbf{E}_{sc}|^2}{|\hat{\epsilon}_0^* \cdot \mathbf{E}_{inc}|^2}. \quad (1.10)$$

donde  $\hat{\epsilon}$  es el vector de polarización de la onda dispersada. Si sustituimos el campo de la onda incidente, Ec. (1.8), y el de la onda dispersada, Ec. (1.9), en (1.10) obtenemos

que en la *aproximación dipolar* la sección transversal diferencial es:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}; \hat{\mathbf{n}}_0, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) = \frac{k^4}{(4\pi\epsilon_0 E_0)^2} \left| \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{c} (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^*) \cdot \mathbf{m} \right|^2. \quad (1.11)$$

La dependencia de la sección transversal en  $\hat{\mathbf{n}}_0$  y  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0$  está implícita en  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{m}$  pues estos dipolos inducidos dependen tanto de  $\hat{\mathbf{n}}_0$  y  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0$  así como de la intensidad de la onda incidente  $E_0$ . Si ambos momentos dipolares  $\mathbf{p}$  y  $\mathbf{m}$  son cero, habrá que considerar multipolos de orden superior.

### Dispersión dipolar producida por una colección de dispersores pequeños

Si sobre un sistema compuesto por un número grande  $N$  de pequeños dispersores incide una onda electromagnética plana, Ec. (1.8), ésta inducirá un momento dipolar eléctrico y uno magnético en cada dispersor; estos dipolos producirán campos de radiación de dispersión en todas direcciones. En principio, la radiación emitida por el  $j$ -ésimo dipolo puede interactuar con el  $k$ -ésimo, que a su vez dispersará la radiación del  $j$ -ésimo dispersor y así sucesivamente. Este proceso se conoce como *dispersión múltiple*. Sin embargo, en la exposición de esta sección, sólo consideraremos *dispersión simple*.

Los momentos dipolares inducidos son proporcionales a los campos incidentes, los cuales se evalúan en las posiciones de los diferentes dispersores  $\mathbf{x}_j$ ; por lo tanto:

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}_j), \mathbf{m}(\mathbf{x}_j) \sim \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{x}_j) \sim e^{ik\hat{\mathbf{n}}_0 \cdot \mathbf{x}_j}. \quad (1.12)$$

Al suponer que los momentos dipolares  $\mathbf{p}(\mathbf{x}_j)$  y  $\mathbf{m}(\mathbf{x}_j)$  dependen del campo incidente evaluado en la posición  $\mathbf{x}_j$  se tiene que:

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}_j) = \mathbf{p}_j e^{ik\hat{\mathbf{n}}_0 \cdot \mathbf{x}_j}, \quad \mathbf{m}(\mathbf{x}_j) = \mathbf{m}_j e^{ik\hat{\mathbf{n}}_0 \cdot \mathbf{x}_j}. \quad (1.13)$$

Análogamente, los momentos dipolares  $\mathbf{p}_j$  y  $\mathbf{m}_j$  tienen una dependencia no sólo en la intensidad del campo eléctrico  $E_0$ , sino también en la polarización de la onda incidente  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0$ . Por lo tanto, la superposición coherente de las amplitudes de dispersión de todos los dispersores del sistema se escribe como:

$$\mathbf{E}_{sc}(\mathbf{x}) = \frac{k^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{ikr}}{r} \sum_{j=1}^N \left[ (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{p}_j) \times \hat{\mathbf{n}} - \frac{1}{c} \hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{m}_j \right] e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j} \quad (1.14a)$$

$$\mathbf{q} = k(\hat{\mathbf{n}}_0 - \hat{\mathbf{n}}) = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}, \quad (1.14b)$$

$$q = 2k \left| \sin \frac{\vartheta}{2} \right|, \quad (1.14c)$$

siendo  $\mathbf{q}$  el cambio del vector de onda durante la dispersión y  $\hat{\mathbf{n}}$  la dirección de observación. En (1.14a) sólo se hemos considerado *dispersión simple*.

La sección transversal diferencial de todo el sistema se obtiene al introducir la superposición coherente, Ec. (1.14a), en la ecuación (1.10); de esta manera se obtiene:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}, \hat{\mathbf{n}}_0, \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) = \frac{k^4}{(4\pi\epsilon_0 E_0)^2} \left| \sum_{j=1}^N A_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \right|^2, \quad (1.15a)$$

$$A_j = \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \mathbf{p}_j - \frac{1}{c} (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^*) \cdot \mathbf{m}_j. \quad (1.15b)$$

La presencia del factor  $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j}$  en la ecuación (1.15a), tiene como consecuencia que la dispersión dependa sensiblemente de la distribución espacial de los dispersores. Consideremos que los dispersores están *aleatoriamente distribuidos* en un volumen  $V$ , es decir, que la probabilidad de que un dispersor esté en el interior de un volumen diferencial en  $d^3x_j$  alrededor de la posición  $\mathbf{x}_j$  es  $p(\mathbf{x}_j) = d^3x_j/V$ . Supongamos que las posiciones  $\mathbf{x}_j$  son estadísticamente independientes [ $p(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) d^3x_j d^3x_k = p(\mathbf{x}_j) p(\mathbf{x}_k) d^3x_j d^3x_k$ ] y que las amplitudes  $A_j$  satisfacen la siguiente estadística:

$$\langle A_j \rangle = \langle A \rangle \neq 0. \quad (1.16a)$$

$$\langle A_j A_k^* \rangle = \langle A_j \rangle \langle A_k^* \rangle \equiv |\langle A \rangle|^2 \quad j \neq k, \quad (1.16b)$$

$$\langle A_j A_k^* \rangle = \langle |A_j|^2 \rangle \equiv \langle |A|^2 \rangle \quad j = k, \quad (1.16c)$$

donde el promedio se hace sobre un ensemble de sistemas de volumen  $V$ . Al promediar sobre dicho ensemble el modulo cuadrado que aparece en la sección eficaz, Ec. (1.15a), se obtiene lo siguiente:

$$\begin{aligned} \left\langle \left| \sum_{j=1}^N A_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \right|^2 \right\rangle &= \left\langle \sum_{j,k=1}^N A_j A_k^* e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)} \right\rangle \\ &= N \langle |A|^2 \rangle + N(N-1) |\langle A \rangle|^2 \left| \prod_{i=1}^3 \frac{\sin(q_{x_i} L_{x_i}/2)}{q_{x_i} L_{x_i}/2} \right|^2. \end{aligned} \quad (1.17)$$

con  $V = L_x L_y L_z$ . El primer sumando de (1.17) corresponde a los términos  $j = k$ , mientras que el segundo corresponde a los términos  $j \neq k$ . Si el número de dispersores  $N \gg 1$  y se cumplen las siguientes condiciones equivalentes:

$$qd \gg N^{-1/6} \quad \text{ó} \quad qV^{1/3} \gg N^{1/6}, \quad (1.18a)$$

entonces se puede despreciar el segundo sumando de la (1.17) con respecto al primero. En la ecuación (1.18a) hemos denotado la densidad de dispersores como:

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{d^3}. \quad (1.18b)$$

En el caso unidimensional las ecuaciones análogas son:

$$qd \gg N^{-1/2} \quad \text{ó} \quad qL \gg N^{1/2}, \quad (1.19a)$$

$$\frac{N}{L} = \frac{1}{d}. \quad (1.19b)$$

En conclusión, si el número de dispersores  $N \gg 1$  y se cumple la condición (1.18), entonces la sección transversal es igual (en todas direcciones excepto en  $\vartheta \sim 0$ ) a la *suma incoherente* de intensidades de cada dispersor, es decir:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}; \hat{\mathbf{n}}_0, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_0) \right\rangle \simeq \frac{k^4 \langle |A|^2 \rangle N}{(4\pi\epsilon_0 E_0)^2}. \quad (1.20)$$

Los libros de texto como las referencias [30, 31] obtienen esta última conclusión suponiendo dos cosas: i) que el número de dispersores  $N \gg 1$  y ii) que los dispersores están aleatoriamente distribuidos. En estas referencias no se menciona la condición de la ecuación (1.18a), pues ésta se satisface inmediatamente si se cumplen i) y ii).

### 1.3.2. Teoría perturbativa de la dispersión

#### Teoría general

Si el medio por el cual pasa la onda electromagnética es uniforme en sus propiedades electromagnéticas, la onda se propagará sin deflectarse ni perturbarse; sin embargo, si el medio tiene variaciones espaciales y/o temporales en sus propiedades electromagnéticas, la onda se dispersará por lo que parte de su energía se desviará de su curso original. Si las variaciones son “pequeñas” se podrán usar métodos perturbativos para atacar el problema.

Consideremos un medio uniforme e isótropo con permitividad eléctrica  $\epsilon_h$  y permeabilidad magnética  $\mu_h$ ;  $\epsilon_h$  y  $\mu_h$  se suponen independientes de la frecuencia, pero cuando haya dependencia temporal armónica esta restricción puede quitarse. Ahora supongamos que mediante la acción de algún *agente externo* perturbativo, el medio tiene pequeños cambios en su respuesta a los campos aplicados de tal manera que en ciertas regiones del espacio no se satisfacen las relaciones constitutivas:

$$\mathbf{D} \neq \epsilon_h \mathbf{E}, \quad (1.21a)$$

$$\mathbf{B} \neq \mu_h \mathbf{H}. \quad (1.21b)$$

Al considerar las ecuaciones de Maxwell macroscópicas con fuentes:

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (1.22a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad \nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (1.22b)$$

Mediante manipulaciones algebraicas de las ecuaciones (1.22a)-(1.22b) (suponiendo que  $\rho = 0$ ,  $\mathbf{J} = 0$  y que las cantidades homogéneas  $\epsilon_h$  y  $\mu_h$  no dependen de la posición) se obtiene que el vector de desplazamiento eléctrico  $\mathbf{D}$  satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$\nabla^2 \mathbf{D} - \mu_h \epsilon_h \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = -\nabla \times [\nabla \times (\mathbf{D} - \epsilon_h \mathbf{E})] + \epsilon_h \frac{\partial}{\partial t} [\nabla \times (\mathbf{B} - \mu_h \mathbf{H})] \quad (1.23)$$

La ecuación (1.23) tiene la misma estructura que la ecuación (1.1), por lo que podemos usar el método de la función de Green y la condición de frontera descritos en la sección 1.2; haciendo lo anterior se obtiene la ecuación integral de la dispersión electromagnética:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{x}) &= \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \{ \nabla' \times [\nabla' \times (\mathbf{D} - \varepsilon_h \mathbf{E})] + i\omega\varepsilon_h \nabla' \times [\mathbf{B} - \mu_h \mathbf{H}] \}, \end{aligned} \quad (1.24)$$

donde se ha supuesto la dependencia temporal armónica de los campos  $\sim e^{-i\omega t}$  que se omitirá de ahora en adelante. El vector  $\mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x})$  es solución de la ecuación de onda homogénea en ausencia del sistema dispersor

$$(\nabla^2 + k^2) \mathbf{D}^{(0)} = 0, \quad (1.25a)$$

$$\mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}) = D^{(0)} \hat{\varepsilon}_0 e^{ik\hat{\mathbf{n}}_0 \cdot \mathbf{x}}, \quad (1.25b)$$

$$k^2 = \mu_h \varepsilon_h \omega^2. \quad (1.25c)$$

Debe mencionarse que la obtención de la ecuación (1.24) no usó ninguna aproximación con respecto a la longitud de onda de la radiación incidente  $\lambda$ , sólo se supusieron las relaciones de (1.21); por lo tanto, si las relaciones de (1.21) se cumplen en una región limitada del espacio y  $\mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x})$  describe una onda que incide sobre dicha región en la dirección  $\hat{\mathbf{n}}_0$ , entonces lejos de la región de dispersión se tiene que:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) \sim \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}) + \frac{e^{ikr}}{r} \mathbf{f}(\vartheta, \phi), \quad (1.26a)$$

$$\mathbf{f}(\vartheta, \phi) = \frac{k^2}{4\pi} \int d^3x' e^{-ik\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{x}'} \left\{ [\hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{D} - \varepsilon_h \mathbf{E})] \times \hat{\mathbf{n}} - \frac{\omega\varepsilon_h}{k} \hat{\mathbf{n}} \times (\mathbf{B} - \mu_h \mathbf{H}) \right\}, \quad (1.26b)$$

donde  $\mathbf{f}(\vartheta, \phi)$  es la amplitud de dispersión. Para obtener la Ec. (1.26b) se integró por partes, lo cual provocó el cambio del operador  $\nabla' \times$  por el producto vectorial  $\hat{\mathbf{n}} \times$ , donde  $\hat{\mathbf{n}}$  es la dirección de observación de la radiación dispersada.

La estructura del integrando de (1.26b) es similar a la de la Ec. (1.14a) y tiene el mismo significado físico pues la cantidad  $(\mathbf{D} - \varepsilon_h \mathbf{E})$  tiene unidades de momento dipolar eléctrico por unidad de volumen y  $(\mathbf{B} - \mu_h \mathbf{H})$  las de momento dipolar magnético por unidad de volumen, es decir, se puede pensar que la Ec. (1.26b) es la *versión continua* de la Ec. (1.14a) si se hace la siguiente conexión:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{D} - \varepsilon_h \mathbf{E}, \quad (1.27a)$$

$$\mathbf{m} \rightarrow \mathbf{B} - \mu_h \mathbf{H}, \quad (1.27b)$$

$$\frac{1}{c} \rightarrow \frac{\omega\varepsilon_h}{k}; \quad (1.27c)$$

sin embargo, debe mencionarse que la Ec. (1.26b) contiene todos los ordenes multipolares, mientras que la Ec. (1.14a) sólo contiene la aproximación dipolar.

De manera análoga a la ecuación (1.10), se define la sección transversal diferencial de dispersión como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \mathbf{f}(\vartheta, \phi)|^2}{|\mathbf{D}^{(0)}|^2}, \quad (1.28)$$

donde  $\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$  es el vector de polarización de la radiación dispersada.

### Aproximación de Born

Considerando el caso de variaciones espaciales en la respuesta lineal del medio, las ecuaciones constitutivas pueden escribirse de la siguiente manera:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) = [\varepsilon_h + \delta\varepsilon(\mathbf{x})] \mathbf{E}(\mathbf{x}) \Rightarrow \mathbf{D}(\mathbf{x}) - \varepsilon_h \mathbf{E}(\mathbf{x}) = \delta\varepsilon(\mathbf{x}) \mathbf{E}(\mathbf{x}), \quad (1.29a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = [\mu_h + \delta\mu(\mathbf{x})] \mathbf{H}(\mathbf{x}) \Rightarrow \mathbf{B}(\mathbf{x}) - \mu_h \mathbf{H}(\mathbf{x}) = \delta\mu(\mathbf{x}) \mathbf{H}(\mathbf{x}), \quad (1.29b)$$

donde se considera que

$$\frac{\delta\varepsilon(\mathbf{x})}{\varepsilon_h}, \frac{\delta\mu(\mathbf{x})}{\mu_h} \ll 1. \quad (1.30)$$

Si se satisface la condición (1.30), entonces se puede usar la *primera aproximación de Born* que consiste en tomar la siguiente aproximación para las expresiones de los campos de (1.29):

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}) - \varepsilon_h \mathbf{E}(\mathbf{x}) \simeq \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{x})}{\varepsilon_h} \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}), \quad (1.31a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) - \mu_h \mathbf{H}(\mathbf{x}) \simeq \frac{\delta\mu(\mathbf{x})}{\mu_h} \mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{x}); \quad (1.31b)$$

por lo tanto, en *primera aproximación de Born* la amplitud de dispersión, Ec. (1.26b), se puede escribir de la siguiente manera:

$$\mathbf{f}^{(1)}(\vartheta, \phi) = \frac{k^2}{4\pi} \int d^3x' e^{-ik\hat{\mathbf{n}}\cdot\mathbf{x}'} \left\{ \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{x}')}{\varepsilon_h} (\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{D}^{(0)}) \times \hat{\mathbf{n}} - \frac{\delta\mu(\mathbf{x}')}{\mu_h} \hat{\mathbf{n}} \times (\hat{\mathbf{n}}_0 \times \mathbf{D}^{(0)}) \right\}; \quad (1.32)$$

donde hemos utilizado que el campo magnético  $\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{x})$  de una onda plana se relaciona con el correspondiente vector  $\mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x})$  mediante la siguiente expresión:

$$\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{\mu_h}{\varepsilon_h}} \hat{\mathbf{n}}_0 \times \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{x}). \quad (1.33)$$

Con ayuda de las ecuaciones (1.25b) y (1.28), se obtiene que, en primera aproximación de Born, la sección transversal se expresa como:

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega} = \frac{k^4}{16\pi^2} \left| \int d^3x' e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} \left\{ (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{x}')}{\varepsilon_h} + \frac{\delta\mu(\mathbf{x}')}{\mu_h} (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\epsilon}}^*) \cdot (\hat{\mathbf{n}} \times \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) \right\} \right|^2, \quad (1.34)$$

donde  $\mathbf{q}$  es el cambio del vector de onda definido en la ecuación (1.14b). La condición de validez para la primera Aproximación de Born, Ec. (1.30), es independiente de la cantidad  $k$  y sólo depende de las propiedades  $\delta\varepsilon(\mathbf{x})$ ,  $\varepsilon_h$ ,  $\delta\mu(\mathbf{x})$  y  $\mu_h$  del medio dispersor. En contraste, la condición de validez de la primera aproximación de Born en mecánica cuántica puede depender del valor  $k$  [ver ecuación (1.70)].

### Explicación del azul del cielo

La explicación del azul del cielo la trató por primera vez Lord Rayleigh cuyo resultado es que la sección transversal de dispersión es proporcional a  $\lambda^{-4}$  con  $\lambda$  la longitud de onda de la radiación incidente. Esta explicación se basa en el estudio de la dispersión de la luz que producen las moléculas de los gases. Nuestro objetivo será calcular la sección transversal de dispersión total y con ésta obtener el coeficiente de atenuación del haz incidente.

El tratamiento se hará de dos maneras:

i) Un argumento elemental adecuado para un gas ideal diluido de tal manera que las moléculas estén aleatoriamente distribuidas.

ii) Posteriormente se hará un tratamiento basado en las fluctuaciones de la densidad del gas. Dicho tratamiento es válido más en general, es decir, válido no sólo para un gas diluido.

En ambos tratamientos se supondrá que los multipolos magnéticos son despreciables con respecto a los eléctricos, por lo que en la ecuación (1.34) sólo se considerará el término proporcional a  $\delta\varepsilon(\mathbf{x}')/\varepsilon_h$ .

**Argumento elemental.** Considérese un gas cuyas moléculas están distribuidas en posiciones  $\mathbf{x}_j$ . Sobre estas moléculas incide una onda electromagnética plana, la cual les induce un momento dipolar eléctrico  $\mathbf{p}(\mathbf{x}_j) \simeq \varepsilon_0 \gamma_{mol} \mathbf{E}_{inc}(\mathbf{x}_j)$  (con  $\gamma_{mol}$  la polarizabilidad). Al considerar que la *fluctuación* en la permitividad eléctrica se como:

$$\delta\varepsilon(\mathbf{x}) = \varepsilon_0 \sum_j \gamma_{mol} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (1.35)$$

y usarla en la ecuación (1.32) se obtiene:

$$\frac{|\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \mathbf{f}^{(1)}|^2}{|\mathbf{D}^{(0)}|^2} = \frac{k^2}{4\pi} \left| (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) \gamma_{mol} \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \right|^2, \quad (1.36a)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k^4}{16\pi^2} |\gamma_{mol}|^2 |(\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0)|^2 \mathcal{F}(\mathbf{q}), \quad (1.36b)$$

$$\mathcal{F}(\mathbf{q}) = \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \right|^2. \quad (1.36c)$$

Para un gas diluido la polarizabilidad  $\gamma_{mol}$  se relaciona con la permitividad relativa  $\varepsilon_r$  y la densidad de moléculas  $\varrho$  a través de la relación de Clausius-Mossotti:

$$\gamma_{mol} = \frac{3\varepsilon_r - 1}{\varrho\varepsilon_r + 2}, \quad (1.37a)$$

$$\varepsilon_r = \frac{1 + \frac{2}{3}\varrho\gamma_{mol}}{1 - \frac{1}{3}\varrho\gamma_{mol}}. \quad (1.37b)$$

Si el medio es lo suficientemente diluido de tal manera que  $\varrho\gamma_{mol} \ll 1$ , entonces se tiene que:

$$\varepsilon_r \simeq 1 + \varrho\gamma_{mol} \Rightarrow \gamma_{mol} \simeq \frac{1}{\varrho}(\varepsilon_r - 1). \quad (1.38)$$

Como ya se mostró, para una distribución aleatoria de centros dispersores, el promedio sobre el ensemble del factor de estructura, Ec. (1.36c), se reduce a una suma incoherente [ver ecuaciones (1.17)-(1.18)]; por lo tanto, al promediar la ecuación (1.36b) sobre un *ensemble* se obtiene que el promedio de la sección transversal de todo el sistema es proporcional al número de moléculas  $N$  del sistema, es decir,

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle = N \frac{d\sigma_{mol}}{d\Omega}, \quad (1.39a)$$

siendo

$$\frac{d\sigma_{mol}}{d\Omega} = \frac{k^4}{16\pi^2\varrho^2} |\varepsilon_r - 1|^2 |(\hat{\varepsilon}^* \cdot \hat{\varepsilon}_0)|^2. \quad (1.39b)$$

la sección transversal diferencial molecular. Al integrar la ecuación (1.39b) sobre todo el ángulo sólido se obtiene la sección transversal molecular total:

$$\sigma_{mol} \simeq \frac{k^4}{16\pi\varrho^2} |\varepsilon_r - 1|^2 \simeq \frac{2k^4}{3\pi\varrho^2} |n - 1|^2, \quad (1.40)$$

donde  $n$  es índice de refracción y se ha supuesto que cumple con  $|n - 1| \ll 1$ . La sección transversal, Ec. (1.39b), representa la potencia dispersada por molécula por unidad de flujo de energía incidente. En un espesor de gas  $dx$ , la fracción de flujo perdido es  $\varrho\sigma_{mol}dx$ ; por lo tanto, el haz incidente tiene una intensidad  $I(x) = I_0e^{-\alpha x}$ , donde  $I_0$  es la intensidad de la onda incidente y  $\alpha$  es el coeficiente de atenuación definido como:

$$\alpha = \varrho\sigma_{mol} \simeq \frac{2k^4}{3\pi\varrho} |n - 1|^2. \quad (1.41)$$

Los resultados de las Ecs. (1.40)-(1.41), describen la dispersión de Rayleigh, es decir, la dispersión incoherente producida por las moléculas de un gas o por dipolos distribuidos aleatoriamente. Dicha derivación se hizo en el contexto de la dispersión de la luz por la atmósfera, obteniendo una dependencia proporcional a  $k^4$ , lo que significa que en el espectro del visible el color rojo es el menos dispersado, mientras que el azul es el más dispersado.

**Fluctuaciones de la densidad.** Una aproximación más general a la dispersión y a la atenuación de la luz por gases y líquidos considera las fluctuaciones en la densidad y en la permitividad eléctrica.

Pensemos que la dispersión la produce un fluido, el cual se encuentra en el interior de un volumen total  $V$  que dividimos en  $\mathcal{N}$  “celdas pequeñas” (comparadas con la longitud de onda  $\lambda$  de la radiación incidente). Cada celda tiene un número macroscópico de moléculas  $N_j$  y un volumen fijo  $v$  de tal manera que  $V = \mathcal{N}v$ . El número de moléculas  $N_j$  en el interior de la  $j$ -ésima celda no es fijo, pues entre celda y celda hay intercambio de partículas; sin embargo, se puede hablar de un número promedio de partículas  $N_v$  en el interior de cada celda por lo que  $N_j = N_v + \Delta N_j$ , donde  $\Delta N_j$  es la fluctuación de partículas en la  $j$ -ésima celda. La manera en la cual fluctúa el número de moléculas en cada celda dependerá de las propiedades del fluido.

Pensemos en la *permitividad eléctrica local* de la  $j$ -ésima celda de la siguiente forma:

$$\varepsilon_j = \varepsilon_h + \delta\varepsilon_j, \quad (1.42)$$

donde  $\varepsilon_h$  es la permitividad eléctrica promedio, la cual no tiene fluctuaciones y  $\delta\varepsilon_j$  es la variación de la permitividad eléctrica de la  $j$ -ésima celda. Estas variaciones de la permitividad se deben a las fluctuaciones en el número de partículas  $\Delta N_j$  en la  $j$ -ésima celda. La cantidad  $\varepsilon_j$  es resultado de haber tomado un promedio local sobre la  $j$ -ésima celda, de tal manera que en el interior de ésta es válida la siguiente *relación local*:

$$\mathbf{D}(\mathbf{x}_j) = \varepsilon_j \mathbf{E}(\mathbf{x}_j), \quad (1.43)$$

donde  $\mathbf{x}_j$  denota el centro de la  $j$ -ésima celda. La variación de la permitividad eléctrica (en el espectro visible: ver la referencia [32]) de la  $j$ -ésima celda puede escribirse como:

$$\delta\varepsilon_j = \left( \frac{\partial\varepsilon_h}{\partial\rho} \right)_T \frac{\Delta N_j}{v}, \quad (1.44)$$

donde  $\rho$  es la densidad macroscópica del gas. De la relación de Clausius-Mossotti, Ec. (1.37b), se obtiene la derivada parcial que aparece en (1.44), siendo ésta:

$$\left( \frac{\partial\varepsilon_h}{\partial\rho} \right)_T = \frac{1}{3\varepsilon_0\rho} (\varepsilon_h - \varepsilon_0) (\varepsilon_h + 2\varepsilon_0) \Rightarrow \quad (1.45a)$$

$$\delta\varepsilon_j = \varepsilon_0 \frac{(\varepsilon_r - 1)(\varepsilon_r + 2)}{3\rho v} \Delta N_j \Rightarrow \quad (1.45b)$$

$$\frac{\delta\varepsilon_j}{\varepsilon_h} = \frac{\Delta N_j (\varepsilon_r - 1)(\varepsilon_r + 2)}{3\rho v \varepsilon_r}. \quad (1.45c)$$

Ahora queremos calcular la contribución de cada celda a la sección transversal, para ello debemos utilizar una versión discreta de la Ec. (1.34), es decir,

$$\frac{|\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \mathbf{f}^{(1)}|}{|\mathbf{D}^{(0)}|} = \frac{k^2}{4\pi} \left| \int d^3x' e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}'} (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) \frac{\delta\varepsilon(\mathbf{x}')}{\varepsilon_h} \right| \rightarrow \frac{k^2}{4\pi} \left| \sum_j v e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}_j} (\hat{\boldsymbol{\epsilon}}^* \cdot \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_0) \frac{\delta\varepsilon_j}{\varepsilon_h} \right|; \quad (1.46)$$

por lo tanto se tiene:

$$\frac{|\widehat{\epsilon}^* \cdot \mathbf{f}^{(1)}|}{|\mathbf{D}^{(0)}|} = k^2 |(\widehat{\epsilon}^* \cdot \widehat{\epsilon}_0)| \left| \frac{(\epsilon_r - 1)(\epsilon_r + 2)}{12\pi\varrho\epsilon_r} \right| \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \Delta N_j \right| \Rightarrow \quad (1.47a)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = k^4 \frac{|(\widehat{\epsilon}^* \cdot \widehat{\epsilon}_0)|^2}{(12\pi\varrho)^2} \left| \frac{(\epsilon_r - 1)(\epsilon_r + 2)}{\epsilon_r} \right|^2 \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \Delta N_j \right|^2, \quad (1.47b)$$

$$\mathcal{F}'(\mathbf{q}) = \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \Delta N_j \right|^2. \quad (1.47c)$$

La cantidad  $\mathcal{F}'(\mathbf{q})$  de la Ec. (1.47c) es similar al factor de estructura de la Ec. (1.36c). Debemos notar que la ecuación (1.47b) es la sección transversal diferencial que fluctúa, pues todavía no se ha promediado sobre un ensemble por lo que sigue dependiendo de las fluctuaciones  $\Delta N_j$ . Para poder relacionar la Ec. (1.47b) con la sección transversal diferencial macroscópica debe tomarse el promedio sobre un ensemble de la cantidad que aparece en la Ec. (1.47b):

$$\left\langle \left| \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_j} \Delta N_j \right|^2 \right\rangle = \sum_{kj} \langle e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)} \Delta N_j \Delta N_k \rangle. \quad (1.48)$$

Si suponemos que las *correlaciones de las fluctuaciones* en diferentes celdas (producidas por las fuerzas intermoleculares) son importantes a distancias mucho menores que la longitud de onda  $\lambda$  de la radiación incidente, entonces el factor de la exponencial compleja de la Ec. (1.48) puede aproximarse por uno, pues se supuso que  $\lambda$  es mucho mayor que las dimensiones de cada celda; por lo tanto, la sección transversal diferencial macroscópica es:

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega} \right\rangle \simeq k^4 \frac{|(\widehat{\epsilon}^* \cdot \widehat{\epsilon}_0)|^2}{(4\pi\varrho)^2} \left| \frac{(\epsilon_r - 1)(\epsilon_r + 2)}{3\epsilon_r} \right|^2 (\Delta N_v)^2, \quad (1.49a)$$

$$(\Delta N_v)^2 = \sum_{kj} \langle \Delta N_j \Delta N_k \rangle. \quad (1.49b)$$

Al integrar la sección diferencial, Ec. (1.49a), sobre el ángulo sólido se obtiene el factor numérico  $(8\pi/3)$ , por lo que el promedio de la sección transversal total vale:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{k^4}{6\pi\varrho^2} \left| \frac{(\epsilon_r - 1)(\epsilon_r + 2)}{3\epsilon_r} \right|^2 (\Delta N_v)^2. \quad (1.50)$$

Para obtener la sección diferencial total por molécula se divide por el número total de moléculas en el sistema  $N = \varrho V$ , obteniendo así:

$$\sigma_{mol} = \frac{k^4}{6\pi\varrho^2} \left| \frac{(\epsilon_r - 1)(\epsilon_r + 2)}{3\epsilon_r} \right|^2 \frac{(\Delta N_v)^2}{\varrho V}, \quad (1.51)$$

mientras que el coeficiente de atenuación  $\alpha = \varrho\sigma_{mol}$  toma la forma:

$$\alpha = \frac{k^4}{6\pi\rho} \left| \frac{(\varepsilon_r - 1)(\varepsilon_r + 2)}{3\varepsilon_r} \right|^2 \frac{(\Delta N_v)^2}{\rho V}. \quad (1.52)$$

Haciendo uso de la Física Estadística [33], la cantidad  $(\Delta N_v)^2$  se relaciona con la compresibilidad isotérmica  $\beta_T$  del medio:

$$\frac{(\Delta N_v)^2}{\rho V} = \rho k_B T \beta_T, \quad \beta_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T, \quad (1.53)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Usando la expresión (1.53) podemos escribir el coeficiente de atenuación en términos de las cantidades termodinámicas del medio como:

$$\alpha = \frac{1}{6\pi\rho} \left( \frac{\omega}{c} \right)^4 \left| \frac{(\varepsilon_r - 1)(\varepsilon_r + 2)}{3\varepsilon_r} \right|^2 \rho k_B T \beta_T, \quad (1.54)$$

donde hemos escrito  $k = \omega/c$  para evitar confusión con la constante de Boltzmann  $k_B$ . La expresión (1.54) fue presentada por primera vez por Einstein en 1910 y se conoce como la fórmula Einstein-Smoluchowski. Para el caso de un gas diluido  $|\varepsilon_r - 1| \ll 1$ ,  $|\varepsilon_r| \simeq 1$  y  $\rho k_B T \beta_T = 1$ , pues para el gas ideal se tiene que:

$$p = \rho k_B T \quad (1.55)$$

$$\beta_T = -\frac{1}{V} \left( \frac{\partial V}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{p}; \quad (1.56)$$

por lo tanto, para un gas diluido el coeficiente de atenuación se escribe como:

$$\alpha = \frac{k^4}{6\pi\rho} |\varepsilon_r - 1|^2, \quad (1.57)$$

lo cual coincide con el resultado de Rayleigh.

Las dos explicaciones de la dispersión de Rayleigh arriba expuestas merecen algunos comentarios. La teoría general de la dispersión obtiene la ecuación (1.23) partiendo de las ecuaciones de Maxwell macroscópicas, es decir, en el límite continuo donde los campos son cantidades promedio y la permitividad eléctrica es una cantidad macroscópica que no fluctúa [que es justo lo que se permite en la ecuación (1.44)], ni tampoco puede depender de las posiciones de las partículas individuales [como lo supusimos en la ecuación (1.35)]; sin embargo, el argumento elemental es claramente un tratamiento en términos de las ecuaciones de Maxwell microscópicas, mientras que el argumento que se dio en términos de las fluctuaciones de la densidad representa un “promedio parcial y local” sobre los campos. Lo anterior hace sospechar que la ecuación fundamental de la dispersión electromagnética, Ec. (1.23), es válida no sólo a nivel macroscópico sino que también lo es a nivel microscópico. Los dos argumentos de la explicación del azul del cielo presentados aquí se obtuvieron de la referencia [30]; sin embargo, una exposición más formal debería partir del punto de vista de las ecuaciones de Maxwell microscópicas y a partir de éstas obtener las ecuaciones de Maxwell macroscópicas promediando sobre un ensemble arbitrario. Un tratamiento de este estilo lo presentan de Groot y Suttrop [34], en el que obtienen las ecuaciones de Maxwell macroscópicas al promediar las microscópicas sobre un ensemble mecánico estadístico.

La razón por la que se expuso la explicación del azul del cielo en términos de las *fluctuaciones de la densidad* es exhibir la necesidad de tomar el promedio sobre ensemble una vez que obtenida la sección transversal y no a nivel de las amplitudes de los campos, pues de lo contrario no se podría obtener el comportamiento con  $k^4$ , Ec (1.41), de la dispersión de Rayleigh. Como veremos en el Capítulo 4, en el problema de la dispersión producida por guía de ondas desordenada (representada por un potencial aleatorio) es de vital importancia considerar el promedio sobre un ensemble, ya que nuestro interés es estudiar el comportamiento de los valores promedio de observables macroscópicos. Lo anterior se debe a que los observables de interés (amplitudes y coeficientes de transmisión y reflexión) muestran fluctuaciones importantes de muestra a muestra, lo que se debe a las *fluctuaciones en el potencial*.

## 1.4. Dispersión cuántica

Al igual que se hizo para la dispersión electromagnética, aquí se expondrá la dispersión cuántica tridimensional; sin embargo, en el caso cuántico trataremos brevemente el caso tridimensional, ya que el tratamiento es, en esencia, análogo al caso electro-magnético.

### 1.4.1. Dispersión debida a un potencial

El problema de la dispersión cuántica se plantea en términos de una ecuación integral que es completamente equivalente a la ecuación de Schrödinger. Si se define el potencial  $U(\mathbf{x})$  (en unidades de  $k^2 = 2mE/\hbar^2$ ) como:

$$U(\mathbf{x}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{x}), \quad (1.58)$$

entonces la ecuación de Schrödinger se escribe de la siguiente manera:

$$(\nabla^2 + k^2) \Psi(\mathbf{x}) = U(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}). \quad (1.59)$$

La expresión anterior tiene la misma estructura que la ecuación (1.1), por lo que podemos utilizar el método de la función de Green expuesto en la sección y la condición de frontera descritos en la sección 1.2, obteniendo así la ecuación integral de la dispersión cuántica:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}) - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}') d^3x', \quad (1.60)$$

La función representa  $\varphi(\mathbf{x})$  la onda incidente, que es solución de la ecuación de onda homogénea

$$(\nabla^2 + k^2) \varphi(\mathbf{x}) = 0. \quad (1.61a)$$

$$\varphi(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}}, \quad (1.61b)$$

donde  $\mathbf{k}_0$  representa el vector de propagación de la onda incidente.

Suponiendo que el potencial  $U(\mathbf{x})$  es de alcance finito o a lo más tiende a cero más rápidamente que  $1/r$ , entonces el comportamiento asintótico de la ecuación integral (1.60) se escribe de la siguiente manera:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}) \sim e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vartheta, \phi), \quad (1.62a)$$

$$f(\vartheta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}') d^3x', \quad (1.62b)$$

$$\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{n}}, \quad \hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{x}}{r}, \quad (1.62c)$$

donde la amplitud de dispersión  $f(\vartheta, \phi)$  definida en (1.62b) es una cantidad independiente de la coordenada radial  $r$ .

La sección transversal diferencial de dispersión se define en términos de la amplitud de dispersión como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, \phi)|^2. \quad (1.63)$$

### La aproximación de Born

Un método para resolver las ecuaciones integrales es el de aproximaciones sucesivas. En este método la aproximación de orden cero desprecia el segundo término (1.60), el cual involucra una integral sobre la región dispersora; es decir, la aproximación de orden cero es:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+(0)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}}. \quad (1.64)$$

Para obtener la aproximación de primer orden se inserta la aproximación a orden cero, Ec. (1.64), en el lado derecho de la ecuación (1.60) obteniendo así:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+(1)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^{+(0)}(\mathbf{x}') d^3x'. \quad (1.65)$$

Análogamente, para encontrar la aproximación de segundo orden se inserta la aproximación de primer orden, Ec. (1.65), en la ecuación (1.60) obteniendo así:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+(2)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^{+(1)}(\mathbf{x}') d^3x'. \quad (1.66)$$

De esta manera se puede obtener la aproximación a orden  $n$  conociendo la aproximación de orden  $n-1$ , es decir,

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+(n)}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{x}} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} U(\mathbf{x}') \Psi_{\mathbf{k}}^{+(n-1)}(\mathbf{x}') d^3x'. \quad (1.67)$$

Al sustituir la primera aproximación de Born, Ec. (1.65), en la definición de amplitud de dispersión, Ec. (1.62b), se obtiene, en esta aproximación:

$$f^{(1)}(\vartheta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') d^3x', \quad (1.68a)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}, \quad (1.68b)$$

donde el vector  $\mathbf{q}$ , Ec. (1.68b), es el “análogo” cuántico del cambio del vector de onda electromagnético, Ec. (1.14b); en el caso cuántico el vector  $\hbar\mathbf{q}$  recibe el nombre de transferencia de momento.

En la primera aproximación de Born la amplitud de dispersión, Ec. (1.68a), es el elemento de matriz del potencial  $U(\mathbf{x})$  entre una onda libre incidente  $e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{x}'}$  y una saliente  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}$ ; por lo tanto, el potencial  $U(\mathbf{x})$  produce transiciones entre un estado inicial con momento  $\mathbf{k}_0$  a un estado final con momento  $\mathbf{k}$ , pero ambos con la misma energía, pues se está considerando dispersión elástica.

De las ecuaciones (1.68a) y (1.63) se obtiene, en primera aproximación de Born, que la sección transversal diferencial se expresa como:

$$\frac{d\sigma^{(1)}}{d\Omega} = \frac{1}{16\pi^2} \left| \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'} U(\mathbf{x}') d^3x' \right|^2. \quad (1.69)$$

La ecuación (1.69) representa una buena aproximación si el potencial dispersor se puede considerar como una perturbación (ver referencia [35]), lo cual es posible si se cumple una de las dos siguientes condiciones:

$$a^2 \langle U \rangle \ll 1, \quad (1.70a)$$

$$a^2 \langle U \rangle \ll ka, \quad (1.70b)$$

donde  $a$  es el alcance del potencial dispersor y  $\langle U \rangle$  es el valor promedio del potencial dispersor. Los criterios de validez para la primera aproximación de Born, Ec. (1.70), se dan en términos de las propiedades físicas del potencial dispersor, es decir, si el valor promedio del potencial y su alcance satisfacen la ecuación (1.70a), entonces la primera aproximación de Born será válida para toda energía; sin embargo, si la ecuación (1.70a) no se satisface entonces la aproximación sólo será válida para altas energías de tal manera que el valor promedio del potencial  $\langle U \rangle$ , el alcance de éste  $a$  y la energía de la partícula incidente  $E = \hbar^2 k^2 / 2m$  satisfagan la (1.70b). Un caso extremo o de “muy altas energías” se obtiene si  $1/a \ll k$ . Si esta última relación se satisface, entonces los dos casos de la Ec. (1.70) se pueden escribir de la siguiente manera:

$$\langle U \rangle \ll k^2, \quad (1.71)$$

lo cual representa una condición intuitiva para la validez de la Primera Aproximación de Born.

Tanto en la dispersión electromagnética como en la cuántica, la *Primera Aproximación de Born* sólo considera procesos de dispersión simple y no de dispersión múltiple. Para considerar los procesos de dispersión múltiple debemos obtener órdenes superiores

en la serie de Born. La descripción de la dispersión que se haremos en el Capítulo 4, no considera aproximación alguna (en este contexto), ya que considera todos los órdenes de la dispersión múltiple.

# Capítulo 2

## Dispersión cuántica en guías de ondas bidimensionales

### 2.1. Introducción

En el Capítulo 1 se discutió de manera general el problema de la dispersión electromagnética y cuántica en tres dimensiones. En este Capítulo se discutirá, en detalle, la dispersión en una guía de ondas, en la cual todas las direcciones están acotadas excepto una. Por simplicidad nos restringiremos a una guía bidimensional, pero la extensión a una guía de dimensión arbitraria  $D$  se puede hacer fácilmente.

El objetivo del presente Capítulo es establecer las ideas y conceptos generales de la dispersión que produce un sistema dispersor en el interior de una guía de ondas bidimensional. Dicho sistema dispersor estará representado por un potencial bidimensional  $V(x, y)$  arbitrario, por lo que las afirmaciones que hagamos en el presente Capítulo serán generales y directamente aplicables al potencial microscópico que propondremos en el Capítulo 3. La mayoría de estas ideas y conceptos se extrajeron de la referencia [?] con excepción de algunas partes de la sección 2.5 y toda la sección 2.6.

Como se expuso en el Capítulo anterior, el estudio de la dispersión tridimensional se enfoca en obtener la amplitud de dispersión  $f(\vartheta, \phi)$ , Ec. (1.62b). En el caso de la dispersión bidimensional en la guía de ondas, el estudio se enfocará en la obtención de las amplitudes de transmisión  $t$  y reflexión  $r$  (en la dirección de la guía que no está acotada). Las amplitudes  $t$  y  $r$  de la guía de ondas son las cantidades que nos interesa estudiar; por lo tanto, uno de los objetivos del presente Capítulo será obtener la matriz de dispersión  $S$  cuyos elementos de matriz son las amplitudes de transmisión y de reflexión: ver sección 2.5.

En un problema de dispersión como el que nos interesa estudiar, lo usual es abordar el problema con el método de la matriz de dispersión  $S$ , ya que ésta nos dará de manera directa las amplitudes  $t$  y  $r$ ; no obstante lo anterior, el problema de la dispersión también se puede estudiar con el método de la matriz de transferencia  $M$  (ver sección 2.5), la cual está íntimamente relacionada con la matriz de dispersión  $S$ : ver sección 2.5.2. El resultado central de la presente Tesis (ver Capítulo 4) se obtendrá mediante el método

de la matriz de transferencia  $M$ .

Otro aspecto importante en el estudio de la dispersión es la serie de Born, la cual discutimos brevemente en el Capítulo anterior para el caso tridimensional. En la sección 2.6 del presente Capítulo obtendremos la serie de Born para la dispersión en una guía de ondas bidimensional, la cual jugará un papel importante en nuestros tratamientos perturbativos, ya que representará un resultado teórico para la predicción (dentro de los límites de aplicabilidad de la serie) del comportamiento cualitativo y cuantitativo de los resultados de nuestras simulaciones numéricas: ver capítulos 6 y 7.

De ahora en adelante, el trabajo se planteará en el contexto de la mecánica cuántica, es decir, se planteará el problema de la dispersión en términos de la ecuación de Schrödinger. Las ideas pueden extenderse a ondas clásicas: ondas electromagnéticas, elásticas, etc.

## 2.2. Planteamiento del problema

Consideremos una guía de ondas bidimensional de longitud infinita y ancho  $W$ , de tal manera que la dirección longitudinal de ésta coincide con el eje  $x$  y la transversal con el eje  $y$ . Supongamos que en el interior de la guía de ondas se encuentra un sistema dispersor de longitud  $L$  ubicado entre  $x = -L/2$  y  $x = L/2$ , el cual está representado por un potencial bidimensional  $V(x, y)$  arbitrario: ver figura 2.1; además, pensemos que las paredes de la guía, ubicadas en las posiciones  $y_{\text{mín}} = 0$ ,  $y_{\text{máx}} = W$ , se comportan como barreras de potencial infinito o paredes impenetrables; por lo tanto, si en el interior de la guía se propaga una onda, no habrá transmisión a través de las paredes laterales de la guía y todo el flujo se dará en la dirección longitudinal. Debido a la suposición de paredes impenetrables, la solución de la ecuación de Schrödinger  $\Psi(x, y)$  debe satisfacer la siguiente condición de frontera:

$$\Psi(x, 0) = \Psi(x, W) = 0, \quad \forall x, \quad (2.1)$$

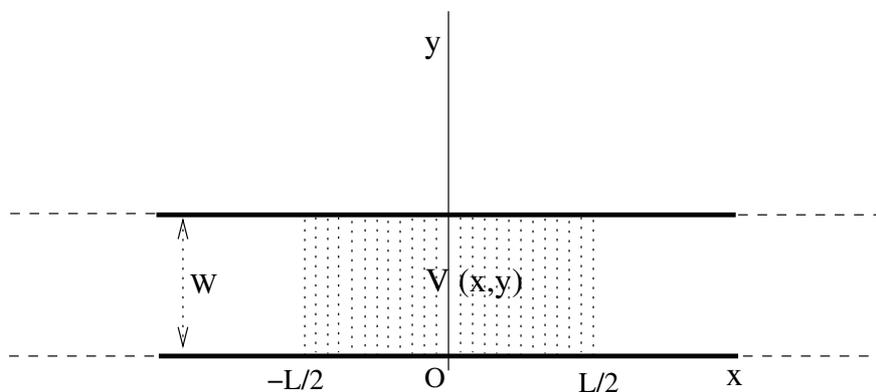


Figura 2.1: Guía de Ondas Bidimensional de ancho  $W$  y longitud infinita. El sistema dispersor de longitud  $L$  se representa mediante el potencial arbitrario  $V(x, y)$ .

Nuestro interés es estudiar la dispersión que este sistema produce cuando una onda incide por la izquierda o por la derecha del potencial, es decir, nos interesa conocer las amplitudes de transmisión y reflexión de las ondas transmitidas y reflejadas así como sus correspondientes intensidades.

Si bien en el presente Capítulo no diremos nada acerca de la dependencia espacial del potencial  $V(x, y)$ , sí se le impondrá a éste que satisfaga la invariancia ante inversiones temporales.

### 2.3. El caso libre

Primero consideremos el caso libre, es decir, consideremos la ecuación de Schrödinger (independiente del tiempo) para el caso  $V(x, y) = 0$ , con una energía  $E$  dada:

$$(E - \hat{H}_0) \Psi(x, y) = 0 \Rightarrow \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \hat{H}_0\right) \Psi(x, y) = 0, \quad (2.2a)$$

donde

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \quad (2.2b)$$

y

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (2.2c)$$

En la ecuación anterior se ha ignorado el spin. La ecuación (2.2a) es separable por lo que la solución  $\Psi(x, y)$  puede escribirse como el producto de una función longitudinal  $\phi(x)$  y una transversal  $\chi(y)$ , es decir,

$$\Psi(x, y) = \phi(x) \chi(y). \quad (2.3)$$

Debido a la separación de variables, Ec. (2.3), y a la condición de frontera, Ec. (2.1), la función transversal  $\chi(y)$  satisface la ecuación diferencial y condición de frontera siguientes:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} + K^2 \right) \chi(y) = 0, \quad (2.4a)$$

$$\chi(0) = \chi(W) = 0; \quad (2.4b)$$

por lo tanto, la función transversal  $\chi(y)$  tiene la siguiente dependencia:

$$\chi(y) = \chi_a(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin K_a y, \quad (2.5a)$$

$$K = K_a = \frac{a\pi}{W}, \quad a \in \mathbb{Z}^+. \quad (2.5b)$$

Los diferentes valores del número entero  $a$  de la Ec. (2.5b) se llaman modos o canales transversales; por lo tanto,  $\chi_a(y)$  y  $K_a$  son la función de onda y número de onda transversal en el canal  $a$ , respectivamente. En términos del número de onda transversal  $K_a$  se define la energía transversal  $\mathcal{E}_a$  como:

$$\mathcal{E}_a = \frac{\hbar^2 K_a^2}{2m} > 0. \quad (2.6)$$

Las funciones  $\chi_a(y)$  forman un conjunto completo de funciones ortonormales en la variable transversal  $y$ , por lo cual el producto interno entre dos de éstas satisface:

$$(\chi_a, \chi_b) = \int_0^W \chi_a(y) \chi_b(y) dy = \delta_{ab}. \quad (2.7)$$

Debemos notar que el número de modos o canales es infinito, ya que cualquier número  $a \in \mathbb{Z}^+$  satisface las relaciones de la ecuación (2.5).

Una vez que se ha discutido lo anterior acerca de la función transversal  $\chi_a(y)$ , entonces la separación de variables Ec. (2.3) se reescribe de la siguiente manera:

$$\Psi_a(x, y) = \phi(x) \chi_a(y). \quad (2.8)$$

Como veremos a continuación, la función longitudinal  $\phi(x)$  también dependerá del canal  $a$ . Al introducir la Ec. (2.8) en la ecuación (2.2), se obtiene la siguiente ecuación diferencial para la función  $\phi(x)$

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_a^2 \right) \phi(x) = 0, \quad (2.9a)$$

donde hemos definido  $k_a^2$  como:

$$k_a^2 = k^2 - K_a^2. \quad (2.9b)$$

**Caso  $k_a^2 > 0$ .** Si la energía total  $E \geq \mathcal{E}_a$ , es decir, si el índice de canal es tal que  $k_a^2 = k^2 - K_a^2 > 0$ , entonces la función de onda longitudinal es una onda plana normalizada de la siguiente manera:

$$\phi(x) = \phi_s(E_a; x) = \frac{e^{isk_a x}}{\sqrt{2\pi\hbar^2 k_a/m}}, \quad (2.10a)$$

$$k_a > 0, \quad (2.10b)$$

donde  $\phi_s(E_a; x)$  y  $k_a$  son la función de onda y número de onda longitudinal respectivamente en el canal  $a$ . La dirección de propagación de la onda  $\phi_s(E_a; x)$  define el valor de  $s$ , el cual toma los valores  $\pm$  siendo  $s = +$  cuando la onda plana viaja de izquierda a derecha y  $s = -$  si la onda viaja de derecha a izquierda. En términos de  $k_a$  se define la energía longitudinal  $E_a$ :

$$E_a = \frac{\hbar^2 k_a^2}{2m}; \quad (2.11)$$

por lo tanto la energía  $E$  y el número de onda  $k$  pueden expresarse como:

$$E = \mathcal{E}_a + E_a, \quad (2.12a)$$

$$k^2 = k_a^2 + K_a^2. \quad (2.12b)$$

Todos los canales  $a$  que satisfacen la condición  $k_a^2 = k^2 - K_a^2 > 0$  se llaman *canales abiertos* o *modos viajeros*; por lo tanto, para un modo viajero o canal abierto la ecuación (2.8) se puede reexpresar de la siguiente manera:

$$\Psi_{s,a}(x, y) = \phi_s(E_a; x) \chi_a(y). \quad (2.13)$$

Para determinar el número de canales abiertos  $N$  se pide que para  $a = N$  el valor  $k_N^2 \geq 0$ , es decir, que se cumpla la siguiente condición:

$$k \geq \frac{N\pi}{W} \Rightarrow N \leq \frac{kW}{\pi} < N + 1; \quad (2.14)$$

por lo tanto, el número de canales abiertos que puede haber en una guía de ondas depende del número de onda  $k$  y del ancho de la guía  $W$ .

**Caso  $k_a^2 < 0$ .** Si por el contrario  $E < \mathcal{E}_a$ , es decir, que  $k_a^2 = k^2 - K_a^2 < 0$ , entonces no hay solución para la función de onda longitudinal, ya que en este caso las soluciones de la ecuación (2.9a) son exponenciales reales, positivas o negativas, las cuales divergen en el intervalo  $x \in (-\infty, \infty)$ .

**Caso  $k_a^2 = 0$ .** El caso particular en el que la energía de incidencia y la geometría de la guía son tales el número de onda  $k$  es igual a uno de los números de onda transversales, se discute brevemente en el Apéndice A. El análisis que ahí se expone considera el caso particular de un potencial delta, considerando dos canales abiertos ( $N = 2$ ) y despreciando los canales cerrados. Este caso particular es suficiente para exhibir el comportamiento de la matriz de dispersión cuando  $k_a^2 = 0$ .

En conclusión, la solución más general de la ecuación de Schrödinger en una guía de ondas vacía, Ec. (2.2a), es una combinación lineal de todos los canales abiertos en ambas direcciones de propagación:

$$\Psi(x, y) = \sum_s \sum_{b=1}^N A_{b,s} \phi_s(E_b; x) \chi_b(y). \quad (2.15)$$

## 2.4. El problema de la dispersión

Ahora consideremos la ecuación de Schrödinger con un potencial  $V(x, y)$ , el cual es diferente de cero sólo en la región  $x \in [-L/2, L/2]$  y  $y \in [0, W]$  y cero fuera de dicha región. Por lo tanto, en el interior de la guía de ondas la Ecuación de Schrödinger es:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2 \right) \Psi(x, y) = U(x, y) \Psi(x, y), \quad (2.16a)$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (2.16b)$$

$$U(x, y) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x, y). \quad (2.16c)$$

La función de onda  $\Psi(x, y)$  sigue satisfaciendo las condiciones de frontera (2.1), por lo que la solución más general en el interior de la guía de ondas se escribe como la siguiente combinación lineal:

$$\Psi(x, y) = \sum_{b=1}^{\infty} [\psi(x)]_b \chi_b(y), \quad (2.17)$$

donde las funciones  $[\psi(x)]_b$  ya no son las funciones de la Ec. (2.10a). La suma en la Ec. (2.17) se hace sobre todos los canales  $b$  incluyendo los canales que no satisfacen la condición  $E \geq \mathcal{E}_b$ . Al introducir la Ec. (2.17) en la Ec. (2.16a), tomar el producto interno con la función  $\chi_a(y)$  y definir el elemento de matriz del potencial  $U_{ab}(x)$  como:

$$U_{ab}(x) = \int_0^W \chi_a(y) U(x, y) \chi_b(y) dy, \quad (2.18)$$

se obtienen el siguiente sistema de ecuaciones acopladas para las funciones  $[\psi(x)]_a$ :

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 - K_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} U_{ab}(x) [\psi(x)]_b. \quad (2.19)$$

Si consideramos la región en la que el potencial de dispersión es cero, entonces las componentes  $[\psi(x)]_a$  satisfacen las ecuaciones homogéneas desacopladas:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2 - K_a^2 \right) [\psi(x)]_a = 0, \quad |x| > L/2. \quad (2.20)$$

Como ya mencionamos, si la diferencia  $k_a^2 = k^2 - K_a^2 > 0$  ( $k_a > 0$ ), se dice que el índice  $a$  corresponde a un *canal abierto* o *modo viajero*, es decir,  $1 \leq a \leq N$  y que  $k_a$  es el número de onda longitudinal. Por otro lado, si la diferencia  $k_a^2 = k^2 - K_a^2 < 0$  con  $k_a = i\kappa_a$  ( $\kappa_a > 0$ ), se dice que el índice corresponde a un *canal cerrado* o *modo evanescente*, siendo el número de canales cerrados infinito, ya que los índices de canales cerrados satisfacen la relación  $a \geq N + 1$ . En conclusión, si consideramos la región  $|x| > L/2$  y en la ecuación (2.20) el índice  $a$  representa un canal abierto, entonces la función  $[\psi(x)]_a$  es una combinación lineal (suma sobre  $s = \pm$ ) de las funciones de onda de la ecuación (2.10a), de lo contrario, si el índice de canal  $a$  representa un canal cerrado, entonces la función  $[\psi(x)]_a$  será proporcional a la función de onda longitudinal evanescente definida como:

$$\phi_s(-\epsilon_a; x) = e^{-i\pi/4} \frac{e^{-s\kappa_a x}}{\sqrt{2\pi\hbar^2\kappa_a/m}}, \quad (2.21a)$$

siendo  $\kappa_a (> 0)$  el factor de atenuación longitudinal y  $\epsilon_a$  la energía longitudinal, definidas respectivamente como:

$$\kappa_a^2 = K_a^2 - k^2, \quad (2.21b)$$

$$\epsilon_a = \frac{\hbar^2 \kappa_a^2}{2m}, \quad (2.21c)$$

Al igual que para los canales abiertos,  $s$  toma los valores  $\pm$ , siendo  $s = +$  a la derecha del sistema, es decir, para  $x > L/2$  y  $s = -$  a la izquierda del sistema, es decir, para  $x < -L/2$ : en ambos casos la función de onda longitudinal decrece conforme los valores de  $x$  se alejan de la región donde el potencial es diferente de cero.

La función  $\phi_s(-\epsilon_a; x)$ , Ec.(2.21a), es la continuación analítica de la onda plana, Ec.(2.10a), cuando se considera

$$k_a \rightarrow i\kappa_a, \quad (2.22a)$$

$$\sqrt{k_a} \rightarrow e^{i\pi/4} \sqrt{\kappa_a}. \quad (2.22b)$$

Esta continuación analítica corresponde al corte ramal, en el plano complejo  $k$ , a lo largo del eje real positivo desde 0 a  $\infty$  y considerando la primera hoja de Riemann.

En conclusión, para los canales cerrados  $a \geq N + 1$ , entonces (2.8) puede escribirse de la siguiente manera:

$$\Psi_{s,a}(x, y) = \phi_s(-\epsilon_a; x) \chi_a(y). \quad (2.23)$$

Una vez definidos los canales cerrados se puede reescribir el conjunto de ecuaciones acopladas de la ecuación (2.19) como:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} U_{ab}(x) [\psi(x)]_b, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.24a)$$

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \kappa_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} U_{ab}(x) [\psi(x)]_b, \quad a > N, \quad (2.24b)$$

para canales abiertos y cerrados, respectivamente. Las soluciones para las funciones de onda longitudinales  $[\psi(x)]_a$  deberán tener el siguiente comportamiento asintótico cuando  $|x| \rightarrow \infty$ :

$$[\psi(x)]_a \sim A_a \phi_+(E_a, x) + B_a \phi_-(E_a, x) \quad (2.25a)$$

si  $a$  es un canal abierto y

$$[\psi(x)]_a \sim A_a \phi_+(-\epsilon_a, x) \quad x > L/2 \quad (2.25b)$$

$$[\psi(x)]_a \sim B_a \phi_-(-\epsilon_a, x) \quad x < -L/2 \quad (2.25c)$$

si  $a$  es un canal cerrado; por lo tanto, asintóticamente, sólo contribuyen los canales abiertos ya que la contribución de los canales cerrados decrece exponencialmente.

### 2.4.1. Ecuaciones de Lippmann-Schwinger acopladas

Para resolver el sistema de ecuaciones acopladas (2.24) debemos imponer las condiciones de frontera apropiadas, de tal manera que las funciones longitudinales  $[\psi(x)]_a$  representen un proceso de dispersión; es decir, si la onda incidente es una onda plana en el canal abierto  $a_0$ , entonces las funciones de onda longitudinales  $[\psi(x)]_a$  tendrán, dependiendo el caso, la siguiente estructura:

- si  $a = a_0$ , entonces  $[\psi(x)]_a$  será la onda plana en el canal abierto  $a_0$  más una onda saliente.
- si  $1 \leq a \leq N$ , pero  $a \neq a_0$ , entonces  $[\psi(x)]_a$  será una onda saliente.
- si  $a > N$ , entonces  $[\psi(x)]_a$  será una onda que decrece exponencialmente conforme  $|x| \rightarrow \infty$ .

Al igual que en el caso de la dispersión tridimensional, [ver sección 1.4.1, ecuaciones (1.59) y (1.60)], podemos aplicar el método de la función de Green al sistema de ecuaciones (2.24). De esta manera podremos reemplazar el conjunto de ecuaciones diferenciales por un conjunto de ecuaciones integrales para las funciones de onda longitudinales  $[\psi(x)]_a$ . Las funciones de Green que necesitamos son las siguientes [10, ver ecuaciones (3.27) y (3.29)]:

$$g_0^{(\pm)}(E_a; x - x') = \pm \frac{e^{\pm ik_a |x - x'|}}{2ik_a}, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.26a)$$

$$g_0^{(\pm)}(-\epsilon_a; x - x') = -\frac{e^{-\kappa_a |x - x'|}}{2\kappa_a}, \quad a > N, \quad (2.26b)$$

para canales abiertos y cerrados, respectivamente. Al igual que en la sección 1.2, Ec. (1.5a), los signos + y - que aparecen en las funciones  $g_0^{(\pm)}(E_a; x - x')$  y  $g_0^{(\pm)}(-\epsilon_a; x - x')$  determinan si se trata de la función de Green saliente y entrante, respectivamente. Debido a las condiciones de frontera que estamos considerando, la función de Green con la que debemos trabajar es la de ondas salientes, es decir:  $g_0^{(+)}(E_a; x - x')$ ; por lo tanto, la función de onda total, Ec. (2.17), puede escribirse explícitamente al especificar la dirección de propagación  $s = \pm$  de la onda incidente por el canal abierto  $a_0$  y con energía  $E$ ; es decir:

$$\Psi_{s,a_0}^{(+)}(E; x, y) = \sum_{b=1}^{\infty} [\psi_{sa_0}^{(+)}(E; x)]_b \chi_b(y), \quad (2.27)$$

siendo las funciones longitudinales  $[\psi_{sa_0}^{(+)}(E; x)]_b$  las respectivas soluciones del conjunto de ecuaciones (2.24).

Utilizando el método de la función de Green, podemos reemplazar por el sistema de ecuaciones diferenciales, Ec. (2.24), por el siguiente sistema de ecuaciones integrales:

$$\begin{aligned}
 [\psi_{sa_0}^{(+)}(E, x)]_a &= \phi_s(E_a; x) \delta_{aa_0} \\
 &+ \sum_{b=1}^{\infty} \int g_0^{(+)}(E_a; x - x') U_{ab}(x') [\psi_{sa_0}^{(+)}(E, x')]_b dx', \quad (2.28a)
 \end{aligned}$$

$$[\psi_{sa_0}^{(+)}(E, x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} \int g_0^{(+)}(-\epsilon_a; x - x') U_{ab}(x') [\psi_{sa_0}^{(+)}(E, x')]_b dx', \quad (2.28b)$$

para canales abiertos y cerrados, respectivamente. El conjunto de ecuaciones (2.28a) y (2.28b) representa el análogo para guías de onda bidimensionales de la ecuación tridimensional de Lippmann-Schwinger: Ec. (1.4).

El planteamiento del problema en términos de un conjunto de ecuaciones integrales acopladas (2.28a) y (2.28b) puede parecer más complicado; sin embargo, como veremos en las siguientes secciones, este planteamiento resulta ser ventajoso, ya que permite obtener las expresiones de las cantidades de interés: las amplitudes de transmisión y reflexión.

### 2.4.2. El comportamiento asintótico de las funciones de onda: las amplitudes de reflexión y transmisión

Para los propósitos del estudio de la dispersión, nos interesa la solución de las funciones de onda longitudinales en la “*región del campo lejano*”, es decir, en las regiones de la guía donde el potencial  $U(x, y) = 0$ . Lo anterior sucede para valores de  $x$  tales que  $|x| > L/2$ . Es en este momento que podremos mostrar la relevancia del planteamiento del problema en términos de las ecuaciones de Lippmann-Schwinger, Ec. (2.28a) y (2.28b), ya que las funciones de onda longitudinales en la región en la que  $U_{ab}(x) = 0$ , pueden obtenerse fácilmente de las ecuaciones (2.28a) y (2.28b). Lo anterior se debe a que los argumentos de las exponenciales de las funciones de Green de las ecuaciones (2.28a) y (2.28b) se simplifican.

Las regiones en las que  $U_{ab}(x) = 0$  son:  $x < -L/2$  y  $x > L/2$ .

- Si  $x < -L/2 \leq x'$ , entonces las funciones de Green se escriben como:

$$g_0^{(+)}(E_a; x - x') = \frac{e^{ik_a|x-x'|}}{2ik_a} = \frac{e^{-ik_ax} e^{ik_ax'}}{2ik_a}, \quad (2.29a)$$

$$g_0^{(+)}(-\epsilon_a; x - x') = -\frac{e^{-\kappa_a|x-x'|}}{2\kappa_a} = -\frac{e^{\kappa_ax} e^{-\kappa_ax'}}{2\kappa_a}. \quad (2.29b)$$

- Si  $x' \leq L/2 < x$ , entonces las funciones de Green se escriben como:

$$g_0^{(+)}(E_a; x - x') = \frac{e^{ik_a|x-x'|}}{2ik_a} = \frac{e^{ik_ax} e^{-ik_ax'}}{2ik_a}, \quad (2.30a)$$

$$g_0^{(+)}(-\epsilon_a; x - x') = -\frac{e^{-\kappa_a|x-x'|}}{2\kappa_a} = -\frac{e^{-\kappa_ax} e^{\kappa_ax'}}{2\kappa_a}. \quad (2.30b)$$

En el comportamiento asintótico sólo los canales abiertos contribuyen a la función de onda, ya que la contribución de los canales cerrados decrece exponencialmente.

Primero estudiaremos el comportamiento asintótico considerando que se incide de izquierda a derecha, es decir, el caso con  $s = +$ .

### Comportamiento asintótico para $x < -L/2$ con $s = +$

En este caso nos interesa la función de onda para valores de  $x$  tales que  $x < -L/2$  cuando se incide de izquierda a derecha en el canal abierto  $a_0$ ; por lo tanto, al utilizar las ecuaciones (2.29a) y (2.29b) podemos escribir las ecuaciones (2.28a) y (2.28b) de la siguiente manera:

$$\left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = \phi_+(E_a; x) \delta_{aa_0} + r_{aa_0} \phi_-(E_a; x), \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.31a)$$

$$\left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = r_{aa_0} \phi_-(-\epsilon_a; x), \quad a > N, \quad (2.31b)$$

donde las cantidades  $r_{aa_0}$  son las amplitudes de reflexión en el canal  $a$  (abierto o cerrado) cuando se incide de izquierda a derecha en el canal abierto  $a_0$ . Las expresiones para las amplitudes de reflexión  $r_{aa_0}$  son las siguientes:

$$r_{aa_0} = -2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_+(E_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.32a)$$

si  $a$  es un canal abierto y

$$r_{aa_0} = -2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_+(-\epsilon_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad a > N, \quad (2.32b)$$

si  $a$  es un canal cerrado.

### Comportamiento asintótico para $x > L/2$ y $s = +$

Ahora busquemos la función de onda para valores de  $x$  tales que  $x > L/2$  cuando se incide de izquierda a derecha en el canal abierto  $a_0$ ; por lo tanto, al utilizar las ecuaciones (2.30a) y (2.30b) podemos escribir las ecuaciones (2.28a) y (2.28b) de la siguiente manera:

$$\left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = t_{aa_0} \phi_+(E_a; x), \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.33a)$$

$$\left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = t_{aa_0} \phi_+(-\epsilon_a; x), \quad a > N, \quad (2.33b)$$

donde las cantidades  $t_{aa_0}$  son las amplitudes de transmisión en el canal  $a$  (abierto o cerrado) cuando se incide de izquierda a derecha en el canal abierto  $a_0$ . Las expresiones para las amplitudes de reflexión  $t_{aa_0}$  son las siguientes:

$$t_{aa_0} = \delta_{aa_0} - 2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_-(E_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.34a)$$

si  $a$  es un canal abierto y

$$t_{aa_0} = -2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_-(-\epsilon_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad a > N. \quad (2.34b)$$

si  $a$  es un canal cerrado.

De manera análoga, consideremos que la incidencia se da de derecha a izquierda, es decir, el caso con  $s = -$ .

### Comportamiento asintótico para $x > L/2$ y $s = -$

En este caso nos interesa la función de onda para valores de  $x$  tales que  $x > L/2$  cuando se incide de derecha a izquierda en el canal abierto  $a_0$ ; por lo tanto, al utilizar las ecuaciones (2.30a) y (2.30b) podemos escribir las ecuaciones (2.28a) y (2.28b) de la siguiente manera:

$$\left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = \phi_-(E_a; x) \delta_{aa_0} + r'_{aa_0} \phi_+(E_a; x) \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.35a)$$

$$\left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = r'_{aa_0} \phi_+(-\epsilon_a; x), \quad a > N, \quad (2.35b)$$

donde las cantidades  $r'_{aa_0}$  son las amplitudes de reflexión en el canal  $a$  (abierto o cerrado) cuando se incide de derecha a izquierda en el canal abierto  $a_0$ . Las expresiones para las amplitudes de reflexión  $r'_{aa_0}$  son las siguientes:

$$r'_{aa_0} = -2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_-(E_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.36a)$$

si  $a$  es un canal abierto y

$$r'_{aa_0} = -2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_-(-\epsilon_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad a > N, \quad (2.36b)$$

si  $a$  es un canal cerrado.

### Comportamiento asintótico para $x < -L/2$ y $s = -$

Por último determinemos la función de onda para valores de  $x$  tales que  $x < -L/2$  cuando se incide de derecha a izquierda en el canal abierto  $a_0$ ; por lo tanto, al utilizar

las ecuaciones (2.29a) y (2.29b) podemos escribir las ecuaciones (2.28a) y (2.28b) de la siguiente manera:

$$\left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = t'_{aa_0} \phi_-(E_a; x), \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.37a)$$

$$\left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x) \right]_a = t'_{aa_0} \phi_-(-\epsilon_a; x), \quad a > N, \quad (2.37b)$$

donde las cantidades  $t'_{aa_0}$  son las amplitudes de transmisión en el canal  $a$  (abierto o cerrado) cuando se incide de derecha a izquierda en el canal abierto  $a_0$ . Las expresiones para las amplitudes de transmisión  $t'_{aa_0}$  son las siguientes:

$$t'_{aa_0} = \delta_{aa_0} - 2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_+(E_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad 1 \leq a \leq N, \quad (2.38a)$$

si  $a$  es un canal abierto y

$$t'_{aa_0} = -2\pi i \sum_{b=1}^{\infty} \int \phi_+(-\epsilon_a; x') \frac{\hbar^2 U_{ab}(x')}{2m} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x') \right]_b dx', \quad a > N. \quad (2.38b)$$

si  $a$  es un canal cerrado.

### La solución más general y su comportamiento asintótico

En toda la sección anterior supusimos que la onda incidente era una onda plana en alguno de los canales abiertos  $a_0$ ; sin embargo, debido a la linealidad de la ecuación de Schrödinger, la solución más general es aquélla en la que la onda incidente  $\Psi_{in}(x, y)$  es una combinación lineal de las ondas planas de todos los canales abiertos que acepta la guía (cada una multiplicada por una amplitud de incidencia); además, puede ser que de manera simultánea se incida por la izquierda y por la derecha; por lo tanto, la onda que incide por la izquierda deberá ser la combinación lineal:

$$\Psi_{in}^{(1)}(x, y) = \sum_{a_0=1}^N a_{a_0}^{(1)} \phi_+(E_{a_0}; x) \chi_{a_0}(y), \quad x < -L/2, \quad (2.39a)$$

mientras que la onda por la derecha deberá ser la combinación lineal:

$$\Psi_{in}^{(2)}(x, y) = \sum_{a_0=1}^N b_{a_0}^{(2)} \phi_-(E_{a_0}; x) \chi_{a_0}(y), \quad x > L/2, \quad (2.39b)$$

En el presente trabajo adoptaremos la siguiente convención para denotar las amplitudes de las ondas:

- Las amplitudes de las ondas que viajan o se atenúan de izquierda a derecha se denotan por el símbolo  $a_b^{(1,2)}$  donde  $b$  denota el índice de canal (abierto o cerrado) y los números 1 y 2 especifican si la onda está del lado derecho o izquierdo del potencial.

- Las amplitudes de las ondas que viajan o se atenúan de derecha a izquierda se denotan por el símbolo  $b_b^{(1,2)}$  donde  $b$  denota el índice de canal (abierto o cerrado) y los números 1 y 2 especifican si la onda está del lado derecho o izquierdo del potencial.

Esta notación difiere de la convención estándar en la que las ondas incidentes se denotan por  $a_{a_0}^{(1)}$  y  $a_{a_0}^{(2)}$  mientras que las ondas salientes se denotan por  $b_b^{(1)}$  y  $b_b^{(2)}$  (con  $b$  un índice de canal abierto o cerrado). La razón por la cual utilizaremos la convención definida arriba se debe a que ésta es muy cómoda para describir la dispersión en términos de la matriz de transferencia (ver sección 2.5).

Por otro lado, la solución general de la ecuación de Schrödinger debe tener la estructura de la ecuación (2.17). En el caso en que la incidencia se realiza en uno de los canales abiertos, la solución de la ecuación de Schrödinger, Ec. (2.17), toma la estructura de la ecuación (2.27) con  $s = +$  si la incidencia se da por la izquierda, o con  $s = -$  si la incidencia se da por la derecha. Si ahora consideramos que la incidencia se da en todos los canales abiertos tanto por la izquierda como por la derecha, entonces la solución más general debe escribirse como una combinación lineal de las funciones definidas en la ecuación (2.27) con  $s = +$ :

$$\sum_{a_0=1}^N a_{a_0}^{(1)} \Psi_{+,a_0}^{(+)}(E; x, y) = \sum_{b=1}^{\infty} \left\{ \sum_{a_0=1}^N a_{a_0}^{(1)} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b \right\} \chi_b(y), \quad (2.40a)$$

más una segunda combinación lineal con  $s = -$ :

$$\sum_{a_0=1}^N b_{a_0}^{(2)} \Psi_{-,a_0}^{(+)}(E; x, y) = \sum_{b=1}^{\infty} \left\{ \sum_{a_0=1}^N b_{a_0}^{(2)} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b \right\} \chi_b(y). \quad (2.40b)$$

Al sumar las ecuaciones (2.40a) y (2.40b), obtenemos la solución más general:

$$\Psi(x, y) = \sum_{b=1}^{\infty} \sum_{a_0=1}^N \left\{ a_{a_0}^{(1)} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b + b_{a_0}^{(2)} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b \right\} \chi_b(y), \quad (2.41a)$$

que al compararla con la solución más general, Ec. (2.17), obtenemos que la función longitudinal más general para  $[\psi(x)]_b$  se escribe de la siguiente forma:

$$[\psi(x)]_b = \sum_{a_0=1}^N \left\{ a_{a_0}^{(1)} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E, x) \right]_b + b_{a_0}^{(2)} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E, x) \right]_b \right\}, \quad b = 1, 2, \dots, N, \dots \quad (2.41b)$$

Las cantidades  $a_{a_0}^{(1)}$  y  $b_{a_0}^{(2)}$  representan las amplitudes de las ondas planas de canales abiertos con las que se incide por la izquierda y por la derecha, respectivamente.

### Comportamiento asintótico

Con ayuda de los desarrollos asintóticos de las funciones  $[\psi_{\pm a_0}^{(+)}(E, x)]_b$  que obtuvimos en la sección 2.4.2, podemos analizar el comportamiento asintótico de las funciones  $[\psi(x)]_b$  definidas en la ecuación (2.41b).

**La región  $x < -L/2$ .** Para obtener el desarrollo asintótico de las funciones  $[\psi(x)]_b$  cuando  $x < -L/2$  debemos introducir en la ecuación (2.41b) las ecuaciones (2.31a) y (2.37a), si  $b$  es un canal abierto, o las ecuaciones (2.31b) y (2.37b), si  $b$  es un canal cerrado. Al hacer lo anterior obtenemos las siguientes expresiones:

$$[\psi(x)]_b = a_b^{(1)} \phi_+(E_b; x) + b_b^{(1)} \phi_-(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.42a)$$

si  $b$  es un canal abierto y

$$[\psi(x)]_b = b_b^{(1)} \phi_-(-\epsilon_b; x), \quad b > N \quad (2.42b)$$

si  $b$  es un canal cerrado. En las ecuaciones (2.42a) y (2.42b) hemos definido las amplitudes de onda saliente  $b_b^{(1)}$  como:

$$b_b^{(1)} = \sum_{a_0=1}^N [r_{ba_0} a_{a_0}^{(1)} + t'_{ba_0} b_{a_0}^{(2)}], \quad (2.42c)$$

donde  $b$  puede ser un índice de canal abierto o cerrado.

**La región  $x > L/2$ .** Para obtener el desarrollo asintótico de las funciones  $[\psi(x)]_b$  cuando  $x > L/2$  debemos introducir en la ecuación (2.41b) las ecuaciones (2.33a) y (2.35a), si  $b$  es un canal abierto, o las ecuaciones (2.33b) y (2.35b), si  $b$  es un canal cerrado. Al hacer lo anterior obtenemos las siguientes expresiones:

$$[\psi(x)]_b = b_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) + a_b^{(2)} \phi_+(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.43a)$$

si  $b$  es un canal abierto y

$$[\psi(x)]_b = a_b^{(2)} \phi_+(-\epsilon_a; x), \quad b > N, \quad (2.43b)$$

si  $b$  es un canal cerrado. En las ecuaciones (2.42a) y (2.42b) hemos definido las amplitudes de onda saliente  $a_b^{(2)}$  como:

$$a_b^{(2)} = \sum_{a_0=1}^N [t_{ba_0} a_{a_0}^{(1)} + r'_{ba_0} b_{a_0}^{(2)}] \quad (2.43c)$$

donde  $b$  puede ser un índice de canal abierto o cerrado.

Al introducir los desarrollos asintóticos para  $x < -L/2$ , Ecs. (2.42a)-(2.42b), y  $x > L/2$ , Ecs. (2.43a)-(2.43b) en la solución general de la ecuación de Schrödinger, Ec. (2.17), obtenemos:

$$\Psi^{(1)}(x, y) = \Psi_{in}^{(1)}(x, y) + \Psi_{out}^{(1)}(x, y), \quad x < -L/2, \quad (2.44a)$$

$$\Psi^{(2)}(x, y) = \Psi_{in}^{(2)}(x, y) + \Psi_{out}^{(2)}(x, y), \quad x > L/2, \quad (2.44b)$$

donde las funciones  $\Psi_{in}^{(1)}(x, y)$  y  $\Psi_{in}^{(2)}(x, y)$  son las funciones de onda incidentes (por la izquierda y por la derecha, respectivamente) definidas en la ecuación (2.39). Las funciones de onda  $\Psi_{out}^{(1)}(x, y)$  y  $\Psi_{out}^{(2)}(x, y)$  son las ondas dispersadas que están dadas por las siguientes expresiones:

$$\Psi_{out}^{(1)}(x, y) = \sum_{b=1}^N b_b^{(1)} \phi_-(E_b; x) \chi_b(y) + \sum_{b=N+1}^{\infty} b_b^{(1)} \phi_-(\epsilon_b; x) \chi_b(y), \quad (2.44c)$$

para  $x < -L/2$  y

$$\Psi_{out}^{(2)}(x, y) = \sum_{b=1}^N a_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) \chi_b(y) + \sum_{b=N+1}^{\infty} a_b^{(2)} \phi_-(\epsilon_b; x) \chi_b(y), \quad (2.44d)$$

para  $x > L/2$ . En las ecuaciones (2.44c)-(2.44d) se observa, explícitamente, que las funciones de onda dispersadas tienen contribuciones tanto de las ondas viajeras de canales abiertos como de las ondas evanescentes de canales cerrados, pero estas últimas decrecen exponencialmente; por lo tanto, cuando  $|x| \rightarrow \infty$  sólo contribuyen los canales abiertos.

Como veremos en la sección 2.5, será de gran ayuda agrupar todas las amplitudes de las ondas incidentes de canales abiertos, las salientes de canales abiertos y las “salientes” de canales cerrados en los siguientes vectores:

- $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$  denotan los vectores cuyas componentes son las amplitudes de las ondas *incidentes* de canales abiertos, por la izquierda y por la derecha, respectivamente:

$$a_P^{(1)} = \begin{pmatrix} a_1^{(1)} \\ \vdots \\ a_N^{(1)} \end{pmatrix}, \quad b_P^{(2)} = \begin{pmatrix} b_1^{(2)} \\ \vdots \\ b_N^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.45a)$$

- $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$  denotan los vectores cuyas componentes son las amplitudes de las ondas *salientes* de canales abiertos, a la izquierda y a la derecha, respectivamente:

$$b_P^{(1)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ \vdots \\ b_N^{(1)} \end{pmatrix}, \quad a_P^{(2)} = \begin{pmatrix} a_1^{(2)} \\ \vdots \\ a_N^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.45b)$$

- $b_Q^{(1)}$  y  $a_Q^{(2)}$  denotan los vectores cuyas componentes son las amplitudes de las ondas “*salientes*” de canales cerrados, a la izquierda y a la derecha, respectivamente:

$$b_Q^{(1)} = \begin{pmatrix} b_{N+1}^{(1)} \\ \vdots \\ b_{N+N'}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad a_Q^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{N+1}^{(2)} \\ \vdots \\ a_{N+N'}^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.45c)$$

donde  $N'$  denota el número total de canales cerrados, el cual es infinito, por lo que los vectores  $b_Q^{(1)}$  y  $a_Q^{(2)}$  tienen un número infinito de componentes. Los vectores definidos en la ecuación (2.45) se ilustran en la figura 2.2

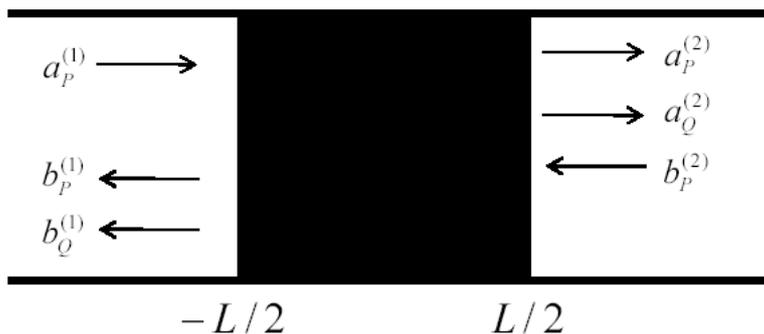


Figura 2.2: Dispersión producida por un potencial. Las ondas incidentes sólo pueden ser ondas planas viajeras de canales abiertos mientras que las salientes son ondas viajeras en los canales abiertos y ondas evanescentes en los canales cerrados.

## 2.5. Las matrices de dispersión y transferencia

### 2.5.1. Las matrices *reducidas*

#### La matriz de dispersión reducida

De las ecuaciones (2.42c) y (2.43c) se observa que las amplitudes de las ondas dispersadas  $b_b^{(1)}$  y  $a_b^{(2)}$  están relacionadas con las amplitudes de las ondas incidentes  $a_{a_0}^{(1)}$  y  $b_{a_0}^{(2)}$  a través de las amplitudes de transmisión  $t_{ba_0}$ ,  $t'_{ba_0}$  y de reflexión  $r_{ba_0}$  y  $r'_{ba_0}$ , donde  $b$  puede ser un índice de canal abierto o cerrado. Dichas ecuaciones se pueden expresar como relaciones matriciales utilizamos los vectores definidos en la ecuación (2.45) y si definimos las siguientes matrices:

- Las cantidades  $t_{PP}$ ,  $t'_{PP}$ ,  $r_{PP}$  y  $r'_{PP}$  denotan las matrices de transmisión y reflexión de *abierto a abierto*, cuyos elementos de matriz son las cantidades  $t_{ba_0}$ ,  $t'_{ba_0}$ ,  $r_{ba_0}$  y  $r'_{ba_0}$  donde  $1 \leq a_0 \leq N$  y  $1 \leq b \leq N$ ; por lo tanto, cada una de estas matrices tiene  $N \times N$  elementos, es decir:

$$t_{PP} = \begin{pmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{N1} & \cdots & t_{NN} \end{pmatrix}, \quad t'_{PP} = \begin{pmatrix} t'_{11} & \cdots & t'_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t'_{N1} & \cdots & t'_{NN} \end{pmatrix}, \quad (2.46a)$$

$$r_{PP} = \begin{pmatrix} r_{11} & \cdots & r_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{N1} & \cdots & r_{NN} \end{pmatrix}, \quad r'_{PP} = \begin{pmatrix} r'_{11} & \cdots & r'_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ r'_{N1} & \cdots & r'_{NN} \end{pmatrix}. \quad (2.46b)$$

Estas matrices describen los procesos de dispersión en los que se incide por algún canal abierto  $a_0$  y se transmite o refleja en el canal abierto  $b$ .

- Las cantidades  $t_{QP}$ ,  $t'_{QP}$ ,  $r_{QP}$  y  $r'_{QP}$  denotan las matrices de transmisión y reflexión de *abierto a cerrado*, cuyos elementos de matriz son las cantidades  $t_{ba_0}$ ,  $t'_{ba_0}$ ,  $r_{ba_0}$  y  $r'_{ba_0}$  donde  $1 \leq a_0 \leq N$  y  $b > N$ ; por lo tanto, cada una de estas matrices tiene  $N \times N'$  elementos, siendo  $N'$  el número de canales cerrados; es decir:

$$t_{QP} = \begin{pmatrix} t_{(N+1)1} & \cdots & t_{(N+1)N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{(N+N')1} & \cdots & t_{(N+N')N} \end{pmatrix}, \quad t'_{QP} = \begin{pmatrix} t'_{(N+1)1} & \cdots & t'_{(N+1)N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t'_{(N+N')1} & \cdots & t'_{(N+N')N} \end{pmatrix}, \quad (2.46c)$$

$$r_{QP} = \begin{pmatrix} r_{(N+1)1} & \cdots & r_{(N+1)N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{(N+N')1} & \cdots & r_{(N+N')N} \end{pmatrix}, \quad r'_{QP} = \begin{pmatrix} r'_{(N+1)1} & \cdots & r'_{(N+1)N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ r'_{(N+N')1} & \cdots & r'_{(N+N')N} \end{pmatrix}. \quad (2.46d)$$

Estas matrices describen los procesos de dispersión en los que se incide por algún canal abierto  $a_0$  y se transmite o refleja en algún canal cerrado  $b$ .

- Es importante aclarar que formalmente el número de canales cerrados  $N'$  es infinito, de tal manera que en el resultado final deberemos considerar el límite  $N' \rightarrow \infty$ ; es importante tener siempre presente este hecho, ya que, como explicaremos al final del Capítulo 3, de no hacerlo no podríamos reproducir que en 2 dimensiones un potencial delta no dispersa [29]; sin embargo, en la práctica, los cálculos numéricos (de cantidades relaciona con la dispersión ver Capítulo 7) se realizan con un número finito de canales cerrados (tan grande como sea posible).

Utilizando las matrices de las ecuaciones (2.46a) y (2.46b) podemos escribir la siguiente relación matricial entre los vectores de las amplitudes *salientes* de canales abiertos,  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$ , y los vectores de las amplitudes *incidentes* de canales abiertos,  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$ :

$$\begin{pmatrix} b_P^{(1)} \\ a_P^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{PP} & t'_{PP} \\ t_{PP} & r'_{PP} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{pmatrix}; \quad (2.47a)$$

análogamente, podemos utilizar las ecuaciones (2.46c) y (2.46d) para escribir la siguiente relación matricial entre los vectores de las amplitudes “salientes” de canales cerrados,  $b_Q^{(1)}$  y  $a_Q^{(2)}$ , y los vectores de las amplitudes *incidentes* de canales abiertos,  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$ :

$$\begin{pmatrix} b_Q^{(1)} \\ a_Q^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{QP} & t'_{QP} \\ t_{QP} & r'_{QP} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{pmatrix}; \quad (2.47b)$$

Debido a que nos interesa estudiar la dispersión en la región asintótica, es decir, lejos de la región de interacción  $|x| \gg |L|$ , las amplitudes relevantes son las de las ondas de canales abiertos  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$ , ya que en esa región las correspondientes amplitudes de canales cerrados  $b_Q^{(1)}$  y  $a_Q^{(2)}$  tienen un atenuamiento exponencial, lo cual requiere que  $|x| \gg 1/\kappa_1$ ; por esta razón pondremos nuestra atención en la ecuación (2.47a), la cual podemos reescribir de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} b_P^{(1)} \\ a_P^{(2)} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.48a)$$

donde  $S$  es una matriz de  $2N \times 2N$  elementos que llamaremos *matriz de dispersión reducida* y se define de la siguiente manera:

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \quad (2.48b)$$

siendo  $t$ ,  $t'$ ,  $r$  y  $r'$  las matrices de transmisión y reflexión *reducidas* o de canales abiertos:

$$r = r_{PP}, \quad t' = t'_{PP}, \quad (2.48c)$$

$$t = t_{PP}, \quad r' = r'_{PP}. \quad (2.48d)$$

La *matriz de dispersión reducida*,  $S$ , nos da las amplitudes de las ondas salientes de canales abiertos  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$  en términos de las amplitudes de las ondas incidentes de canales abiertos  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$ , sin necesidad de conocer las amplitudes transmitidas o reflejadas de las ondas salientes de los *canales cerrados*.

### La matriz de transferencia reducida

Hasta el momento siempre hemos planteado el problema de la dispersión suponiendo que se conocen o controlan las amplitudes de las ondas que inciden en los canales abiertos  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$  y que nuestro interés es conocer las amplitudes de las ondas salientes en los canales abiertos,  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$ , siendo las amplitudes de las ondas salientes de los canales cerrados  $b_Q^{(1)}$  y  $a_Q^{(2)}$  de poco interés para el comportamiento asintótico de la dispersión. Bajo estas circunstancias el estudio de la dispersión puede hacerse mediante la matriz de dispersión reducida, la cual se obtuvo en la sección anterior, Ec. (2.48b). Dicha matriz nos da las amplitudes de las ondas salientes de canales abiertos  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$  en términos de las amplitudes de las ondas incidentes de canales abiertos  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$ ; sin embargo, podríamos plantear el problema de la siguiente manera: supongamos que se

conocen las amplitudes del lado izquierdo del potencial,  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(1)}$ , y que ahora nuestro interés es obtener las amplitudes del lado derecho del potencial  $a_P^{(2)}$  y  $b_P^{(2)}$ . Bajo estas circunstancias conviene plantear el problema en el contexto de la *matriz de transferencia reducida*  $M$ , la cual relaciona las amplitudes de los canales abiertos del lado derecho con las correspondientes del lado izquierdo mediante la siguiente relación matricial:

$$\begin{bmatrix} a_P^{(2)} \\ b_P^{(2)} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (2.49a)$$

donde la matriz de transferencia reducida  $M$  es de  $2N \times 2N$  definida como:

$$M = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix}, \quad (2.49b)$$

con  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  matrices de  $N \times N$ .

Como veremos en la sección 2.5.2, la obtención de la matriz de transferencia reducida sí requiere trabajar con las amplitudes de las ondas “salientes” de canales cerrados  $b_Q^{(1)}$  y  $a_Q^{(2)}$ , lo cual no sucedía para obtener la matriz de dispersión reducida  $S$ . De igual manera, mostraremos que las matrices de dispersión y transferencia reducidas, Ecs. (2.48b) y (2.49b), pueden obtenerse una en términos de la otra: ver Ecs. (2.87) y (2.88).

La razón por la cual se introduce la matriz de transferencia se debe a que el estudio que haremos de la dispersión en guías de ondas desordenadas que presentaremos en el Capítulo 4 estará basado en la matriz de transferencia  $M$  y no en términos de la matriz de dispersión  $S$ .

## 2.5.2. Propiedades de las matrices *reducidas*

### Relaciones de conservación de flujo

De la ecuación de Schrödinger tridimensional dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.50a)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.50b)$$

se demuestra que la función de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  satisface la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2.51a)$$

donde la densidad de probabilidad  $\rho(\mathbf{r}, t)$  y la densidad de corriente  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  se definen como:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.51b)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)]. \quad (2.51c)$$

Si en la ecuación (2.50a) el potencial no depende del tiempo, podemos trabajar con la ecuación de Schrödinger estacionaria:

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (2.52a)$$

En este caso la densidad de probabilidad  $\rho(\mathbf{r})$  y la densidad de corriente  $\mathbf{j}(\mathbf{r})$  no dependen del tiempo, por lo que la ecuación de continuidad para el caso estacionario toma la siguiente forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.52b)$$

En nuestro caso particular estamos trabajando con una guía de ondas bidimensional en la que se cumple la ecuación de Schrödinger estacionaria, Ec. (2.16a), por lo que la ecuación de continuidad es la siguiente:

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(x, y) = 0, \quad (2.53a)$$

donde la densidad de corriente bidimensional se define como:

$$\mathbf{j}(x, y) = \frac{\hbar}{2im} [\Psi^*(x, y) \nabla \Psi(x, y) - \Psi(x, y) \nabla \Psi^*(x, y)], \quad (2.53b)$$

Debido a que el número de partículas por unidad de tiempo que entra a la región del potencial debe ser igual al número de partículas por unidad de tiempo que sale de esta región, entonces el flujo del vector densidad de corriente, Ec. (2.53b), debe ser mismo tanto del lado izquierdo como del derecho del potencial, es decir:

$$\int_{C^1} \mathbf{j}^{(1)}(x, y) \cdot d\mathbf{l}^{(1)} = \int_{C^2} \mathbf{j}^{(2)}(x, y) \cdot d\mathbf{l}^{(2)} \quad (2.54)$$

donde  $\mathbf{j}^{(1)}(x, y)$  representa el vector de densidad de corriente del lado izquierdo, mientras que  $\mathbf{j}^{(2)}(x, y)$  representa el correspondiente vector del lado derecho; análogamente los vectores  $d\mathbf{l}^{(1)}$  y  $d\mathbf{l}^{(2)}$  representan los elementos de línea de la sección transversal del lado izquierdo y del derecho, respectivamente. Las curvas  $C^1$  y  $C^2$  sobre las cuales se realiza la integración son curvas de forma arbitraria que deben unir las paredes de la guía. Por simplicidad consideraremos las curvas  $C^1$  y  $C^2$  como rectas que unen las paredes de la guía en una abscisa  $x$  tal que  $|x| > L/2$ ; por lo tanto:

$$d\mathbf{l}^{(1)} = \hat{x}dy = d\mathbf{l}^{(2)}, \quad \Rightarrow \quad (2.55a)$$

$$\int_0^W j_x^{(1)}(x, y) dy = \int_0^W j_x^{(2)}(x, y) dy \quad (2.55b)$$

donde

$$j_x(x, y) = \frac{\hbar}{2im} \left( \Psi^*(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y) - \Psi(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x, y) \right), \quad (2.55c)$$

es la componente  $x$  del vector densidad de corriente de la ecuación (2.53b).

Para calcular las densidades de corriente del lado izquierdo,  $j_x^{(1)}(x, y)$ , y derecho,  $j_x^{(2)}(x, y)$ , tenemos que utilizar las ecuaciones (2.41), (2.42), y (2.43), con las cuales podemos escribir las funciones de onda del lado izquierdo y derecho, respectivamente:

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(x, y) &= \sum_{b=1}^N \left[ a_b^{(1)} \phi_+(E_b; x) + b_b^{(1)} \phi_-(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &\quad + \sum_{b=N+1}^{\infty} b_b^{(1)} \phi_-(\epsilon_b; x) \chi_b(y) \end{aligned} \quad (2.56a)$$

$$\begin{aligned} \Psi^{(2)}(x, y) &= \sum_{b=1}^N \left[ b_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) + a_b^{(2)} \phi_+(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &\quad + \sum_{b=N+1}^{\infty} a_b^{(2)} \phi_+(\epsilon_b; x) \chi_b(y). \end{aligned} \quad (2.56b)$$

Las expresiones de la ecuación (2.56) nos permiten calcular las derivadas que necesitaremos para obtener la densidad de corriente de la ecuación (2.55c), de ambos lados del potencial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)}(x, y) &= \sum_{b=1}^N ik_b \left[ a_b^{(1)} \phi_+(E_b; x) - b_b^{(1)} \phi_-(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &\quad + \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b b_b^{(1)} \phi_-(\epsilon_b; x) \chi_b(y) \end{aligned} \quad (2.57a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(2)}(x, y) &= - \sum_{b=1}^N ik_b \left[ b_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) - a_b^{(2)} \phi_+(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &\quad - \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b a_b^{(2)} \phi_+(\epsilon_b; x) \chi_b(y). \end{aligned} \quad (2.57b)$$

**Flujo del lado izquierdo** Para calcular el flujo del lado izquierdo necesitamos utilizar las ecuaciones (2.56a) y (2.57a) para calcular las siguiente integrales:

$$\int_0^W \Psi^{(1)*}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)}(x, y) dy \quad (2.58a)$$

$$\int_0^W \Psi^{(1)}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)*}(x, y) dy, \quad (2.58b)$$

que podremos hacer fácilmente, ya que las funciones transversales  $\chi_b(y)$  son ortonormales en el intervalo  $y \in [0, W]$ , Ec. (2.7); por lo tanto, se tiene:

$$\int_0^W \Psi^{(1)*}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)}(x, y) dy = \sum_{b=1}^N ik_b \left[ |a_b^{(1)}|^2 |\phi_+(E_b; x)|^2 - \right. \quad (2.59a)$$

$$\left. a_b^{(1)*} b_b^{(1)} \phi_-^2(E_b; x) + b_b^{(1)*} a_b^{(1)} \phi_+^2(E_b; x) - |b_b^{(1)}|^2 |\phi_-(E_b; x)|^2 \right]$$

$$+ \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b |b_b^{(1)}|^2 |\phi_-(-\epsilon_b; x)|^2,$$

$$\int_0^W \Psi^{(1)}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)*}(x, y) dy = - \sum_{b=1}^N ik_b \left[ |a_b^{(1)}|^2 |\phi_+(E_b; x)|^2 - \right. \quad (2.59b)$$

$$\left. a_b^{(1)} b_b^{(1)*} \phi_+^2(E_b; x) + b_b^{(1)} a_b^{(1)*} \phi_-^2(E_b; x) - |b_b^{(1)}|^2 |\phi_-(E_b; x)|^2 \right]$$

$$+ \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b |b_b^{(1)}|^2 |\phi_-(-\epsilon_b; x)|^2.$$

Al sustituir las ecuaciones anteriores en el lado izquierdo de la ecuación (2.55b) se obtiene que el flujo del lado izquierdo es:

$$\int_0^W j_x^{(1)}(x, y) dy = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{b=1}^N \left[ |a_b^{(1)}|^2 - |b_b^{(1)}|^2 \right]. \quad (2.60)$$

**Flujo del lado derecho.** Utilizando un procedimiento análogo al que realizamos para calcular el flujo del lado izquierdo obtenemos que el flujo del lado derecho es:

$$\int_0^W j_x^{(2)}(x, y) dy = -\frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{b=1}^N \left[ |b_b^{(2)}|^2 - |a_b^{(2)}|^2 \right]. \quad (2.61)$$

Al sustituir las ecuaciones (2.60) y (2.61) en la ecuación (2.55b) se obtiene que la conservación de flujo impone la siguiente relación entre las amplitudes:

$$\sum_{b=1}^N \left[ |a_b^{(1)}|^2 - |b_b^{(1)}|^2 \right] + \sum_{b=1}^N \left[ |b_b^{(2)}|^2 - |a_b^{(2)}|^2 \right] = 0 \quad (2.62)$$

**Relación de conservación de flujo para la matriz de dispersión reducida.** Si utilizamos los vectores  $a_P^{(1)}$ ,  $b_P^{(2)}$ ,  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$  definimos en la ecuación (2.45), podemos reescribir la relación de conservación de flujo, Ec. (2.62), en términos de estos vectores: es decir, obtenemos la siguiente expresión para la conservación de flujo:

$$a_P^{(1)\dagger} \cdot a_P^{(1)} + b_P^{(2)\dagger} \cdot b_P^{(2)} = b_P^{(1)\dagger} \cdot b_P^{(1)} + a_P^{(2)\dagger} \cdot a_P^{(2)}. \quad (2.63)$$

Con ayuda de la ecuación (2.48) podemos escribir el lado derecho de la ecuación (2.63) de la siguiente manera:

$$b_P^{(1)\dagger} \cdot b_P^{(1)} + a_P^{(2)\dagger} \cdot a_P^{(2)} = \begin{bmatrix} b_P^{(1)\dagger} & a_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_P^{(1)} \\ a_P^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} S^\dagger S \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{bmatrix} \quad (2.64a)$$

análogamente, el lado izquierdo de la ecuación (2.63) puede escribirse matricialmente como:

$$a_P^{(1)\dagger} \cdot a_P^{(1)} + b_P^{(2)\dagger} \cdot b_P^{(2)} = \begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{bmatrix}. \quad (2.64b)$$

Finalmente, al sustituir las expresiones de la ecuación (2.64) en la ecuación (2.63) se obtiene:

$$\begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} S^\dagger S \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{bmatrix}. \quad (2.65a)$$

Debido a que la ecuación (2.65a) debe cumplirse para cualquier pareja de vectores  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$ , la conservación de flujo impone que la matriz de dispersión reducida satisfaga la siguiente relación.

$$S^\dagger S = I_{2N}. \quad (2.66a)$$

donde la matriz  $I_{2N}$  es la identidad de dimensión  $2N$ , es decir,

$$I_{2N} = \begin{bmatrix} I_N & 0_N \\ 0_N & I_N \end{bmatrix}. \quad (2.66b)$$

Por lo tanto, la conservación de flujo impone las siguientes relaciones ente los elementos de la matriz  $S$ :

$$r^\dagger r + t^\dagger t = I_N = t'^\dagger t' + r'^\dagger r', \quad (2.66c)$$

$$r^\dagger t' + t'^\dagger r' = 0_N = t'^\dagger r + r'^\dagger t. \quad (2.66d)$$

Las matrices  $S$  que satisfacen la Ec. (2.66a) forman un grupo llamado el *grupo unitario*.

### Relación de conservación de flujo para la matriz de transferencia reducida.

Otra manera en la que podemos reescribir la relación de conservación de flujo, Ec. (2.62), en términos de los vectores  $a_P^{(1)}$ ,  $b_P^{(2)}$ ,  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$  es la siguiente:

$$a_P^{(1)\dagger} \cdot a_P^{(1)} - b_P^{(1)\dagger} \cdot b_P^{(1)} = a_P^{(2)\dagger} \cdot a_P^{(2)} - b_P^{(2)\dagger} \cdot b_P^{(2)}. \quad (2.67)$$

Con ayuda de la ecuación (2.49) podemos escribir el lado derecho de la ecuación (2.67) como la siguiente relación matricial:

$$\begin{aligned}
a_P^{(2)\dagger} \cdot a_P^{(2)} - b_P^{(2)\dagger} \cdot b_P^{(2)} &= \begin{bmatrix} a_P^{(2)\dagger} & b_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I_N & 0_N \\ 0_N & -I_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_P^{(2)} \\ b_P^{(2)} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(1)\dagger} \end{bmatrix} M^\dagger \Sigma_z M \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{2.68a}$$

donde hemos definido la matriz  $\Sigma_z$  como:

$$\Sigma_z = \begin{pmatrix} I_N & 0 \\ 0 & -I_N \end{pmatrix}. \tag{2.68b}$$

De igual manera, el lado izquierdo de la ecuación (2.67) puede escribirse de manera matricial:

$$a_P^{(1)\dagger} \cdot a_P^{(1)} - b_P^{(1)\dagger} \cdot b_P^{(1)} = \begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_z \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{bmatrix}. \tag{2.68c}$$

Utilizando las expresiones (2.68a) y (2.68c) en la ecuación (2.67), se obtiene que:

$$\begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_z \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_P^{(1)\dagger} & b_P^{(1)\dagger} \end{bmatrix} M^\dagger \Sigma_z M \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{bmatrix}, \tag{2.69a}$$

que al igual que la ecuación (2.65a), debe cumplirse para cualquier par de vectores  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(1)}$ ; por lo tanto, la conservación de flujo impone que la matriz de transferencia reducida debe satisfacer la siguiente relación:

$$M^\dagger \Sigma_z M = \Sigma_z. \tag{2.70}$$

Las matrices  $M$  que satisfacen la Ec. (2.70) forman un grupo llamado el *grupo pseudounitario*.

### Propiedad de invariancia ante inversiones temporales

Tanto en la mecánica clásica como en la mecánica cuántica puede suceder que la dinámica del problema sea invariante ante inversiones temporales. La siguiente discusión sigue las ideas expuestas por Messiah [36].

Consideremos un sistema clásico cuya solución de las leyes de Newton es el vector posición  $\mathbf{r}(t)$ . Supongamos que esta solución es reversible en el tiempo, es decir, que el vector de posición

$$\mathbf{r}_{rev}(t) = \mathbf{r}(-t), \tag{2.71a}$$

también es solución de las leyes de Newton. La ecuación (2.71a) quiere decir que el vector  $\mathbf{r}$  en el tiempo  $t$  es igual al vector  $\mathbf{r}_{rev}$  en el tiempo  $-t$ ; además, la velocidad  $\dot{\mathbf{r}}$  en el tiempo  $t$  es opuesta a la velocidad  $\dot{\mathbf{r}}_{rev}$  en el tiempo  $-t$ . Al igual que la velocidad, el momento satisface:

$$\mathbf{p}_{rev}(t) = -\mathbf{p}(-t). \quad (2.71b)$$

Si el sistema clásico satisface las ecuaciones (2.71a) y (2.71b), entonces la función de Hamilton es invariante ante inversiones temporales, es decir:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = H(\mathbf{p}_{rev}, \mathbf{r}_{rev}). \quad (2.71c)$$

Un ejemplo en el que las leyes de Newton no son invariantes ante inversiones temporales, es el caso de una partícula cargada en presencia de un campo magnético. Lo anterior se debe a que el campo magnético introduce un acoplamiento lineal con las velocidades, lo cual da como consecuencia que no se cumplan las relaciones de la ecuación (2.71).

Consideremos ahora el análogo cuántico, es decir, un sistema que obedece la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, Ec. (2.50a). Como el operador Hamiltoniano, Ec. (2.50b), es real, en la ecuación (2.50a) podemos hacer el cambio  $t \rightarrow -t$  y conjugar la ecuación obteniendo así:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r}, -t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^*(\mathbf{r}, -t) + V(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r}, -t) = \hat{H} \Psi^*(\mathbf{r}, -t), \quad (2.72a)$$

lo cual quiere decir que la función

$$\Psi_{rev}(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, -t) \quad (2.72b)$$

también es solución de la ecuación de Schrödinger; es decir, si el Hamiltoniano del sistema es invariante ante inversiones temporales, entonces la solución  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  es reversible en el tiempo, ya que  $\Psi_{rev}(\mathbf{r}, t)$  también es solución.

Al igual que en el caso clásico si el hamiltoniano depende de un campo magnético, el hamiltoniano no será invariante ante inversiones temporales.

Consideremos la ecuación de Schrödinger en el caso estacionario, Ec. (2.52a). En este caso, si la función  $\Psi(\mathbf{r})$  es solución de la ecuación (2.52a), y el hamiltoniano es invariante ante inversiones temporales, entonces la función:

$$\Psi_{rev}(\mathbf{r}) = \Psi^*(\mathbf{r}) \quad (2.73)$$

también es solución de la ecuación (2.52a).

En nuestro caso particular estamos trabajando con la ecuación de Schrödinger estacionaria, Ec. (2.16a), cuyo Hamiltoniano es invariante ante inversiones temporales; por lo tanto, si la función  $\Psi(x, y)$ , Ec. (2.41), es solución de la ecuación (2.16a), entonces la función

$$\Psi_{rev}(x, y) = \sum_{b=1}^{\infty} [\psi(x)]_b^* \chi_b(y), \quad (2.74a)$$

también es solución de la ecuación (2.16a), donde hemos utilizado la ecuación (2.41) para definir la función:

$$[\psi(x)]_b^* = \sum_{a_0=1}^N \left\{ a_{a_0}^{(1)*} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b^* + b_{a_0}^{(2)*} \left[ \psi_{-a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b^* \right\}, \quad b = 1, 2, \dots, N, \dots$$

De las ecuaciones (2.42) y (2.43) podemos obtener el comportamiento asintótico de las funciones  $[\psi(x)]_b^*$ , siendo éste:

$$[\psi(x)]_b^* = b_b^{(1)*} \phi_+(E_b; x) + a_b^{(1)*} \phi_-(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.75a)$$

$$[\psi(x)]_b^* = b_b^{(1)*} \phi_-^*(-\epsilon_b; x), \quad b > N \quad (2.75b)$$

si  $x < -L/2$  y

$$[\psi(x)]_b^* = a_b^{(2)*} \phi_-(E_b; x) + b_b^{(2)*} \phi_+(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.76a)$$

$$[\psi(x)]_b^* = a_b^{(2)*} \phi_+^*(-\epsilon_a; x), \quad b > N, \quad (2.76b)$$

si  $x > L/2$ . Debido a que la contribución de las funciones de onda de los canales cerrados decrece exponencialmente conforme  $|x| \rightarrow \infty$ , Ecs. (2.75b) y (2.76b), sólo nos interesan las funciones de onda de canales abiertos, Ecs. (2.75a) y (2.76a).

De las ecuaciones (2.75a) y (2.76a) observamos que las amplitudes de las ondas que inciden por la izquierda y por la derecha, respectivamente son:  $b_b^{(1)*}$  y  $a_b^{(2)*}$ , y que las amplitudes de las ondas dispersadas a la izquierda y a la derecha, respectivamente son:  $a_b^{(1)*}$  y  $b_b^{(2)*}$ . Al igual que en la ecuación (2.45), podemos agrupar las amplitudes de las ondas entrantes y salientes en términos de los vectores  $b_P^{(1)*}$ ,  $a_P^{(2)*}$  y  $a_P^{(1)*}$ ,  $b_P^{(2)*}$ , respectivamente.

Es oportuno recordar que las componentes de los vectores  $b_P^{(1)*}$ ,  $a_P^{(2)*}$ ,  $a_P^{(1)*}$  y  $b_P^{(2)*}$  son las conjugadas de los vectores definidos en la ecuación (2.45), pero en este caso, la solución  $\Psi_{rev}(x, y)$  invierte la dirección de las ondas entrantes y salientes, es decir: si  $a_b^{(1)*}$  representa la amplitud de una onda incidente en la solución  $\Psi(x, y)$ , entonces  $a_b^{(1)*}$  representa la amplitud de una onda saliente en la solución  $\Psi_{rev}(x, y)$  y viceversa, si  $b_b^{(1)*}$  representa la amplitud de una onda saliente en la solución  $\Psi(x, y)$ , entonces  $b_b^{(1)*}$  representa la amplitud de una onda incidente en la solución  $\Psi_{rev}(x, y)$ .

**Relación de invariancia ante inversiones temporales de la matriz de dispersión reducida.** Utilizando la matriz de dispersión reducida  $S$ , Ec. (2.48), podemos expresar los vectores de las amplitudes de ondas salientes  $a_P^{(1)*}$  y  $b_P^{(2)*}$  en términos de los vectores de las amplitudes de ondas entrantes  $b_P^{(1)*}$  y  $a_P^{(2)*}$ :

$$\begin{pmatrix} a_P^{(1)*} \\ b_P^{(2)*} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} b_P^{(1)*} \\ a_P^{(2)*} \end{pmatrix}. \quad (2.77a)$$

La ecuación (2.48) también relaciona los vectores de  $b_P^{(1)}$  y  $a_P^{(2)}$  con los vectores  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(2)}$ , por lo que la ecuación (2.77a) se reescribe de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{pmatrix}^* = SS^* \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(2)} \end{pmatrix}^* ; \quad (2.77b)$$

por lo tanto, si el hamiltoniano es invariante ante inversiones temporales, la matriz de dispersión reducida satisface la siguiente relación:

$$SS^* = I_{2N}, \quad (2.78a)$$

que al combinarla con la relación de conservación de flujo, Ec. (2.66a) nos da:

$$S = S^T, \quad (2.78b)$$

que en términos de las matrices  $r$ ,  $t'$ ,  $t$  y  $r'$  se expresa como:

$$r = r^T, \quad r' = r'^T, \quad t' = t^T. \quad (2.78c)$$

Lo anterior quiere decir que si un sistema tiene un hamiltoniano que es invariante ante inversiones temporales, entonces la matriz de dispersion del sistema se puede escribir de la siguiente manera:

$$S = \begin{pmatrix} r & t^T \\ t & r' \end{pmatrix}. \quad (2.79)$$

**Relación de invariancia ante inversiones temporales de la matriz de transferencia reducida.** La matriz de transferencia reducida  $M$ , Ec. (2.49), nos permite relacionar los vectores,  $b_P^{(2)*}$  y  $a_P^{(2)*}$ , de las amplitudes del lado derecho con los del lado izquierdo  $b_P^{(1)*}$  y  $a_P^{(1)*}$  de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} b_P^{(2)*} \\ a_P^{(2)*} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} b_P^{(1)*} \\ a_P^{(1)*} \end{pmatrix}, \quad (2.80a)$$

o equivalentemente:

$$\Sigma_x \begin{pmatrix} a_P^{(2)} \\ b_P^{(2)} \end{pmatrix}^* = M \Sigma_x \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{pmatrix}^*, \quad (2.80b)$$

donde hemos definido la matriz  $\Sigma_x$  como:

$$\Sigma_x = \begin{bmatrix} 0_N & I_N \\ I_N & 0_N \end{bmatrix}, \quad (2.81a)$$

la cual tiene la propiedad de que su cuadrado es la identidad

$$\Sigma_x^2 = I_{2N}. \quad (2.81b)$$

La ecuación (2.49) también relaciona los vectores  $a_P^{(2)}$  y  $b_P^{(2)}$ , con los vectores  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(1)}$ , por lo que la ecuación (2.80b) se puede reescribir de la siguiente manera:

$$M^* \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{pmatrix}^* = \Sigma_x M \Sigma_x \begin{pmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{pmatrix}^*, \quad (2.81c)$$

donde hemos utilizado la propiedad (2.81b); por lo tanto, si el hamiltoniano es invariante ante inversiones temporales, entonces su matriz de transferencia reducida debe satisfacer la siguiente relación matricial:

$$M^* = \Sigma_x M \Sigma_x, \quad (2.82a)$$

que en términos de las matrices  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  se expresa como:

$$\delta = \alpha^*, \quad \gamma = \beta^*. \quad (2.82b)$$

Lo anterior quiere decir que si un sistema tiene un hamiltoniano que es invariante ante inversiones temporales, entonces la matriz de transferencia del sistema se puede escribir de la siguiente manera:

$$M = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \beta^* & \alpha^* \end{bmatrix}. \quad (2.82c)$$

Las matrices  $M$  que satisfacen las ecuaciones (2.70) y (2.82a) satisfacen las siguientes propiedades:

$$|\det M| = 1, \quad (2.83a)$$

$$\det M = \pm 1. \quad (2.83b)$$

### Relación entre las matrices de dispersión y de transferencia reducidas

Las matrices de dispersión y transferencia reducidas nos sirven para describir el mismo problema: la dispersión; sin embargo, dependiendo de lo que nos interese estudiar nos convendrá plantear el problema en términos de una o de otra. Debido a que ambas matrices describen el mismo problema, debe haber una relación que nos permita obtener una en términos de la otra.

Supongamos que conocemos la matriz de dispersión reducida  $S$  y que nos interesa obtener la matriz de transferencia reducida  $M$ . De la ecuación (2.48) podemos despejar los vectores  $a_P^{(2)}$  y  $b_P^{(2)}$  en términos de los vectores  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(1)}$  obteniendo así que:

$$a_P^{(2)} = \left[ t - r'(t')^{-1} r \right] a_P^{(1)} + r'(t')^{-1} b_P^{(1)}, \quad (2.84a)$$

$$b_P^{(2)} = -(t')^{-1} r a_P^{(1)} + (t')^{-1} b_P^{(1)}. \quad (2.84b)$$

De la relación de conservación de flujo para la matriz de dispersión reducida, Ec. (2.66a), se obtiene la siguientes relaciones matriciales:

$$r^\dagger r + t^\dagger t = I, \quad (2.85a)$$

$$r^\dagger t' + t^\dagger r' = 0, \quad (2.85b)$$

de las cuales se puede mostrar que:

$$(t^\dagger)^{-1} = t - r' (t')^{-1} r; \quad (2.85c)$$

por lo tanto, la ecuación (2.84) se simplifica de la siguiente forma:

$$a_P^{(2)} = (t^\dagger)^{-1} a_P^{(1)} + r' (t')^{-1} b_P^{(1)}, \quad (2.86a)$$

$$b_P^{(2)} = -(t')^{-1} r a_P^{(1)} + (t')^{-1} b_P^{(1)}. \quad (2.86b)$$

Al comparar la ecuación (2.86) con la ecuación (2.49), podemos hacer las siguientes identificaciones:

$$\alpha = (t^\dagger)^{-1}, \quad \beta = r' (t')^{-1}, \quad (2.87a)$$

$$\gamma = -(t')^{-1} r, \quad \delta = (t')^{-1}. \quad (2.87b)$$

De la ecuación (2.87) podemos obtener las matrices  $r, t', t$  y  $r'$  en términos de los bloques de la matriz de transferencia obteniendo así:

$$r = -(\delta)^{-1} \gamma, \quad t' = (\delta)^{-1}, \quad (2.88a)$$

$$t = (\alpha^\dagger)^{-1}, \quad r' = \beta (\delta)^{-1}. \quad (2.88b)$$

### 2.5.3. Las matrices *extendidas*

#### Incidencia por canales cerrados

En todo el estudio de la dispersión que hemos hecho en el presente Capítulo siempre hemos tenido en mente que tanto a la izquierda como a la derecha del potencial la guía de ondas está vacía (ver figura 2.2), de tal manera que, tanto por la izquierda como por la derecha no hay incidencia en los canales cerrados, ya que se tendrían funciones exponenciales que divergirían exponencialmente conforme  $|x| \rightarrow \infty$ ; sin embargo, pensemos que nuestro sistema dispersor está constituido por tres subsistemas como se muestra en la figura 2.3, y que nos interesa estudiar la dispersión que produce el subsistema que se encuentra entre las regiones 1 y 2, en las cuales el potencial es cero.

Como observamos en la figura 2.3 la incidencia de ondas planas, cuyas amplitudes agrupamos en los vectores  $a_P^{(I)}$  y  $b_P^{(D)}$ , produce en las regiones  $I$  y  $D$ , ondas dispersadas

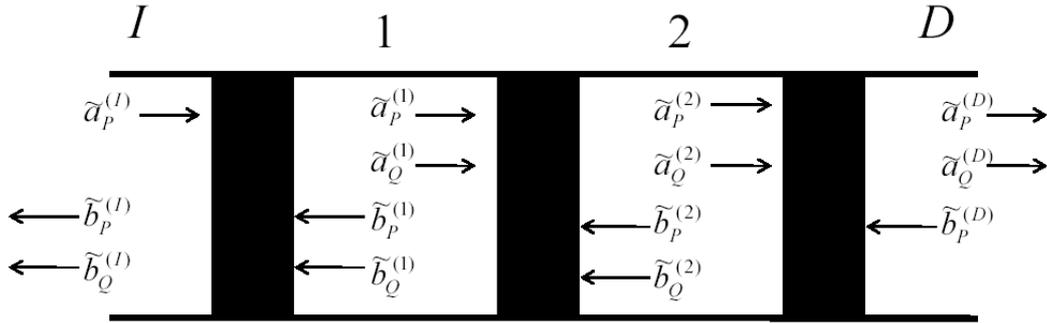


Figura 2.3: Dispersión múltiple producida por tres sistemas. En las regiones 1 y 2 hay ondas evanescentes de canales cerrados que se atenúan en ambas direcciones.

en canales abiertos y cerrados, cuyas amplitudes agrupamos en los vectores  $b_P^{(I)}$ ,  $a_P^{(D)}$ ,  $b_Q^{(I)}$  y  $a_Q^{(D)}$ ; sin embargo, la *dispersión múltiple* debida al arreglo de los tres subsistemas, tiene como consecuencia que en las regiones 1 y 2 haya ondas viajeras de canales abiertos en ambas direcciones, pero también que haya ondas evanescentes de canales cerrados que se atenúan tanto de derecha a izquierda como de izquierda a derecha. Definimos los vectores que agrupan las amplitudes de onda en las regiones 1 y 2 de la figura 2.3 de la siguiente manera:

- Las amplitudes de las ondas incidentes de canales abiertos, por izquierda y por derecha respectivamente, se agrupan en los vectores:

$$\tilde{a}_P^{(1)} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_1^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{a}_N^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{b}_P^{(2)} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_1^{(2)} \\ \vdots \\ \tilde{b}_N^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.89a)$$

- Las amplitudes de las ondas “incidentes” de canales cerrados, por izquierda y por derecha respectivamente, se agrupan en los vectores:

$$\tilde{a}_Q^{(1)} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{N+1}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{b}_{N+N'}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{b}_Q^{(2)} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_{N+1}^{(2)} \\ \vdots \\ \tilde{b}_{N+N'}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.89b)$$

- Las amplitudes de las ondas salientes de canales abiertos, a la izquierda y a la derecha respectivamente, se agrupan en los vectores:

$$\tilde{b}_P^{(1)} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_1^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{b}_N^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{a}_P^{(2)} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_1^{(2)} \\ \vdots \\ \tilde{a}_N^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.89c)$$

- Las amplitudes de las ondas “salientes” de canales cerrados, a la izquierda y a la derecha respectivamente, se agrupan en los vectores:

$$\tilde{b}_Q^{(1)} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_{N+1}^{(1)} \\ \vdots \\ \tilde{b}_{N+N'}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \tilde{a}_Q^{(2)} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{N+1}^{(2)} \\ \vdots \\ \tilde{a}_{N+N'}^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (2.89d)$$

Los vectores de la ecuación (2.89) son la *extensión* natural de los vectores definidos en la ecuación (2.45) con la diferencia que ahora se permite la incidencia por canales cerrados lo cual da lugar a los vectores  $\tilde{a}_Q^{(1)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ ; por lo tanto, bajo estas circunstancias habrá incidencia de canales cerrados sobre el potencial  $U(x, y)$ .

Para describir la dispersión producida por el potencial  $U(x, y)$ , bajo las circunstancias descritas anteriormente, tenemos que *extender* los conceptos discutidos en las secciones previas. Uno de éstos que tenemos que *extender* es el referente al comportamiento asintótico de las funciones de onda  $[\psi(x)]_b$ , Ecs. (2.42) y Ecs. (2.43), ya que ahora debemos permitir que haya incidencia por los canales cerrados. Lo anterior se logra al reemplazar las ecuaciones (2.42a)-(2.42b) y Ecs. (2.43a)-(2.43b) por las siguientes extensiones:

$$[\psi(x)]_b = \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(E_b; x) + \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.90a)$$

$$[\psi(x)]_b = \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(-\epsilon_b; x) + \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(-\epsilon_b; x), \quad b > N \quad (2.90b)$$

en la región 1 y

$$[\psi(x)]_b = \tilde{b}_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) + \tilde{a}_b^{(2)} \phi_+(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.91a)$$

$$[\psi(x)]_b = \tilde{b}_b^{(2)} \phi_-(-\epsilon_a; x) + \tilde{a}_b^{(2)} \phi_+(-\epsilon_a; x), \quad b > N, \quad (2.91b)$$

en la región 2. Las amplitudes  $\tilde{a}_b^{(1)}$  y  $\tilde{b}_b^{(2)}$  denotan las amplitudes *extendidas* de las ondas incidentes (que agrupamos en los vectores  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ , respectivamente), mientras que las amplitudes  $\tilde{b}_b^{(1)}$  y  $\tilde{a}_b^{(2)}$  denotan las amplitudes *extendidas* de las ondas salientes (que agrupamos en los vectores  $\tilde{b}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_Q^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_P^{(2)}$  y  $\tilde{a}_Q^{(2)}$ , respectivamente), donde  $b$  puede ser un canal abierto o cerrado.

Por otro lado, también tenemos que *extender* la manera en la que relacionaremos las amplitudes de las ondas salientes, con las amplitudes de las ondas entrantes, o equivalentemente, las amplitudes en la región 2 con las en la región 1; es decir, tendremos que *extender* los conceptos de las matrices de dispersión y transferencia reducidas: Ecs. (2.48) y (2.49), respectivamente.

### La matriz de dispersión *extendida*

Si queremos relacionar las amplitudes extendidas salientes, Ecs. (2.89c)-(2.89d), con las amplitudes extendidas entrantes, Ecs. (2.89a)-(2.89b), debemos generalizar el concepto de amplitudes de transmisión y reflexión discutido en la sección 2.4.2, ya que ahora debemos permitir la incidencia a través de los canales cerrados; es decir, ahora tendremos amplitudes de transmisión y reflexión extendidas  $\tilde{t}_{ab}$ ,  $\tilde{t}'_{ab}$ ,  $\tilde{r}_{ab}$  y  $\tilde{r}'_{ab}$  donde los índices  $a$  y  $b$  pueden ser de canales abiertos o cerrados. Esta extensión permitirá que al incidir sobre el potencial en un canal cerrado pueda haber transmisión o reflexión en un canal abierto o cerrado; por lo tanto, nuestra matriz de transferencia extendida deberá tener amplitudes de transmisión y reflexión que permitan incidir por un canal abierto y salir por un canal abierto o cerrado e incidir por un canal cerrado y salir por un canal abierto o cerrado.

Podemos escribir la extensión de la ecuación (2.48) de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{pmatrix} = \tilde{S} \begin{pmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.92a)$$

donde  $\tilde{S}$  es la matriz de dispersión *extendida* definida de la siguiente manera:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} \tilde{r} & \tilde{t}' \\ \tilde{t} & \tilde{r}' \end{pmatrix}, \quad (2.92b)$$

con  $\tilde{t}$ ,  $\tilde{t}'$ ,  $\tilde{r}$  y  $\tilde{r}'$ , y las matrices de transmisión y reflexión extendidas, las cuales son de dimensión  $(N + N') \times (N + N')$ , por lo que la matriz de dispersión extendida es de dimensión  $2(N + N') \times 2(N + N')$ . Estas matrices de transmisión y reflexión extendidas están constituidas de lo siguientes bloques:

- Bloque  $PP$ : describe un proceso de dispersión en el cual se incide en un canal abierto y se sale en un canal abierto. Este bloque es de dimensión  $N \times N$ .
- Bloque  $QP$ : describe un proceso de dispersión en el cual se incide en un canal abierto y se sale en un canal cerrado. Este bloque es de dimensión  $N' \times N$ .
- Bloque  $PQ$ : describe un proceso de dispersión en el cual se incide en un canal cerrado y se sale en un canal abierto. Este bloque es de dimensión  $N \times N'$ .
- Bloque  $QQ$ : describe un proceso de dispersión en el cual se incide en un canal cerrado y se sale en un canal cerrado. Este bloque es de dimensión  $N' \times N'$ .

Por lo tanto, las submatrices de la matriz de dispersión extendida  $\tilde{S}$ , Ec. (2.92b), se escriben de la siguiente manera:

$$\tilde{r} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{PP} & \tilde{r}_{PQ} \\ \tilde{r}_{QP} & \tilde{r}_{QQ} \end{pmatrix}, \quad \tilde{t}' = \begin{pmatrix} \tilde{t}'_{PP} & \tilde{t}'_{PQ} \\ \tilde{t}'_{QP} & \tilde{t}'_{QQ} \end{pmatrix}, \quad (2.93a)$$

$$\tilde{t} = \begin{pmatrix} \tilde{t}_{PP} & \tilde{t}_{PQ} \\ \tilde{t}_{QP} & \tilde{t}_{QQ} \end{pmatrix}, \quad \tilde{r}' = \begin{pmatrix} \tilde{r}'_{PP} & \tilde{r}'_{PQ} \\ \tilde{r}'_{QP} & \tilde{r}'_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.93b)$$

Utilizando las ecuaciones (2.93b)-(2.93b) podemos reescribir la matriz de transferencia de la siguiente manera:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{PP} & \tilde{r}_{PQ} & \tilde{t}'_{PP} & \tilde{t}'_{PQ} \\ \tilde{r}_{QP} & \tilde{r}_{QQ} & \tilde{t}'_{QP} & \tilde{t}'_{QQ} \\ \tilde{t}_{PP} & \tilde{t}_{PQ} & \tilde{r}'_{PP} & \tilde{r}'_{PQ} \\ \tilde{t}_{QP} & \tilde{t}_{QQ} & \tilde{r}'_{QP} & \tilde{r}'_{QQ} \end{pmatrix}; \quad (2.93c)$$

sin embargo, en ocasiones será conveniente reescribir la ecuación (2.92a) de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{pmatrix} = \tilde{S} \begin{pmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (2.94a)$$

donde la matriz de transferencia extendida  $\tilde{S}$  se ha reescrito de la siguiente manera:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{PP} & \tilde{S}_{PQ} \\ \tilde{S}_{QP} & \tilde{S}_{QQ} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{PP} & \tilde{t}'_{PP} & \tilde{r}_{PQ} & \tilde{t}'_{PQ} \\ \tilde{t}_{PP} & \tilde{r}'_{PP} & \tilde{t}_{PQ} & \tilde{r}'_{PQ} \\ \tilde{r}_{QP} & \tilde{t}'_{QP} & \tilde{r}_{QQ} & \tilde{t}'_{QQ} \\ \tilde{t}_{QP} & \tilde{r}'_{QP} & \tilde{t}_{QQ} & \tilde{r}'_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.94b)$$

de tal manera que:

$$\tilde{S}_{PP} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{PP} & \tilde{t}'_{PP} \\ \tilde{t}_{PP} & \tilde{r}'_{PP} \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}_{PQ} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{PQ} & \tilde{t}'_{PQ} \\ \tilde{t}_{PQ} & \tilde{r}'_{PQ} \end{pmatrix}, \quad (2.94c)$$

$$\tilde{S}_{QP} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{QP} & \tilde{t}'_{QP} \\ \tilde{t}_{QP} & \tilde{r}'_{QP} \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}_{QQ} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_{QQ} & \tilde{t}'_{QQ} \\ \tilde{t}_{QQ} & \tilde{r}'_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.94d)$$

En las ecuaciones (2.92a) y (2.94a) hemos abusado un poco de la notación, ya que las matrices de dispersión que aparecen en dichas ecuaciones no son la misma matriz: en la ecuación (2.92a) la matriz  $\tilde{S}$  está dada por la ecuación (2.93c), mientras que ecuación (2.94a) la matriz  $\tilde{S}$  está dada por la ecuación (2.94b). La razón por la que no hacemos ninguna diferencia en la notación de la matriz  $\tilde{S}$ , es evitar que se genere alguna confusión por usar dos letras diferentes para denotar un objeto que, dependiendo el caso, expresamos de dos formas que son equivalentes.

Un ejemplo en el que se muestra la ventaja de utilizar la ecuación (2.94a) en vez de utilizar la ecuación (2.92a), es el siguiente: supongamos que queremos obtener la matriz de dispersión reducida  $S$ , Ec. (2.48b), y las expresiones para las amplitudes de las ondas salientes de las ecuaciones (2.47), en términos de la matriz de dispersión extendida. Para lograr lo anterior sólo tenemos que suponer que las amplitudes incidentes de los canales cerrados son cero, es decir:  $\tilde{a}_Q^{(1)} = 0 = \tilde{b}_Q^{(2)}$ ; por lo tanto, al utilizar la ecuación (2.94) se recuperan las expresiones (2.47), lo cual permite concluir que la matriz de dispersión reducida  $S$  se obtiene de la extendida  $\tilde{S}$  simplemente extrayendo el bloque  $\tilde{S}_{PP}$ , es decir:

$$S = \tilde{S}_{PP}. \quad (2.95)$$

Como veremos en la siguiente sección, la obtención de la matriz de transferencia reducida en términos de la matriz de transferencia extendida no será tan sencilla.

En la sección 2.5.4 veremos, entre otras propiedades, como obtener la matriz de dispersión  $\tilde{S}$  extendida de un sistema constituido por dos subsistemas con matrices de dispersión extendidas  $\tilde{S}_1$  y  $\tilde{S}_2$ , respectivamente. En dicha sección obtendremos la matriz  $\tilde{S}$  en términos de las matrices  $\tilde{S}_1$  y  $\tilde{S}_2$ , para lo cual convendrá expresar las matrices  $\tilde{S}_1$  y  $\tilde{S}_2$  con la ecuación (2.92a) en vez de la ecuación (2.94a).

### La matriz de transferencia *extendida*

Al igual que extendimos el concepto de la matriz de dispersión reducida, podemos extender la matriz de transferencia reducida, Ec. (2.49), de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (2.96a)$$

donde  $\tilde{M}$  es la matriz de transferencia *extendida* definida como:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha} & \tilde{\beta} \\ \tilde{\gamma} & \tilde{\delta} \end{pmatrix}, \quad (2.96b)$$

con  $\tilde{\alpha}$ ,  $\tilde{\beta}$ ,  $\tilde{\gamma}$  y  $\tilde{\delta}$  las submatrices extendidas, cada una de ellas de dimensión  $(N + N') \times (N + N')$ . Al igual que las matrices extendidas  $\tilde{r}$ ,  $\tilde{t}$ ,  $\tilde{t}$  y  $\tilde{r}'$  las matrices extendidas  $\tilde{\alpha}$ ,  $\tilde{\beta}$ ,  $\tilde{\gamma}$  y  $\tilde{\delta}$  pueden descomponerse en los siguientes bloques:

$$\tilde{\alpha} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{PP} & \tilde{\alpha}_{PQ} \\ \tilde{\alpha}_{QP} & \tilde{\alpha}_{QQ} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\beta} = \begin{pmatrix} \tilde{\beta}_{PP} & \tilde{\beta}_{PQ} \\ \tilde{\beta}_{QP} & \tilde{\beta}_{QQ} \end{pmatrix}, \quad (2.97a)$$

$$\tilde{\gamma} = \begin{pmatrix} \tilde{\gamma}_{PP} & \tilde{\gamma}_{PQ} \\ \tilde{\gamma}_{QP} & \tilde{\gamma}_{QQ} \end{pmatrix}, \quad \tilde{\delta} = \begin{pmatrix} \tilde{\delta}_{PP} & \tilde{\delta}_{PQ} \\ \tilde{\delta}_{QP} & \tilde{\delta}_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.97b)$$

Por lo tanto, al utilizar la ecuaciones (2.97a) y (2.97b) podemos reescribir la matriz de transferencia extendida de la siguiente manera:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{PP} & \tilde{\alpha}_{PQ} & \tilde{\beta}_{PP} & \tilde{\beta}_{PQ} \\ \tilde{\alpha}_{QP} & \tilde{\alpha}_{QQ} & \tilde{\beta}_{QP} & \tilde{\beta}_{QQ} \\ \tilde{\gamma}_{PP} & \tilde{\gamma}_{PQ} & \tilde{\delta}_{PP} & \tilde{\delta}_{PQ} \\ \tilde{\gamma}_{QP} & \tilde{\gamma}_{QQ} & \tilde{\delta}_{QP} & \tilde{\delta}_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.97c)$$

Al igual que para la matriz de dispersión, habrá ocasiones en las que convendrá escribir la matriz de transferencia, Ec. (2.96a), de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{pmatrix} = \tilde{M} \begin{pmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (2.98a)$$

donde la matriz de transferencia extendida  $\tilde{M}$  se ha reescrito de la siguiente forma:

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} \tilde{M}_{PP} & \tilde{M}_{PQ} \\ \tilde{M}_{QP} & \tilde{M}_{QQ} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{PP} & \tilde{\beta}_{PP} & \tilde{\alpha}_{PQ} & \tilde{\beta}_{PQ} \\ \tilde{\gamma}_{PP} & \tilde{\delta}_{PP} & \tilde{\gamma}_{PQ} & \tilde{\delta}_{PQ} \\ \tilde{\alpha}_{QP} & \tilde{\beta}_{QP} & \tilde{\alpha}_{QQ} & \tilde{\beta}_{QQ} \\ \tilde{\gamma}_{QP} & \tilde{\delta}_{QP} & \tilde{\gamma}_{QQ} & \tilde{\delta}_{QQ} \end{pmatrix}, \quad (2.98b)$$

de tal manera que:

$$\tilde{M}_{PP} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{PP} & \tilde{\beta}_{PP} \\ \tilde{\gamma}_{PP} & \tilde{\delta}_{PP} \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}_{PQ} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{PQ} & \tilde{\beta}_{PQ} \\ \tilde{\gamma}_{PQ} & \tilde{\delta}_{PQ} \end{pmatrix}, \quad (2.98c)$$

$$\tilde{M}_{QP} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{QP} & \tilde{\beta}_{QP} \\ \tilde{\gamma}_{QP} & \tilde{\delta}_{QP} \end{pmatrix}, \quad \tilde{M}_{QQ} = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{QQ} & \tilde{\beta}_{QQ} \\ \tilde{\gamma}_{QQ} & \tilde{\delta}_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.98d)$$

Al igual que en la sección anterior, en las ecuaciones (2.97c) y (2.98a) hemos abusado de la notación. La razón por la cual no hacemos diferencia en la manera en que denotamos las matrices de transferencia extendidas  $M$  de dichas ecuaciones es la misma que explicamos en la sección anterior.

Para recuperar la matriz de transferencia reducida, Ec. (2.49), debemos suponer que, tanto por la izquierda como por la derecha, no hay “*incidencia*” en los canales cerrados, es decir, en la ecuación (2.98a) hay que sustituir  $\tilde{a}_Q^{(1)} = 0 = \tilde{b}_Q^{(2)}$ . Al hacer lo anterior se obtiene la siguiente relación entre las amplitudes del lado izquierdo y del lado derecho:

$$\tilde{a}_P^{(2)} = \tilde{\alpha}_{PP}\tilde{a}_P^{(1)} + \tilde{\beta}_{PP}\tilde{b}_P^{(1)} + \tilde{\beta}_{PQ}\tilde{b}_Q^{(1)}, \quad (2.99a)$$

$$\tilde{b}_P^{(2)} = \tilde{\gamma}_{PP}\tilde{a}_P^{(1)} + \tilde{\delta}_{PP}\tilde{b}_P^{(1)} + \tilde{\delta}_{PQ}\tilde{b}_Q^{(1)}, \quad (2.99b)$$

$$\tilde{a}_Q^{(2)} = \tilde{\alpha}_{QP}\tilde{a}_P^{(1)} + \tilde{\beta}_{QP}\tilde{b}_P^{(1)} + \tilde{\beta}_{QQ}\tilde{b}_Q^{(1)}, \quad (2.99c)$$

$$\tilde{b}_Q^{(1)} = -\left(\tilde{\delta}_{QQ}\right)^{-1} \left[\tilde{\gamma}_{QP}\tilde{a}_P^{(1)} + \tilde{\delta}_{QP}\tilde{b}_P^{(1)}\right]. \quad (2.99d)$$

La ecuación (2.99) permite relacionar las amplitudes de las ondas de canales abiertos del lado derecho  $a_P^{(2)}$  y  $b_P^{(2)}$  únicamente en términos de las amplitudes de canales abiertos del lado izquierdo  $a_P^{(1)}$  y  $b_P^{(1)}$ . Por supuesto, la relación que se obtiene es la ecuación (2.49), donde las matrices  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  se expresan en términos de los bloques de la matriz de transferencia extendida, Ec. (2.98), como:

$$\alpha = \left[ \tilde{\alpha}_{PP} - \tilde{\beta}_{PQ} \left( \tilde{\delta}_{QQ} \right)^{-1} \tilde{\gamma}_{QP} \right], \quad \beta = \left[ \tilde{\beta}_{PP} - \tilde{\beta}_{PQ} \left( \tilde{\delta}_{QQ} \right)^{-1} \tilde{\delta}_{QP} \right], \quad (2.100a)$$

$$\gamma = \left[ \tilde{\gamma}_{PP} - \tilde{\delta}_{PQ} \left( \tilde{\delta}_{QQ} \right)^{-1} \tilde{\gamma}_{QP} \right], \quad \delta = \left[ \tilde{\delta}_{PP} - \tilde{\delta}_{PQ} \left( \tilde{\delta}_{QQ} \right)^{-1} \tilde{\delta}_{QP} \right]. \quad (2.100b)$$

La ecuación (2.100) nos deja ver que, a diferencia de la matriz de dispersión reducida  $S$ , la matriz de transferencia reducida no se puede obtener de la matriz de transferencia extendida únicamente extrayendo el bloque  $PP$ , es decir,

$$M \neq M_{PP}. \quad (2.101)$$

#### 2.5.4. Propiedades de las matrices *extendidas*

Al igual que en la sección 2.5.2 obtuvimos las propiedades de las matrices de dispersión y transferencia reducidas, en esta sección obtendremos las propiedades de conservación de flujo e invariancia ante inversiones temporales de las matrices de dispersión y transferencia extendidas; además, obtendremos la combinación de dos matrices de dispersión y de dos matrices de transferencia.

La combinación de dos matrices de transferencia jugará un papel trascendental en el modelo que desarrollaremos en el Capítulo 4, mientras que las propiedades de conservación de flujo e invariancia ante inversiones temporales será una herramienta que pondrá a prueba la consistencia de los resultados analíticos (ver Capítulo 5) y numéricos (ver capítulos 6 y 7) que obtendremos más adelante.

Con el fin de no ser repetitivos, las propiedades de conservación de flujo e invariancia ante inversiones temporales para las matrices extendidas las obtendremos al hacer las extensiones adecuadas de las expresiones que obtuvimos en la sección 2.5.2.

#### Propiedad de conservación de flujo

Para obtener la relación de conservación de flujo de las matrices extendidas debemos obtener las expresiones de los flujos en la regiones 1 y 2 de la figura 2.3, es decir, debemos obtener la expresión análoga a la ecuación (2.55b), pero ahora las funciones de onda que debemos utilizar en la ecuación (2.55c) para calcular las densidades de corriente en las regiones 1 y 2 son, respectivamente:

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(x, y) &= \sum_{b=1}^N \left[ \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(E_b; x) + \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &+ \sum_{b=N+1}^{\infty} \left[ \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(-\epsilon_b; x) + \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(-\epsilon_b; x) \right] \chi_b(y), \end{aligned} \quad (2.102a)$$

$$\begin{aligned} \Psi^{(2)}(x, y) &= \sum_{b=1}^N \left[ \tilde{b}_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) + \tilde{a}_b^{(2)} \phi_+(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &+ \sum_{b=N+1}^{\infty} \left[ \tilde{b}_b^{(2)} \phi_-(-\epsilon_b; x) + \tilde{a}_b^{(2)} \phi_+(-\epsilon_b; x) \right] \chi_b(y). \end{aligned} \quad (2.102b)$$

De la ecuación (2.55c) observamos que para calcular las densidades de corriente necesitaremos las derivadas de las expresiones de la ecuación (2.102), las cuales son:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)}(x, y) &= \sum_{b=1}^N ik_b \left[ \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(E_b; x) - \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &- \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b \left[ \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(-\epsilon_b; x) - \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(-\epsilon_b; x) \right] \chi_b(y), \end{aligned} \quad (2.103a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(2)}(x, y) &= - \sum_{b=1}^N ik_b \left[ \tilde{b}_b^{(2)} \phi_-(E_b; x) - \tilde{a}_b^{(2)} \phi_+(E_b; x) \right] \chi_b(y) \\ &+ \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b \left[ \tilde{b}_b^{(2)} \phi_-(-\epsilon_b; x) - \tilde{a}_b^{(2)} \phi_+(-\epsilon_b; x) \right] \chi_b(y). \end{aligned} \quad (2.103b)$$

**Flujo del lado izquierdo.** Para calcular el flujo del lado izquierdo necesitamos utilizar las ecuaciones (2.102a) y (2.103a) para calcular las siguiente integrales:

$$\int_0^W \Psi^{(1)*}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)}(x, y) dy, \quad (2.104a)$$

$$\int_0^W \Psi^{(1)}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)*}(x, y) dy, \quad (2.104b)$$

que podremos hacer fácilmente, ya que las funciones transversales  $\chi_b(y)$  son ortonormales para  $y \in [0, W]$ , Ec. (2.7); por lo tanto, se tiene:

$$\int_0^W \Psi^{(1)*}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)}(x, y) dy = \sum_{b=1}^N ik_b \left[ \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_+(E_b; x)|^2 \right. \quad (2.105a)$$

$$\left. - \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-^2(E_b; x) + \tilde{b}_b^{(1)*} \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+^2(E_b; x) - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_-(E_b; x)|^2 \right]$$

$$- \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b \left[ \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_+(-\epsilon_b; x)|^2 - \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} \phi_+^*(-\epsilon_b; x) \phi_-(-\epsilon_b; x) \right.$$

$$\left. + \tilde{b}_b^{(1)*} \tilde{a}_b^{(1)} \phi_-^*(-\epsilon_b; x) \phi_+(-\epsilon_b; x) - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_-(-\epsilon_b; x)|^2 \right],$$

$$\int_0^W \Psi^{(1)}(x, y) \frac{\partial}{\partial x} \Psi^{(1)*}(x, y) dy = - \sum_{b=1}^N ik_b \left[ \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_+(E_b; x)|^2 \right. \quad (2.105b)$$

$$\left. - \tilde{b}_b^{(1)*} \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+^2(E_b; x) + \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-^2(E_b; x) - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_-(E_b; x)|^2 \right]$$

$$- \sum_{b=N+1}^{\infty} \kappa_b \left[ \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_+(-\epsilon_b; x)|^2 - \tilde{b}_b^{(1)*} \tilde{a}_b^{(1)} \phi_+(-\epsilon_b; x) \phi_-^*(-\epsilon_b; x) \right.$$

$$\left. + \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} \phi_-(-\epsilon_b; x) \phi_+^*(-\epsilon_b; x) - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 |\phi_-(-\epsilon_b; x)|^2 \right].$$

Al introducir las expresiones de la ecuación (2.105) en la ecuación (2.55c), obtenemos el flujo del lado izquierdo:

$$\int_0^W j_x^{(1)}(x, y) dy = \frac{1}{2\pi\hbar} \left[ \sum_{b=1}^N \left( \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 \right) + i \sum_{b=N+1}^{\infty} \left( \tilde{b}_b^{(1)*} \tilde{a}_b^{(1)} - \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} \right) \right]. \quad (2.106)$$

La ecuación (2.106) es la expresión análoga de la ecuación (2.60) con la diferencia de que la ecuación (2.106) tiene un término extra que exhibe explícitamente la contribución de los canales cerrados.

**Flujo del lado derecho.** Haciendo un procedimiento análogo al que realizamos para obtener el flujo del lado izquierdo, obtenemos que el flujo del lado derecho está dado por la siguiente expresión:

$$\int_0^W j_x^{(2)}(x, y) dy = \frac{1}{2\pi\hbar} \left[ \sum_{b=1}^N \left( \left| \tilde{a}_b^{(2)} \right|^2 - \left| \tilde{b}_b^{(2)} \right|^2 \right) + i \sum_{b=N+1}^{\infty} \left( \tilde{b}_b^{(2)*} \tilde{a}_b^{(2)} - \tilde{a}_b^{(2)*} \tilde{b}_b^{(2)} \right) \right]. \quad (2.107)$$

Al introducir las ecuaciones (2.106) y (2.107) en la ecuación (2.55b), obtenemos que la conservación de flujo impone la siguiente relación entre las amplitudes del lado izquierdo y derecho:

$$\begin{aligned} & \sum_{b=1}^N \left( \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 + \left| \tilde{b}_b^{(2)} \right|^2 - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 - \left| \tilde{a}_b^{(2)} \right|^2 \right) \\ & + i \sum_{b=N+1}^{\infty} \left( \tilde{b}_b^{(1)*} \tilde{a}_b^{(1)} + \tilde{a}_b^{(2)*} \tilde{b}_b^{(2)} - \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} - \tilde{b}_b^{(2)*} \tilde{a}_b^{(2)} \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Al igual que la ecuación (2.62) la ecuación (2.108) es un escalar real, ya que ésta puede escribirse de la siguiente manera:

$$\sum_{b=1}^N \left( \left| \tilde{a}_b^{(1)} \right|^2 + \left| \tilde{b}_b^{(2)} \right|^2 - \left| \tilde{b}_b^{(1)} \right|^2 - \left| \tilde{a}_b^{(2)} \right|^2 \right) + 2Im \left[ \sum_{b=N+1}^{\infty} \left( \tilde{a}_b^{(1)*} \tilde{b}_b^{(1)} + \tilde{b}_b^{(2)*} \tilde{a}_b^{(2)} \right) \right] = 0. \quad (2.109)$$

Si en la relación de conservación de flujo de la ecuación (2.108) suponemos que no hay incidencia por canales cerrados, es decir,

$$\tilde{a}_b^{(1)} = 0 = \tilde{b}_b^{(2)}, \quad \forall b > N, \quad (2.110)$$

entonces recuperaremos la relación de conservación de flujo que obtuvimos en la ecuación (2.62).

### Relación de conservación de flujo para la matriz de dispersión extendida.

La ecuación (2.108) se puede expresar de manera matricial si utilizamos los vectores definidos en la ecuación (2.89). Al hacer lo anterior obtenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)\dagger} & \tilde{b}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)\dagger} & \tilde{a}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} \tilde{b}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{a}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} \\ & - i \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{b}_Q^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = 0. \end{aligned} \quad (2.111)$$

Utilizando la matriz de dispersión extendida, Ec. (2.94), podemos reexpresar la ecuación (2.111) únicamente en términos de los vectores de las amplitudes de las ondas entrantes  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ , ya que esta matriz nos permite expresar los vectores  $\tilde{b}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{b}_Q^{(1)}$  y  $\tilde{a}_Q^{(2)}$  de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \end{bmatrix} = \tilde{S}_{PP} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} + \tilde{S}_{PQ} \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \quad (2.112a)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_Q^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = \tilde{S}_{QP} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} + \tilde{S}_{QQ} \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \quad (2.112b)$$

lo cual permite calcular los correspondientes vectores adjuntos siendo éstos:

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)\dagger} & \tilde{a}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)\dagger} & \tilde{b}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \left( \tilde{S}_{PP} \right)^\dagger + \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \left( \tilde{S}_{PQ} \right)^\dagger, \quad (2.112c)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{a}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)\dagger} & \tilde{b}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \left( \tilde{S}_{QP} \right)^\dagger + \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \left( \tilde{S}_{QQ} \right)^\dagger. \quad (2.112d)$$

Al introducir las expresiones de la ecuación (2.112) en la ecuación (2.111) obtenemos que la conservación de flujo, Ec. (2.108), impone que la matriz de dispersión extendida satisfaga la siguiente relación:

$$\begin{pmatrix} \left( \tilde{S}_{PP} \right)^\dagger \tilde{S}_{PP} & \left( \tilde{S}_{PP} \right)^\dagger \tilde{S}_{PQ} \\ \left( \tilde{S}_{PQ} \right)^\dagger \tilde{S}_{PP} & \left( \tilde{S}_{PQ} \right)^\dagger \tilde{S}_{PQ} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_{2N} & i \left( \tilde{S}_{QP} \right)^\dagger \\ -i \tilde{S}_{QP} & i \left( \tilde{S}_{QQ} \right)^\dagger - i \tilde{S}_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (2.113)$$

En la ecuación (2.113) observamos que la conservación de flujo impone que el bloque  $\tilde{S}_{PP}$  satisfaga la misma relación de conservación de flujo que satisface la matriz de dispersión reducida, Ec. (2.66a), lo cual era de esperarse, ya que, como se muestra en la ecuación (2.95), la matriz de dispersión reducida es igual al bloque de canales abiertos de la matriz extendida. Las otras tres relaciones de conservación de flujo que involucran relaciones entre los diferentes bloques de la matriz de dispersión extendida, reflejan explícitamente la contribución de los canales cerrados en flujo cuando hay incidencia por los canales cerrados.

La ecuación (2.113) es un resultado que obtuvimos en el presente trabajo que se utilizará como medio de control del cálculo numérico que desarrollaremos en el Capítulo 6.4.

**Relación de conservación de flujo para la matriz de transferencia extendida.** Otra manera de expresar la conservación de flujo, Ec. (2.108), en términos de una relación matricial es la siguiente:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)\dagger} & \tilde{b}_P^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ -\tilde{b}_P^{(1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -i\tilde{b}_Q^{(1)} \\ i\tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)\dagger} & \tilde{b}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ -\tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(2)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -i\tilde{b}_Q^{(2)} \\ i\tilde{a}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.114)$$

o equivalentemente:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)\dagger} & \tilde{b}_P^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_z \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_y \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)\dagger} & \tilde{b}_P^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_z \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} \\ & + \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(2)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_y \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.115)$$

donde  $\Sigma_z$  es la matriz de  $2N \times 2N$  definida en la ecuación (2.68b) y  $\Sigma_y$  es una matriz de  $2N' \times 2N'$  definida de la siguiente manera:

$$\Sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -iI_{N'} \\ iI_{N'} & 0 \end{pmatrix}; \quad (2.116)$$

por lo tanto, la ecuación (2.115) puede reescribirse compactamente de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)\dagger} & \tilde{b}_P^{(1)\dagger} & \tilde{a}_Q^{(1)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(1)\dagger} \end{bmatrix} \Sigma_{Flux} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)\dagger} & \tilde{b}_P^{(2)\dagger} & \tilde{a}_Q^{(2)\dagger} & \tilde{b}_Q^{(2)\dagger} \end{bmatrix} \\ & \times \Sigma_{Flux} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.117)$$

donde hemos definido la matriz  $\Sigma_{Flux}$  de  $2(N + N') \times 2(N + N')$  elementos como:

$$\Sigma_{Flux} = \begin{pmatrix} \Sigma_z & 0 \\ 0 & \Sigma_y \end{pmatrix}. \quad (2.118)$$

La ecuación (2.117) puede expresarse únicamente en términos de los vectores  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(1)}$ , ya que los vectores  $\tilde{a}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(2)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$  pueden expresarse en términos de los primeros mediante la matriz de transferencia extendida, Ec. (2.98); por lo tanto, al hacer uso de la matriz de transferencia extendida se obtiene que la conservación de flujo impone que la matriz de transferencia extendida satisfaga la siguiente relación:

$$\tilde{M}^\dagger \Sigma_{Flux} \tilde{M} = \Sigma_{Flux}. \quad (2.119)$$

A pesar de la semejanza que hay entre las relaciones de conservación de flujo de la matriz de transferencia reducida, Ec. (2.70), y de la extendida (2.119) no es posible extraer la relación de conservación de flujo de la matriz de transferencia extendida, ya que como mostramos en la ecuación (2.101) la matriz de transferencia reducida  $M$  no es igual al bloque de canales abiertos de la matriz de transferencia extendida  $\tilde{M}_{PP}$ .

### Propiedad de invariancia ante inversiones temporales

Para obtener la relación de invariancia ante inversiones temporales de las matrices extendidas debemos obtener la expresión análoga a la ecuación (2.74a), pero ahora las funciones  $[\psi(x)]_b^*$  que debemos utilizar en las regiones 1 y 2 de la figura 2.3, se obtienen al conjugar las ecuaciones (2.90) y (2.91) obteniendo así:

$$[\psi(x)]_b^* = \tilde{b}_b^{(1)*} \phi_+(E_b; x) + \tilde{a}_b^{(1)*} \phi_-(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.120a)$$

$$[\psi(x)]_b^* = i\tilde{a}_b^{(1)*} \phi_+(-\epsilon_b; x) + i\tilde{b}_b^{(1)*} \phi_-(-\epsilon_b; x), \quad b > N \quad (2.120b)$$

en la región 1 y

$$[\psi(x)]_b^* = \tilde{a}_b^{(2)*} \phi_-(E_b; x) + \tilde{b}_b^{(2)*} \phi_+(E_b; x), \quad 1 \leq b \leq N \quad (2.121a)$$

$$[\psi(x)]_b^* = i\tilde{b}_b^{(2)*} \phi_-(-\epsilon_a; x) + i\tilde{a}_b^{(2)*} \phi_+(-\epsilon_a; x), \quad b > N, \quad (2.121b)$$

en la región 2. En las ecuaciones (2.120b) y (2.121b) hemos utilizado la siguiente identidad para las funciones de canales cerrados  $\phi_\pm(-\epsilon_b; x)$ ,

$$\phi_\pm^*(-\epsilon_b; x) = i\phi_\pm(-\epsilon_b; x), \quad (2.122)$$

que puede obtenerse fácilmente de la ecuación (2.21a).

**Relación de invariancia ante inversiones temporales de la matriz de dispersión extendida.** De las ecuaciones (2.120) y (2.121) observamos que en la solución  $\Psi_{rev}(x, y)$ , Ec. (2.74a), las amplitudes de las ondas incidentes de canales abiertos son:

$$\tilde{b}_b^{(1)*}, \quad \tilde{a}_b^{(2)*}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.123a)$$

mientras que las de canales cerrados son:

$$i\tilde{a}_b^{(1)*}, \quad i\tilde{b}_b^{(2)*}, \quad b > N; \quad (2.123b)$$

análogamente, se observa que las amplitudes de las ondas salientes de canales abiertos son:

$$\tilde{a}_b^{(1)*}, \quad \tilde{b}_b^{(2)*}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.124a)$$

mientras que las de canales cerrados son:

$$i\tilde{b}_b^{(1)*}, \quad i\tilde{a}_b^{(2)*}, \quad b > N. \quad (2.124b)$$

Si utilizamos la matriz de dispersión extendida, Ec. (2.94) y los vectores definidos en la ecuación (2.89), podemos expresar las amplitudes salientes, Ec. (2.124), en términos de las amplitudes incidentes, Ec. (2.123), mediante la siguiente relación matricial:

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)*} \\ \tilde{b}_P^{(2)*} \\ i\tilde{b}_Q^{(1)*} \\ i\tilde{a}_Q^{(2)*} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{PP} & \tilde{S}_{PQ} \\ \tilde{S}_{QP} & \tilde{S}_{QQ} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)*} \\ \tilde{a}_P^{(2)*} \\ i\tilde{a}_Q^{(1)*} \\ i\tilde{b}_Q^{(2)*} \end{bmatrix}, \quad (2.125a)$$

de la cual obtenemos que

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} = \tilde{S}_{PP}^* \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \end{bmatrix} - i\tilde{S}_{PQ}^* \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \quad (2.125b)$$

$$-i \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \end{bmatrix} = \tilde{S}_{QP}^* \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \end{bmatrix} - i\tilde{S}_{QQ}^* \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}. \quad (2.125c)$$

Con ayuda de las ecuaciones (2.125b) y (2.125c) podemos expresar las ecuaciones (2.112a) y (2.112b) únicamente en términos de los vectores de las amplitudes incidentes  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ , obteniendo así

$$\left[ \tilde{S}_{PP}^* \tilde{S}_{PP} - I_N \right] \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} + \left[ \tilde{S}_{PP}^* \tilde{S}_{PQ} - i\tilde{S}_{PQ}^* \right] \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = 0, \quad (2.126a)$$

$$\left[ \tilde{S}_{QP}^* \tilde{S}_{PP} + i\tilde{S}_{QP} \right] \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \end{bmatrix} + \left[ \tilde{S}_{QP}^* \tilde{S}_{PQ} - i(\tilde{S}_{QQ}^* - \tilde{S}_{QQ}) \right] \begin{bmatrix} \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = 0. \quad (2.126b)$$

De la ecuación (2.126) podemos obtener que la invariancia ante inversiones temporales impone que la matriz de dispersión extendida satisfaga la siguiente relación:

$$\begin{pmatrix} \tilde{S}_{PP}^* \tilde{S}_{PP} & \tilde{S}_{PP}^* \tilde{S}_{PQ} \\ \tilde{S}_{QP}^* \tilde{S}_{PP} & \tilde{S}_{QP}^* \tilde{S}_{PQ} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_N & i\tilde{S}_{PQ}^* \\ -i\tilde{S}_{QP} & i(\tilde{S}_{QQ}^* - \tilde{S}_{QQ}) \end{pmatrix}, \quad (2.127a)$$

donde observamos que el bloque de canales abiertos satisface la misma relación que la matriz de dispersión reducida, Ec. (2.78a), lo cual era de esperarse. Al combinar la ecuación (2.127a) con la expresión de conservación de flujo, Ec. (2.113), se obtiene

$$\tilde{S} = \tilde{S}^T, \quad (2.127b)$$

que es la relación análoga a la que se obtuvo para la matriz de dispersión reducida, Ec. (2.78b). La ecuación (2.127b) puede expresarse en términos de las matrices de reflexión y transmisión extendidas obteniendo así:

$$\tilde{r} = \tilde{r}^T, \quad \tilde{r}' = \tilde{r}'^T, \quad \tilde{t}' = \tilde{t}'^T. \quad (2.127c)$$

**Relación de invariancia ante inversiones temporales de la matriz de transferencia extendida.** De las ecuaciones (2.120) y (2.121) observamos que en la solución  $\Psi_{rev}(x, y)$ , Ec. (2.74a), las amplitudes de las ondas en la región 1 que viajan a la derecha son:

$$\tilde{b}_b^{(1)*}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.128a)$$

$$i\tilde{a}_b^{(1)*}, \quad b > N, \quad (2.128b)$$

mientras que las amplitudes de las ondas que viajan a la izquierda son:

$$\tilde{a}_b^{(1)*}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.128c)$$

$$i\tilde{b}_b^{(1)*}, \quad b > N; \quad (2.128d)$$

análogamente, las amplitudes de las ondas en la región 2 que viajan a la derecha son:

$$\tilde{b}_b^{(2)*}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.129a)$$

$$i\tilde{a}_b^{(2)*}, \quad b > N, \quad (2.129b)$$

mientras que las amplitudes de las ondas que viajan a la izquierda son:

$$\tilde{a}_b^{(2)*}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.129c)$$

$$i\tilde{b}_b^{(2)*}, \quad b > N. \quad (2.129d)$$

Si utilizamos la matriz de transferencia extendida, Ec. (2.98), podemos relacionar las amplitudes de la región 2, Ec. (2.129), con las amplitudes de la región 1, Ec. (2.128), mediante la siguiente relación matricial:

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_b^{(2)*} \\ \tilde{a}_b^{(2)*} \\ i\tilde{a}_b^{(2)*} \\ i\tilde{b}_b^{(2)*} \end{bmatrix} = \tilde{M} \begin{bmatrix} \tilde{b}_b^{(1)*} \\ \tilde{a}_b^{(1)*} \\ i\tilde{a}_b^{(1)*} \\ i\tilde{b}_b^{(1)*} \end{bmatrix}, \quad (2.130a)$$

la cual podemos reescribir de la siguiente manera:

$$\Sigma_{TRI} \begin{bmatrix} \tilde{a}_b^{(2)} \\ \tilde{b}_b^{(2)} \\ \tilde{a}_b^{(2)} \\ \tilde{b}_b^{(2)} \end{bmatrix}^* = \tilde{M} \Sigma_{TRI} \begin{bmatrix} \tilde{a}_b^{(1)} \\ \tilde{b}_b^{(1)} \\ \tilde{a}_b^{(1)} \\ \tilde{b}_b^{(1)} \end{bmatrix}^*, \quad (2.130b)$$

En la ecuación (2.130b) hemos introducido la matriz  $\Sigma_{TRI}$ , la cual se expresa de la siguiente manera:

$$\Sigma_{TRI} = \begin{bmatrix} \Sigma_x & 0_{N \times N'} \\ 0_{N' \times N} & iI_{N'} \end{bmatrix}, \quad (2.131a)$$

donde la matriz  $\Sigma_x$  es la matriz definida en la ecuación (2.81a), mientras que la matriz  $I_{N'}$  es la matriz identidad de dimensión  $N'$ . Es fácil ver de la ecuación (2.131a) que la matriz  $\Sigma_{TRI}$  tiene la siguiente propiedad:

$$\Sigma_{TRI}^* \Sigma_{TRI} = I_{N+N'}. \quad (2.131b)$$

Utilizando la ecuación (2.98) en el lado izquierdo de la ecuación (2.130a) y aplicando la propiedad de la ecuación (2.131), obtenemos que la invariancia ante inversiones temporales impone que la matriz de transferencia extendida satisfaga la siguiente relación matricial:

$$\widetilde{M}^* = \Sigma_{TRI}^* \widetilde{M} \Sigma_{TRI}. \quad (2.132)$$

Las relaciones de invariancia ante inversiones temporales que satisfacen las matrices de transferencia reducida y extendida, Ecs. (2.82c) y (2.132), respectivamente, tienen estructuras similares; sin embargo, la relación de invariancia ante inversiones temporales que satisface la matriz de transferencia reducida, Ec. (2.82c), no puede obtenerse de la ecuación (2.132), ya que  $M \neq M_{PP}$ .

### Las matrices de dispersión y transferencia de un sistema compuesto

La última propiedad que discutiremos de las matrices de dispersión y de transferencia es la manera en que se obtienen las matrices de dispersión y transferencia de sistemas compuestos: es decir, consideremos que el sistema que se encuentra entre la región 1 y 2 de la figura 2.3 es a su vez un sistema compuesto por dos subsistemas: ver figura 2.4. Supongamos que el sistema compuesto tiene matrices de dispersión y transferencia totales  $\widetilde{S}$  y  $\widetilde{M}$ :

$$\widetilde{S} = \begin{pmatrix} \widetilde{r} & \widetilde{t}' \\ \widetilde{t} & \widetilde{r}' \end{pmatrix}, \quad \widetilde{M} = \begin{pmatrix} \widetilde{\alpha}_1 & \widetilde{\beta}_1 \\ \widetilde{\gamma}_1 & \widetilde{\delta}_1 \end{pmatrix}, \quad (2.133a)$$

respectivamente, mientras que los subsistemas que lo constituyen tienen matrices  $\widetilde{S}_1$ ,  $\widetilde{M}_1$ ,  $\widetilde{S}_2$  y  $\widetilde{M}_2$

$$\widetilde{S}_1 = \begin{pmatrix} \widetilde{r}_1 & \widetilde{t}'_1 \\ \widetilde{t}_1 & \widetilde{r}'_1 \end{pmatrix}, \quad \widetilde{M}_1 = \begin{pmatrix} \widetilde{\alpha}_1 & \widetilde{\beta}_1 \\ \widetilde{\gamma}_1 & \widetilde{\delta}_1 \end{pmatrix}, \quad (2.133b)$$

$$\widetilde{S}_2 = \begin{pmatrix} \widetilde{r}_2 & \widetilde{t}'_2 \\ \widetilde{t}_2 & \widetilde{r}'_2 \end{pmatrix}, \quad \widetilde{M}_2 = \begin{pmatrix} \widetilde{\alpha}_2 & \widetilde{\beta}_2 \\ \widetilde{\gamma}_2 & \widetilde{\delta}_2 \end{pmatrix}, \quad (2.133c)$$

respectivamente. El objetivo es obtener las matrices de dispersión y transferencia totales en función de las individuales, es decir:

$$\widetilde{S} = \widetilde{S}(\widetilde{S}_1, \widetilde{S}_2), \quad (2.134a)$$

$$\widetilde{M} = \widetilde{M}(\widetilde{M}_1, \widetilde{M}_2). \quad (2.134b)$$

La obtención de las matrices de dispersión y transferencia del sistema compuesto debe hacerse en términos de las matrices extendidas y no de las reducidas, ya que debe tomarse en cuenta la incidencia a través de canales cerrados.

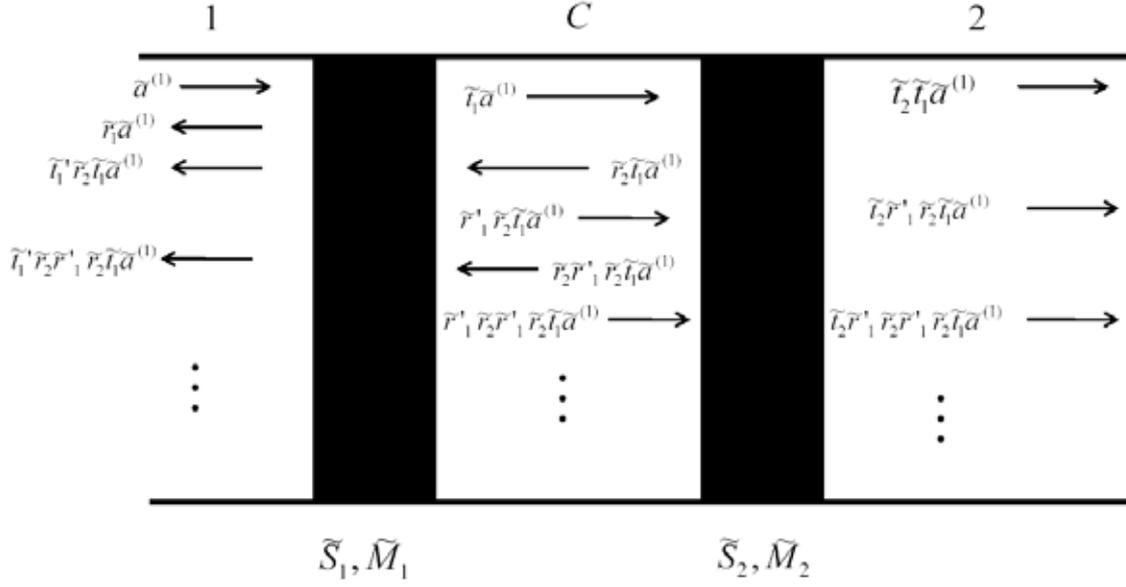


Figura 2.4: Contribución de la dispersión múltiple (producida en la región  $C$ ) a las matrices de dispersión extendidas totales  $\tilde{t}$  y  $\tilde{r}$  del sistema compuesto por dos subsistemas .

**La matriz de dispersión extendida de dos potenciales.** Para calcular la matriz de dispersión total  $\tilde{S}$  del sistema compuesto consideremos que en la región 1 las amplitudes de las ondas que inciden, tanto por canales abiertos como por cerrados, están agrupadas en los vectores  $\tilde{a}_P^{(1)}$  y  $\tilde{a}_Q^{(1)}$  (ver figura 2.4), que por comodidad agruparemos en el vector  $\tilde{a}^{(1)}$  siendo éste:

$$\tilde{a}^{(1)} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix}. \quad (2.135)$$

Como se muestra en la figura 2.4, cuando las ondas, cuyas amplitudes se agrupan en el vector  $\tilde{a}^{(1)}$ , inciden sobre el sistema 1, se producirá un grupo de ondas que se refleja hacia la región 1, dado por el vector  $\tilde{r}_1 \tilde{a}^{(1)}$ , y un grupo de ondas que se transmite a la región  $C$ , dado por el vector  $\tilde{t}_1 \tilde{a}^{(1)}$ . El grupo de ondas que se transmite a la región  $C$  será el “primer grupo” de ondas que incidirá sobre el sistema 2 produciendo así un grupo de ondas que se refleja a la región  $C$ , dado por el vector  $\tilde{r}_2 \tilde{t}_1 \tilde{a}^{(1)}$ , y un grupo de ondas que se transmite a la región 2, dado por el vector  $\tilde{t}_2 \tilde{t}_1 \tilde{a}^{(1)}$ . Como se muestra en la figura 2.4 las ondas representadas por el vector  $\tilde{t}_1 \tilde{a}^{(1)}$  producirán dispersión múltiple en la región  $C$  lo cual dará lugar a una serie de ondas transmitidas a la izquierda del sistema 1 y a otra serie de ondas transmitidas a la derecha del sistema 2. El resultado neto será que el sistema compuesto por los sistemas 1 y 2 reflejará y transmitirá grupos de ondas dados por lo siguientes vectores:

$$\tilde{r} \tilde{a}^{(1)} = \tilde{r}_1 \tilde{a}^{(1)} + \tilde{t}_1' \tilde{r}_2 [I + (\tilde{r}_1' \tilde{r}_2) + (\tilde{r}_1' \tilde{r}_2) (\tilde{r}_1' \tilde{r}_2) + \dots] \tilde{t}_1 \tilde{a}^{(1)}, \quad (2.136a)$$

$$\tilde{t} \tilde{a}^{(1)} = \tilde{t}_2 [I + (\tilde{r}_1' \tilde{r}_2) + (\tilde{r}_1' \tilde{r}_2) (\tilde{r}_1' \tilde{r}_2) + \dots] \tilde{t}_1 \tilde{a}^{(1)}. \quad (2.136b)$$

Es fácil ver de la ecuación (2.136), que las amplitudes de reflexión  $\tilde{r}$  y transmisión  $\tilde{t}$  del sistema compuesto están dadas por las siguientes expresiones:

$$\tilde{r} = \tilde{r}_1 + \tilde{t}_1 \tilde{r}_2 \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_1' \tilde{r}_2} \right] \tilde{t}_1, \quad (2.137a)$$

$$\tilde{t} = \tilde{t}_2 \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_1' \tilde{r}_2} \right] \tilde{t}_1. \quad (2.137b)$$

Mediante un procedimiento análogo se puede mostrar que las amplitudes de reflexión  $\tilde{r}'$  y transmisión  $\tilde{t}'$  del sistema compuesto están dadas por las siguientes expresiones:

$$\tilde{r}' = \tilde{r}_2' + \tilde{t}_2 \tilde{r}_1' \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_2 \tilde{r}_1'} \right] \tilde{t}_2', \quad (2.138a)$$

$$\tilde{t}' = \tilde{t}_1' \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_2 \tilde{r}_1'} \right] \tilde{t}_2'; \quad (2.138b)$$

por lo tanto, la matriz de dispersión extendida  $\tilde{S}$  del sistema compuesto se puede obtener de las matrices de dispersión individuales  $\tilde{S}_1$  y  $\tilde{S}_2$  mediante la siguiente relación:

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} \tilde{r}_1 + \tilde{t}_1 \tilde{r}_2 \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_1' \tilde{r}_2} \right] \tilde{t}_1 & \tilde{t}_1 \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_2 \tilde{r}_1'} \right] \tilde{t}_2' \\ \tilde{t}_2 \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_1' \tilde{r}_2} \right] \tilde{t}_1 & \tilde{r}_2' + \tilde{t}_2 \tilde{r}_1' \left[ \frac{I}{I - \tilde{r}_2 \tilde{r}_1'} \right] \tilde{t}_2' \end{pmatrix}. \quad (2.139)$$

**La matriz de transferencia extendida de dos potenciales.** Obtener la matriz de transferencia del sistema compuesto es muy fácil ya que las amplitudes de las ondas en la región  $C$  están relacionadas con las amplitudes de la región 1 mediante la relación matricial:

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(C)} \\ \tilde{a}_Q^{(C)} \\ \tilde{b}_P^{(C)} \\ \tilde{b}_Q^{(C)} \end{bmatrix} = \tilde{M}_1 \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (2.140a)$$

mientras que las amplitudes de las ondas en la región 2 están relacionadas con las amplitudes de las ondas de la región  $C$  a través de la siguiente relación:

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = \tilde{M}_2 \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(C)} \\ \tilde{a}_Q^{(C)} \\ \tilde{b}_P^{(C)} \\ \tilde{b}_Q^{(C)} \end{bmatrix}. \quad (2.140b)$$

Utilizando la ecuación (2.140a) en la ecuación (2.140b) se pueden expresar las amplitudes de la región 2 en términos de las amplitudes de la región 1, obteniendo así:

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = \widetilde{M}_2 \widetilde{M}_1 \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix} = \widetilde{M} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix}. \quad (2.141a)$$

En conclusión, la *matriz de transferencia extendida* de un sistema compuesto es el producto de las matrices de transferencia extendidas de los subsistemas que lo constituyen, es decir:

$$\widetilde{M} = \widetilde{M}_2 \widetilde{M}_1. \quad (2.141b)$$

La forma de combinar matrices de transferencia extendidas, Ec. (2.141b), es mucho más sencilla que aquella en la que se combinan las matrices de dispersión extendidas, Ec. (2.139). Es por esta razón que la parte central del presente trabajo se basa en el método de la matriz de transferencia, ya que, como veremos en el Capítulo 4 la propiedad de multiplicatividad de las matrices de transferencia, Ec. (2.141b), nos permitirá obtener el resultado principal del presente trabajo: la ecuación de Difusión, Ec. (4.41). Por otro lado, las simulaciones que realizaremos en los capítulos 6 y 7 estarán basadas en la combinación de matrices de dispersión, Ec. (2.139), ya que numéricamente la matriz de dispersión es más estable.

## 2.6. La serie de Born

### 2.6.1. La serie de Born en el caso de una guía de ondas bidimensional

Otro concepto importante en el estudio de la dispersión es la *serie de Born*, la cual permite obtener una solución aproximada del problema de la dispersión. Como vimos en la sección 1.4 la serie de Born se obtiene al sustituir la expresión integral de la ecuación Lippmann-Schwinger, Ec. (1.60), en el integrando de la misma. Como mostramos en las ecuaciones (1.64)-(1.67), al realizar este procedimiento de manera sucesiva obtenemos la *serie de Born* de la función de onda. Una vez que se obtiene esta serie para la función de onda, ésta se utiliza para obtener las cantidades de interés: por ejemplo, en la ecuación (1.68) obtuvimos la primera aproximación de Born de la amplitud de dispersión  $f(\vartheta, \phi)$  que a su vez utilizamos para obtener la primera aproximación de Born de la sección transversal diferencial (1.69).

En esta última sección obtendremos la serie de Born de nuestro problema particular, lo cual haremos a partir de las ecuaciones de Lippmann-Schwinger, Ec. (2.28), para obtener la serie de las funciones de onda longitudinales  $\left[ \psi_{sa_0}^{(+)}(E; x) \right]_a$ .

En la obtención de la serie de Born de las funciones de onda  $\left[ \psi_{sa_0}^{(+)}(E; x) \right]_a$  que expondremos aquí, sólo consideraremos la situación en la que se incide por la izquierda en un canal abierto  $a_0$ , por lo que el índice  $s$  que determina la dirección en la que se

incide tomará el valor  $s = +$ . Una vez que hayamos obtenido las series de Born de las funciones de onda longitudinales  $\left[\psi_{+a_0}^{(+)}(E; x)\right]_a$ , éstas se usarán para obtener las series de Born de las amplitudes de reflexión  $r_{aa_0}$  y de transmisión  $t_{aa_0}$  de canales abiertos (con  $a_0$  y  $a$  índices de canal abierto), Ecs. (2.32a) y (2.34a), y sus correspondientes intensidades. Las series de Born de las amplitudes de transmisión  $t_{aa_0}$  y de reflexión  $r_{aa_0}$  de canales cerrados (con  $a_0$  índice de canal abierto y  $a$  índice de canal cerrado), Ecs. (2.32b) y (2.34b), no nos interesarán, pero éstas podrían obtenerse con el mismo método que expondremos en esta sección.

Para obtener la serie de Born de las cantidades de interés es oportuno hacer algunos comentarios aclaratorios, así como recordar las algunas cantidades presentadas en la secciones previas:

- Para obtener la serie de Born de las funciones de onda  $\left[\psi_{+a_0}^{(+)}(E; x)\right]_a$ , deberemos hacer la iteración en las ecuaciones de Lippmann-Schwinger (2.28) tanto para canales abiertos,  $1 \leq a \leq N$ , como para canales cerrados,  $a > N$ , ya que el integrando del lado derecho de las ecuaciones de Lippmann-Schwinger involucra una suma sobre canales abiertos y cerrados.
- Debido a que sólo nos interesarán las series de Born de las amplitudes de reflexión  $r_{aa_0}$ , Ec. (2.32a), y de transmisión  $t_{aa_0}$ , Ec. (2.34a), de canales abiertos sólo utilizaremos las funciones de canales abiertos  $\phi_{\pm}(E_a; x)$ , Ec. (2.10a), mientras que las funciones de canales cerrados  $\phi_{\pm}(-\epsilon_a; x)$ , Ec. (2.21a), no aparecerán en la descripción que haremos.
- A pesar de que las funciones de canales cerrados, Ec. (2.21a), no aparecerán en nuestro tratamiento, las funciones de Green de canales cerrados sí lo harán, ya que al hacer la iteración de las ecuaciones de Lippmann-Schwinger, Ec. (2.28), debemos trabajar con las funciones de onda  $\left[\psi_{+a_0}^{(+)}(E; x)\right]_a$  tanto de canales abiertos como de cerrados: es decir, necesitaremos utilizar tanto las funciones de Green de canales abiertos  $g_0^{(+)}(E_a; x - x')$ , Ec. (2.26a), como las de cerrados  $g_0^{(+)}(-\epsilon_a; x - x')$ , Ec. (2.26b). Lo anterior dará lugar a una contribución explícita de los canales cerrados en las series de Born de las amplitudes de canales abiertos  $r_{aa_0}$  y  $t_{aa_0}$ .
- Es fácil ver que las funciones de onda longitudinales y las funciones de Green de canales cerrados, Ecs. (2.21a) y (2.26b), se pueden obtener de sus análogas de canales abiertos, Ecs. (2.10a) y (2.26a), haciendo el cambio  $k_a \rightarrow i\kappa_a$ . Como veremos mas adelante este hecho nos ayudará a manejar una notación más cómoda.

### Notación, convención y definiciones

Por comodidad es conveniente utilizar la siguiente notación para las funciones de onda y para las funciones de Green:

$$\varphi_{\pm}(k_b; x) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2 k_b}{m}} \phi_{\pm}(E_b; x) = e^{\pm ik_b x}, \quad (2.142a)$$

$$\left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2 k_b}{m}} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.142b)$$

$$\left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2 i\kappa_b}{m}} \left[ \psi_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_b, \quad b > N, \quad (2.142c)$$

$$\tilde{g}_0^{(+)}(k_b; x - x') = 2ik_b g_0^{(+)}(E_b; x - x') = e^{ik_b |x - x'|}, \quad (2.142d)$$

$$\tilde{g}_0^{(+)}(\kappa_b; x - x') = 2i(i\kappa_b) g_0^{(+)}(-\epsilon_b; x - x') = e^{-\kappa_b |x - x'|}. \quad (2.142e)$$

De igual manera, es conveniente definir un “potencial” sin unidades de la siguiente manera:

$$\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x) = \Gamma(ab) \mathcal{V}_{ab}(x), \quad (2.143a)$$

donde  $\mathcal{V}_{ab}(x)$  es una cantidad real definida de la siguiente manera:

$$\mathcal{V}_{ab}(x) = \frac{U_{ab}(x)}{2\sqrt{k_a k_b}}, \quad 1 \leq a, b \leq N, \quad (2.143b)$$

$$\mathcal{V}_{ab}(x) = \frac{U_{ab}(x)}{2\sqrt{\kappa_a k_b}}, \quad a > N, 1 \leq b \leq N, \quad (2.143c)$$

$$\mathcal{V}_{ab}(x) = \frac{U_{ab}(x)}{2\sqrt{k_a \kappa_b}}, \quad 1 \leq a \leq N, b > N, \quad (2.143d)$$

$$\mathcal{V}_{ab}(x) = \frac{U_{ab}(x)}{2\sqrt{\kappa_a \kappa_b}}, \quad a, b > N, \quad (2.143e)$$

mientras que los factores  $\Gamma(ab)$  se definen mediante las siguientes reglas:

$$\Gamma(ab) = 1, \quad 1 \leq a, b \leq N, \quad (2.144a)$$

$$\Gamma(ab) = e^{-i\pi/4}, \quad a > N, 1 \leq b \leq N, \quad (2.144b)$$

$$\Gamma(ab) = e^{-i\pi/4}, \quad 1 \leq a \leq N, b > N, \quad (2.144c)$$

$$\Gamma(ab) = -i, \quad a, b > N. \quad (2.144d)$$

Es importante recordar que la cantidad de relevancia física es el potencial  $U_{ab}(x)$  que aparece en la ecuación (2.24), el cual es una cantidad *real*; por otro lado, la cantidad  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$ , que puede tomar valores complejos [ver ecuación (2.143)], se definió por *conveniencia*, ya que ésta [y las cantidades definidas en la ecuación (2.142)] facilita el manejo de la serie de Born; es decir, en ningún momento hemos considerado un potencial complejo. Es importante tener presente esto, ya que un potencial complejo representa un sistema que permite absorción, por lo que no se cumple la conservación de flujo.

La Ec. (2.143a) define las cantidades  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$  en términos del potencial original  $U_{ab}(x)$ , de los números de onda longitudinal  $k_a, k_b$ , de los factores de atenuación  $\kappa_a, \kappa_b$ , Ecs. (2.143b)-(2.143e) y los factores  $\Gamma(ab)$ . De la ecuación (2.144) también se observa que, en general, los elementos de matriz  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$  son cantidades complejas y, debido a la ecuación (2.18), simétricas ante el cambio  $a \leftrightarrow b$ .

Con el objeto de simplificar los cálculos y la notación, de ahora en adelante utilizaremos la siguiente convención: a) si el índice  $b$  representa un canal abierto entonces  $k_b$  será una cantidad real positiva definida, b) si  $b$  representa un canal cerrado, la cantidad  $k_b$  será una cantidad imaginaria pura cuya parte imaginaria es positiva definida, lo cual equivale a aplicar la regla  $k_a \rightarrow i\kappa_a$  ( $E_a \rightarrow -\epsilon_a$ ) en las Ecs. (2.142b) y (2.142d) para obtener las Ecs. (2.142c) y (2.142d), respectivamente. Esta convención nos permite denotar las funciones de Green de canales abiertos y cerrados de una misma manera, es decir:

$$\tilde{g}_0^{(+)}(k_b; x - x') \rightarrow e^{ik_b|x-x'|}, \quad 1 \leq b \leq N, \quad (2.145a)$$

$$\tilde{g}_0^{(+)}(k_b; x - x') \rightarrow e^{-\kappa_b|x-x'|}, \quad b > N. \quad (2.145b)$$

Lo anterior puede parecer intrincado, pero como veremos más adelante estas definiciones nos simplificarán la obtención de la serie de Born de las cantidades que nos interesan.

Utilizando las definiciones que acabamos de introducir reescribiremos las ecuaciones que serán necesarias para obtener las series de Born de las amplitudes de transmisión  $t_{aa_0}$  y de reflexión  $r_{aa_0}$  en el canal abierto  $a$  habiendo incidido por el canal abierto  $a_0$ . Utilizando las ecuaciones (2.142), (2.144) y (2.145) se obtiene que las ecuaciones de Lippmann-Schwinger, Ec. (2.28), se reescriben de la siguiente manera:

$$\left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_a = \varphi_+(k_a; x) \delta_{aa_0} \quad (2.146a)$$

$$+ (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \int \tilde{g}_0^{(+)}(k_a; x - x') \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x') \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x') \right]_b dx',$$

$$\left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x) \right]_a = (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \int \tilde{g}_0^{(+)}(k_a; x - x') \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x') \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x') \right]_b dx', \quad (2.146b)$$

mientras que las amplitudes de reflexión  $r_{aa_0}$ , Ec. (2.32a), y de transmisión  $t_{aa_0}$ , Ec. (2.34a), se reescriben como:

$$r_{aa_0} = (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \int \varphi_+(k_a; x') \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x') \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x') \right]_b dx' \quad (2.146c)$$

$$t_{aa_0} = \delta_{aa_0} + (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \int \varphi_-(k_a; x') \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x') \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E; x') \right]_b dx'. \quad (2.146d)$$

Para facilitar la iteración de la función de onda y por ende de las amplitudes de interés, escribiremos las expresiones de la ecuación (2.146) en “notación de Dirac”, es decir:

$$\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_a \right\rangle = |\varphi_+(k_a)\rangle \delta_{aa_0} \quad (2.147a)$$

$$+ (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \tilde{g}_0^{(+)}(k_a) \tilde{\mathcal{V}}_{ab} \left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle \quad 1 \leq a \leq N,$$

$$\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_a \right\rangle = (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \tilde{g}_0^{(+)}(k_a \rightarrow i\kappa_a) \tilde{\mathcal{V}}_{ab} \left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle \quad N < a, \quad (2.147b)$$

$$t_{aa_0} = \delta_{aa_0} + (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \langle \varphi_+(k_a) | \tilde{\mathcal{V}}_{ab} | \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \rangle, \quad (2.147c)$$

$$r_{aa_0} = (-i) \sum_{b=1}^{\infty} \langle \varphi_-(k_a) | \tilde{\mathcal{V}}_{ab} | \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \rangle. \quad (2.147d)$$

Debe aclararse que la ecuación (2.147) no representa el vector de estado, ya que hace falta tomar en cuenta la función de onda transversal, Ec. (2.5). La notación utilizada en la ecuación (2.147) es cómoda para obtener las series de Born de nuestro interés y sólo la utilizaremos en esta sección.

### 2.6.2. Obtención de la serie de Born

Es relativamente fácil hacer la primera iteración de las componentes de la función de onda Ecs. (2.147a)-(2.147b), lo cual da el siguiente resultado:

$$\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle = \left[ \delta_{ba_0} + (-i) \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{ba_0} \right] |\varphi_+(k_{a_0})\rangle \quad (2.148a)$$

$$+ (-i)^2 \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{bb_1} \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_1}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1 b_2} \left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_{b_2} \right\rangle,$$

para canales abiertos  $1 \leq b \leq N$  y

$$\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle = (-i) \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{ba_0} |\varphi_+(k_{a_0})\rangle \quad (2.148b)$$

$$+ (-i)^2 \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{bb_1} \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_1}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1 b_2} \left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_{b_2} \right\rangle,$$

para canales cerrados  $N < b$ . Después de hacer la segunda iteración se obtiene la regla general para la  $n$ -ésima iteración obteniendo así que la serie de Born del ket  $\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle$  de canales abiertos se puede escribir compactamente de la siguiente manera:

$$\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle = \left[ \delta_{ba_0} + (-i) \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{ba_0} \right. \quad (2.149a)$$

$$\left. + \sum_{p=2}^{\infty} (-i)^p \sum_{b_1 \dots b_p} \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{bb_1} \left( \prod_{n=2}^p \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_{n-1}}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_{n-1} b_n} \right) \delta_{b_p a_0} \right] |\varphi_+(k_{a_0})\rangle, \quad 1 \leq b \leq N,$$

mientras que la serie de Born del ket  $\left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle$  de canales cerrados se escribe como:

$$\begin{aligned} \left| \left[ \tilde{\psi}_{+a_0}^{(+)}(E) \right]_b \right\rangle &= \left[ (-i) \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{ba_0} \right. \\ &\left. + \sum_{p=2}^{\infty} (-i)^p \sum_{b_1 \dots b_p} \tilde{g}_0^{(+)}(k_b) \tilde{\mathcal{V}}_{bb_1} \left( \prod_{n=2}^p \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_{n-1}}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_{n-1}b_n} \right) \delta_{b_p a_0} \right] |\varphi_+(k_{a_0})\rangle, \quad b > N. \end{aligned} \quad (2.149b)$$

Al introducir las expresiones de la ecuación (2.149) en las ecuaciones (2.147c)-(2.147d) se obtienen las series de Born de las amplitudes de transmisión y reflexión de canales abiertos, siendo éstas:

$$\begin{aligned} t_{aa_0} &= \delta_{aa_0} + (-i) \left\langle \varphi_+(k_a) \left| \tilde{\mathcal{V}}_{aa_0} \right| \varphi_+(k_{a_0}) \right\rangle \\ &\quad + \sum_{p=2}^{\infty} (-i)^p \sum_{b_1 \dots b_p} \left\langle \varphi_+(k_a) \left| \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1} \left( \prod_{n=2}^p \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_{n-1}}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_{n-1}b_n} \right) \delta_{b_p a_0} \right| \varphi_+(k_{a_0}) \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.150a)$$

$$\begin{aligned} r_{aa_0} &= (-i) \left\langle \varphi_-(k_a) \left| \tilde{\mathcal{V}}_{aa_0} \right| \varphi_+(k_{a_0}) \right\rangle \\ &\quad + \sum_{p=2}^{\infty} (-i)^p \sum_{b_1 \dots b_p} \left\langle \varphi_-(k_a) \left| \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1} \left( \prod_{n=2}^p \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_{n-1}}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_{n-1}b_n} \right) \delta_{b_p a_0} \right| \varphi_+(k_{a_0}) \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.150b)$$

Las ecuaciones (2.149a)-(2.150) son las series de Born que estábamos buscando. Una vez que tenemos las series de  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$  podemos obtener las series de las intensidades  $T_{aa_0}$ ,  $R_{aa_0}$  y cualquier otra observable relacionada con los elementos de matriz de la matriz de dispersión reducida  $S$ .

Es importante hacer notar que hasta el momento no se ha supuesto ninguna dependencia del potencial  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$ , por lo que las expresiones (2.149a)-(2.150) son expresiones generales válidas para cualquier potencial.

#### Cuarto orden de la serie de Born de las observables $t_{aa_0}$ , $T_{aa_0}$ , $r_{aa_0}$ y $R_{aa_0}$ .

Aunque las expresiones de la ecuación (2.150) nos dan toda la serie de Born de las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$ , el cálculo de los diferentes ordenes de la serie de Born se complica al aumentar el orden, por lo que sólo presentaremos expresiones hasta el cuarto orden en la ecuación (2.150). La complejidad del cálculo de los diferentes ordenes de la serie de Born la mostraremos en el Capítulo 7, donde veremos que obtener términos de la serie de Born que sean superiores al cuarto orden, representará un gran esfuerzo algebraico que no mejorará la aproximación de las cantidades de interés.

Escribamos las series de Born de las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$  de la siguiente manera:

$$t_{aa_0} = \delta_{aa_0} + (t_{aa_0})_1 + (t_{aa_0})_2 + (t_{aa_0})_3 + (t_{aa_0})_4 + (t_{aa_0})_6 + \dots, \quad (2.151a)$$

$$r_{aa_0} = (r_{aa_0})_1 + (r_{aa_0})_2 + (r_{aa_0})_3 + (r_{aa_0})_4 + (r_{aa_0})_6 + \dots, \quad (2.151b)$$

donde las cantidades  $(t_{aa_0})_n$  y  $(r_{aa_0})_n$  denotan el orden en el potencial de las amplitudes. Las expresiones de los diferentes ordenes de la amplitud de transmisión  $t_{aa_0}$  son, hasta cuarto orden en el potencial, las siguientes:

$$(t_{aa_0})_1 = (-i) \int \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{aa_0}(x_1) \varphi_+(k_{a_0}; x_1) dx_1, \quad (2.152a)$$

$$(t_{aa_0})_2 = (-i)^2 \sum_{b_1=1}^{\infty} \int \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \times \quad (2.152b)$$

$$\tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1a_0}(x_2) \varphi_+(k_{a_0}; x_2) dx_1 dx_2,$$

$$(t_{aa_0})_3 = (-i)^3 \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \int \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1b_2}(x_2) \times \quad (2.152c)$$

$$\tilde{g}_0(k_{b_2}; x_2 - x_3) \tilde{\mathcal{V}}_{b_2a_0}(x_3) \varphi_+(k_{a_0}; x_3) dx_1 dx_2 dx_3,$$

$$(t_{aa_0})_4 = (-i)^4 \sum_{b_1, b_2, b_3=1}^{\infty} \int \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1b_2}(x_2) \times \quad (2.152d)$$

$$\tilde{g}_0(k_{b_2}; x_2 - x_3) \tilde{\mathcal{V}}_{b_2b_3}(x_3) \tilde{g}_0(k_{b_3}; x_3 - x_4) \tilde{\mathcal{V}}_{b_3a_0}(x_4) \varphi_+(k_{a_0}; x_4) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4;$$

análogamente, para la amplitud de reflexión  $r_{aa_0}$  se tiene:

$$(r_{aa_0})_1 = (-i) \int \varphi_+(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{aa_0}(x_1) \varphi_+(k_{a_0}; x_1) dx_1, \quad (2.152e)$$

$$(r_{aa_0})_2 = (-i)^2 \sum_{b_1=1}^{\infty} \int \varphi_+(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \times \quad (2.152f)$$

$$\tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1a_0}(x_2) \varphi_+(k_{a_0}; x_2) dx_1 dx_2,$$

$$(r_{aa_0})_3 = (-i)^3 \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \int \varphi_+(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1b_2}(x_2) \times \quad (2.152g)$$

$$\tilde{g}_0(k_{b_2}; x_2 - x_3) \tilde{\mathcal{V}}_{b_2a_0}(x_3) \varphi_+(k_{a_0}; x_3) dx_1 dx_2 dx_3,$$

$$(r_{aa_0})_4 = (-i)^4 \sum_{b_1, b_2, b_3=1}^{\infty} \int \varphi_+(k_a; x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1b_2}(x_2) \times \quad (2.152h)$$

$$\tilde{g}_0(k_{b_2}; x_2 - x_3) \tilde{\mathcal{V}}_{b_2b_3}(x_3) \tilde{g}_0(k_{b_3}; x_3 - x_4) \tilde{\mathcal{V}}_{b_3a_0}(x_4) \varphi_+(k_{a_0}; x_4) dx_1 dx_2 dx_3 dx_4;$$

Con ayuda de la notación definida en la Ec. (2.151) para las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$  obtendremos los diferentes ordenes en el potencial de las intensidades  $T_{aa_0} = |t_{aa_0}|^2$  y  $R_{aa_0} = |r_{aa_0}|^2$ , así como para el producto de intensidades  $T_{aa_0}T_{bb_0}$  y  $R_{aa_0}R_{bb_0}$ , etc. Las expresiones de la Ec. (2.152) sólo se utilizarán de manera explícita hasta el Capítulo 7.

**Observables relacionadas con  $t_{aa_0}$ .** Para obtener los coeficientes de transmisión  $T_{aa_0}$  se multiplica la amplitud de transmisión  $t_{aa_0}$ , Ec. (2.151a), por su compleja conjugada, obteniendo así:

$$T_{aa_0} = \delta_{aa_0} + (T_{aa_0})_1 + (T_{aa_0})_2 + (T_{aa_0})_3 + (T_{aa_0})_4 + \dots, \quad (2.153a)$$

donde hemos definido los diferentes ordenes en el potencial como:

$$(T_{aa_0})_1 = \delta_{aa_0} [(t_{aa}^*)_1 + (t_{aa})_1], \quad (2.153b)$$

$$(T_{aa_0})_2 = |(t_{aa_0})_1|^2 + \delta_{aa_0} [(t_{aa})_2 + (t_{aa}^*)_2], \quad (2.153c)$$

$$(T_{aa_0})_3 = (t_{aa_0})_2 (t_{aa_0}^*)_1 + (t_{aa_0}^*)_2 (t_{aa_0})_1 + \delta_{aa_0} [(t_{aa})_3 + (t_{aa}^*)_3], \quad (2.153d)$$

$$(T_{aa_0})_4 = \delta_{aa_0} [(t_{aa})_4 + (t_{aa}^*)_4] + |(t_{aa_0})_2|^2 + [(t_{aa_0})_3 (t_{aa_0}^*)_1 + (t_{aa_0})_1 (t_{aa_0}^*)_3]. \quad (2.153e)$$

De manera análoga se puede calcular, hasta cuarto orden en el potencial el producto  $T_{aa_0}T_{bb_0}$  obteniendo así:

$$\begin{aligned} T_{aa_0}T_{bb_0} &= \delta_{aa_0}\delta_{bb_0} + [\delta_{aa_0} (T_{bb_0})_1 + \delta_{bb_0} (T_{aa_0})_1] \\ &\quad + [\delta_{aa_0} (T_{bb_0})_2 + \delta_{bb_0} (T_{aa_0})_2 + (T_{aa_0})_1 (T_{bb_0})_1] \\ &\quad + \left[ \delta_{aa_0} (T_{bb_0})_3 + \delta_{bb_0} (T_{aa_0})_3 + (T_{aa_0})_1 (T_{bb_0})_2 + (T_{aa_0})_2 (T_{bb_0})_1 \right] \\ &\quad + \left[ \delta_{bb_0} (T_{aa_0})_4 + \delta_{aa_0} (T_{bb_0})_4 + (T_{aa_0})_2 (T_{bb_0})_2 \right. \\ &\quad \left. + (T_{aa_0})_1 (T_{bb_0})_3 + (T_{aa_0})_3 (T_{bb_0})_1 \right] + \dots, \end{aligned} \quad (2.154)$$

**Observables relacionadas con  $r_{aa_0}$ .** De manera análoga el coeficiente  $R_{aa_0}$  se obtiene al multiplicar la ecuación (2.151b) por su compleja conjugada obteniendo así

$$R_{aa_0} = (R_{aa_0})_2 + (R_{aa_0})_3 + (R_{aa_0})_4 + \dots, \quad (2.155a)$$

donde hemos definido la notación compacta:

$$(R_{aa_0})_2 = |(r_{aa_0})_1|^2, \quad (2.155b)$$

$$(R_{aa_0})_3 = (r_{aa_0})_1 (r_{aa_0}^*)_2 + (r_{aa_0})_2 (r_{aa_0}^*)_1, \quad (2.155c)$$

$$(R_{aa_0})_4 = (r_{aa_0})_1 (r_{aa_0}^*)_3 + (r_{aa_0})_3 (r_{aa_0}^*)_1 + |(r_{aa_0})_2|^2. \quad (2.155d)$$

Por último, la expresión hasta cuarto orden en el potencial del producto de dos intensidades de reflexión es:

$$R_{aa_0}R_{bb_0} = (R_{aa_0})_2 (R_{bb_0})_2 + \dots. \quad (2.156)$$



# Capítulo 3

## Modelo microscópico del potencial

### 3.1. Introducción

En el presente Capítulo haremos un modelo para el potencial microscópico  $V(x, y)$  del sistema dispersor que se encuentra en el interior de la guía de ondas: ver figura 2.1. Dicho modelo microscópico del potencial será el que utilizaremos de ahora en adelante. Por comodidad, el modelo del potencial microscópico se construirá en términos del potencial  $U(x, y)$ , Ec. (2.16), definido en unidades de  $k^2$  en vez de hacerlo en términos del potencial  $V(x, y)$ .

Una vez definido el modelo del potencial microscópico estudiaremos la dispersión que éste produce, para lo cual haremos uso de los conceptos discutidos en el Capítulo 2 donde estudiamos en detalle la dispersión que produce un potencial  $V(x, y)$  en una guía de ondas bidimensional. Todas las propiedades de la dispersión que discutimos en el Capítulo 2 serán directamente aplicables a nuestro modelo particular, ya que en ese Capítulo no se hizo mención alguna a la dependencia espacial del potencial, lo único que se supuso es que es de alcance finito.

Dos de los conceptos del Capítulo anterior que aplicaremos en el presente Capítulo serán los referentes a las matrices de dispersión y transferencia reducidas y extendidas (ver sección 2.5). La razón por la cual aplicaremos estos dos conceptos, sobre todo el de la matriz de transferencia, se debe a que el estudio de la dispersión que haremos en los capítulos posteriores, salvo el Capítulo 7, estarán basados en estos conceptos. La obtención de la serie de Born (ver sección 2.6) para el modelo particular del potencial microscópico que propondremos en el presente Capítulo, se presentará en el Capítulo 7, pues será ahí el único lugar donde se aplicará la serie de Born.

De ahora en adelante nos referiremos a los elementos de matriz del potencial  $U_{ab}(x)$ , Ec. (2.18), como el potencial *cuasi-unidimensional*. Lo anterior se debe a que, si bien la guía de ondas es un sistema bidimensional, ésta se puede considerar como un sistema cuasi-unidimensional, ya que, como consecuencia de que su dirección transversal está acotada, todo el estudio de la dispersión que presentamos en el Capítulo 2 se puede realizar en términos de los elementos de matriz unidimensionales  $U_{ab}(x)$ .

## 3.2. Definición del modelo microscópico

### 3.2.1. Descripción general del potencial microscópico

Para construir el modelo microscópico del potencial consideremos que el sistema dispersor que ilustramos en la figura 2.1 está constituido por  $n$  *unidades dispersoras* a lo largo de la dirección  $x$ , cada una de éstas contiene, en su dirección transversal  $y$ , uno o muchos dispersores individuales (todos con coordenada longitudinal  $x_r$ ) que en su conjunto producen un potencial  $U_r(x, y)$ , con  $r = 1, 2, 3, \dots, n$ . La  $r$ -ésima *unidad dispersora* está centrada en la posición  $x_r$  y su potencial  $U_r(x, y)$  tiene un alcance finito  $2\alpha$  de tal manera que:

$$U_r(x, y) = 0, \quad x < x_r - \alpha, \quad x > x_r + \alpha. \quad (3.1)$$

La distancia que hay entre dos *unidades dispersoras* la denotamos por  $d$ , la cual es fija y mucho mayor que el alcance de cada *unidad dispersora* (ver figura 4.2), es decir,

$$\alpha \ll d; \quad (3.2)$$

la longitud  $L$  del sistema es entonces:

$$L = nd. \quad (3.3)$$

En conclusión, la estructura general del modelo microscópico del potencial con el que trabajaremos es la siguiente:

$$U(x, y) = \sum_{r=1}^n U_r(x, y). \quad (3.4a)$$

Al introducir la dependencia general del potencial microscópico, Ec. (3.4a), en el lado derecho la ecuación (2.18) se obtiene que el potencial *cuasi-unidimensional*  $U_{ab}(x)$  tiene la siguiente estructura:

$$U_{ab}(x) = \sum_{r=1}^n [U_r(x)]_{ab}, \quad (3.4b)$$

donde hemos definido el potencial *cuasi-unidimensional* de la  $r$ -ésima unidad dispersora como:

$$[U_r(x)]_{ab} = \int_0^W \chi_a(y) U_r(x, y) \chi_b(y) dy. \quad (3.4c)$$

De la ecuación (3.4c) vemos que, para cada pareja de índices  $a$  y  $b$ , el potencial *cuasi-unidimensional*  $U_{ab}(x)$  tiene una estructura muy parecida a la del potencial unidimensional Kronig-Penney, salvo que los potenciales de las unidades dispersoras  $[U_r(x)]_{ab}$  son constantes, ya que dependen de la coordenada  $x$ .

### 3.2.2. Idealización de la unidad dispersora: el potencial delta

Fijemos nuestra atención en la  $r$ -ésima unidad dispersora, la cual está centrada en  $x_r$  y representada por el potencial  $U_r(x, y)$ .

Nuestro objetivo es hacer algunas idealizaciones para modelar el potencial *cuasi-unidimensional*  $[U_r(x)]_{ab}$  como un potencial delta, lo cual quiere decir que la unidad dispersora en cuestión (una barrera o pozo de potencial), debe ser lo suficientemente delgada para que la dependencia de su potencial *cuasi-unidimensional*  $[U_r(x)]_{ab}$  se pueda considerar constante en el intervalo  $x \in [x_r - \alpha, x_r + \alpha]$ , siendo este valor constante:

$$(U_r)_{ab} \equiv [U_r(x_r)]_{ab}. \quad (3.5)$$

Definiendo la función  $\Theta_{2\alpha}(x - x_r)$  como:

$$\Theta_{2\alpha}(x - x_r) = 1, \quad x \in [x_r - \alpha, x_r + \alpha] \quad (3.6a)$$

$$\Theta_{2\alpha}(x - x_r) = 0, \quad x \notin [x_r - \alpha, x_r + \alpha] \quad (3.6b)$$

podemos escribir el potencial cuasi-unidimensional de una unidad dispersora de la siguiente manera:

$$[U_r(x)]_{ab} = (U_r)_{ab} \Theta_{2\alpha}(x - x_r) = (u_r)_{ab} \frac{\Theta_{2\alpha}(x - x_r)}{2\alpha} \quad (3.7a)$$

donde hemos definido las cantidades  $(u_r)_{ab}$  como:

$$(u_r)_{ab} \equiv 2\alpha (U_r)_{ab}, \quad (3.7b)$$

las cuales tienen unidades de  $k$  y su valor puede ser tanto positivo como negativo. Como veremos en el Capítulo 7 estas cantidades jugarán un papel central en la implementación de la serie de Born que haremos en ese Capítulo; además, estas cantidades se utilizarán para definir el potencial efectivo, Ec. (3.49).

Por otro lado, para que el potencial cuasi-unidimensional de la unidad dispersora se pueda modelar mediante un potencial delta, también es necesario que el número de onda  $k$  que aparece en la ecuación de Schrödinger, Ec. (2.16), sea tal que la longitud de onda  $\lambda$  asociada a éste,  $k = 2\pi/\lambda$ , sea mucho mayor que el alcance del potencial  $2\alpha$ , lo cual nos permite suponer que las funciones de onda longitudinales  $[\psi(x)]_a$  son aproximadamente constantes en el intervalo  $x \in [x_r - \alpha, x_r + \alpha]$ . Lo anterior ocurre si se satisfacen las siguientes relaciones:

$$k\alpha \ll 1, \quad (3.8a)$$

$$(K_r)_{ab} \alpha \ll 1, \quad (3.8b)$$

donde hemos definido

$$(K_r)_{ab}^2 \equiv |(U_r)_{ab}|. \quad (3.8c)$$

Si se cumplen las condiciones anteriores podemos modelar el potencial cuasi-unidimensional  $[U_r(x)]_{ab}$  como un potencial delta tomando el siguiente límite matemático:

$$|(U_r)_{ab}| \rightarrow \infty, \quad (3.9a)$$

$$\alpha \rightarrow 0, \quad (3.9b)$$

pero manteniendo fijo el valor de  $(u_r)_{ab}$ , Ec. (3.7b). Lo anterior nos permite modelar al potencial cuasi-unidimensional  $[U_r(x)]_{ab}$  como un potencial delta:

$$[U_r(x)]_{ab} = (u_r)_{ab} \delta(x - x_r). \quad (3.10a)$$

Por lo tanto, el potencial de la  $r$ -ésima unidad dispersora se idealiza como el siguiente potencial separable:

$$U_r(x, y) = u_r(y) \delta(x - x_r), \quad (3.10b)$$

donde la función  $u_r(y)$  tiene una dependencia arbitraria en la coordenada  $y$ .

Al introducir el potencial de la  $r$ -ésima unidad dispersora, Ec. (3.10b), en la ecuación (2.18), obtenemos la relación entre las cantidades  $(u_r)_{ab}$  y la función  $u_r(y)$ , siendo ésta:

$$(u_r)_{ab} = \int_0^W \chi_a(y) u_r(y) \chi_b(y) dy. \quad (3.10c)$$

Podemos agrupar las cantidades  $(u_r)_{ab}$  en la siguiente matriz simétrica:

$$u_r = \begin{pmatrix} (u_r)_{PP} & (u_r)_{PQ} \\ (u_r)_{QP} & (u_r)_{QQ} \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

donde hemos utilizado la convención que definimos en la sección 2.5 para definir los bloques  $PP$ ,  $PQ$ ,  $QP$  y  $QQ$  de las matrices de dispersión y transferencia.

### 3.2.3. Modelo microscópico del potencial *cuasi-unidimensional* $U_{ab}(x)$

Una vez que hemos definido el modelo de la  $r$ -ésima unidad dispersora, Ec. (3.10), obtenemos que el potencial microscópico de todo el sistema, Ec. (3.4a), consiste de una secuencia de  $n$  unidades dispersoras separadas una distancia fija  $d$  cuyos potenciales tienen una dependencia en las coordenadas  $x$  y  $y$  que es separable en una función delta en la coordenada  $x$ , mientras que en la coordenada  $y$  el potencial de cada unidad dispersora tiene una dependencia arbitraria: es decir, el potencial microscópico del sistema se modela mediante la siguiente expresión:

$$U(x, y) = \sum_{r=1}^n u_r(y) \delta(x - x_r), \quad (3.12)$$

donde  $x_r$  es la posición del  $r$ -ésimo potencial delta.

Al utilizar la expresión (3.12) en la ecuación (2.18) obtenemos la dependencia del potencial cuasi-unidimensional  $U_{ab}(x)$  de todo el sistema, siendo ésta la siguiente:

$$U_{ab}(x) = \sum_{r=1}^n (u_r)_{ab} \delta(x - x_r). \quad (3.13)$$

donde las cantidades  $(u_r)_{ab}$  se definieron en la Ec. (3.10c).

El potencial cuasi-unidimensional (3.13) será la base para el trabajo que presentaremos en los capítulos posteriores. Por esta razón es conveniente que apliquemos las ideas discutidas en el Capítulo 2 al potencial (3.13). En particular, si aplicamos la ecuación (2.143) al potencial cuasi-unidimensional, se obtiene la siguiente dependencia del potencial sin unidades  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$ :

$$\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x) = \Gamma(ab) \mathcal{V}_{ab}(x), \quad (3.14a)$$

$$\mathcal{V}_{ab}(x) = \sum_{r=1}^n (v_r)_{ab} \delta(x - x_r), \quad (3.14b)$$

donde hemos definido los “potenciales sin unidades” de la  $r$ -ésima unidad dispersora  $(v_r)_{ab}$  de la siguiente manera:

$$(v_r)_{ab} = \frac{u_{ab}}{2\sqrt{k_a k_b}}, \quad 1 \leq a, b \leq N, \quad (3.15a)$$

$$(v_r)_{ab} = \frac{u_{ab}}{2\sqrt{\kappa_a k_b}}, \quad a > N, 1 \leq b \leq N, \quad (3.15b)$$

$$(v_r)_{ab} = \frac{u_{ab}}{2\sqrt{k_a \kappa_b}}, \quad 1 \leq a \leq N, b > N, \quad (3.15c)$$

$$(v_r)_{ab} = \frac{u_{ab}}{2\sqrt{\kappa_a \kappa_b}}, \quad a, b > N, \quad (3.15d)$$

las cuales son números reales. Al igual que para las cantidades  $(u_r)_{ab}$  definimos la matriz  $u_r$ , Ec (3.11), para las cantidades  $(v_r)_{ab}$  definimos la siguiente matriz.

$$v_r = \begin{pmatrix} (v_r)_{PP} & (v_r)_{PQ} \\ (v_r)_{QP} & (v_r)_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Si utilizamos los factores  $\Gamma(ab)$  definidos en la ecuación (2.144), podemos definir los correspondientes “potenciales” complejos  $(\tilde{v}_r)_{ab}$ :

$$(\tilde{v}_r)_{ab} = \Gamma(ab) (v_r)_{ab} = (v_r)_{ab}, \quad 1 \leq a, b \leq N, \quad (3.17a)$$

$$(\tilde{v}_r)_{ab} = \Gamma(ab) (v_r)_{ab} = e^{-i\pi/4} (v_r)_{ab}, \quad a > N, 1 \leq b \leq N, \quad (3.17b)$$

$$(\tilde{v}_r)_{ab} = \Gamma(ab) (v_r)_{ab} = e^{-i\pi/4} (v_r)_{ab}, \quad 1 \leq a \leq N, b > N, \quad (3.17c)$$

$$(\tilde{v}_r)_{ab} = \Gamma(ab) (v_r)_{ab} = -i (v_r)_{ab}, \quad a, b > N, \quad (3.17d)$$

que permiten escribir el “potencial” complejo  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$ , Ec. (3.14a), [ver comentario hecho justo después de la ecuación (2.144)] de la siguiente manera

$$\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x) = \sum_{r=1}^n (\tilde{v}_r)_{ab} \delta(x - x_r). \quad (3.18)$$

Los elementos de matriz  $(\tilde{v}_r)_{ab}$ , Ec. (3.17), se usarán en la siguiente sección para obtener las matrices de dispersión y transferencia de un potencial delta. Al igual que en las ecuaciones (3.11) y (3.16) definimos las matrices  $u_r$  y  $v_r$ , respectivamente, aquí agruparemos las cantidades  $(\tilde{v}_r)_{ab}$  en la siguiente matriz  $\tilde{v}_r$ :

$$\tilde{v}_r = \begin{pmatrix} (\tilde{v}_r)_{PP} & (\tilde{v}_r)_{PQ} \\ (\tilde{v}_r)_{QP} & (\tilde{v}_r)_{QQ} \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

### 3.3. Estudio de la dispersión de un potencial delta

Para estudiar la dispersión que produce un potencial delta debemos sustituir la expresión (3.10a) en la ecuación (2.24). Al hacer lo anterior obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones acopladas

$$\left( \frac{\partial}{\partial x^2} + k_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} (u_r)_{ab} \delta(x - x_r) [\psi(x)]_b, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (3.20a)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial x^2} - \kappa_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} (u_r)_{ab} \delta(x - x_r) [\psi(x)]_b, \quad a > N, \quad (3.20b)$$

donde (3.20a) se refiere a canales abiertos, mientras que (3.20b) se refiere a los canales cerrados.

Debido a que el potencial es una delta, podemos resolver el conjunto de ecuaciones acopladas (3.20), para lo cual debemos especificar las condiciones de frontera de las funciones  $[\psi(x)]_a$  y sus primeras derivadas.

La condición de frontera que se impone para las funciones  $[\psi(x)]_a$  es que éstas sean continuas, es decir, que las soluciones a la derecha y a la izquierda del potencial sean iguales en  $x = x_r$ . Si denotamos las funciones del lado izquierdo del potencial como  $[\psi(x)]_a^{(1)}$  y a las del lado derecho como  $[\psi(x)]_a^{(2)}$ , entonces las condiciones de frontera para las funciones  $[\psi(x)]_a$  las expresamos de la siguiente manera:

$$[\psi(x_r)]_a^{(1)} = [\psi(x_r)]_a^{(2)}, \quad (3.21a)$$

siendo  $a$  un índice de canal abierto o cerrado.

Debido a que el potencial de la unidad dispersora es una delta, las derivadas de las funciones  $[\psi(x)]_a$  no son continuas. Para obtener las condiciones de frontera de las derivadas se integran las expresiones de la ecuación (3.20) en el intervalo  $x \in (x_r - \epsilon, x_r + \epsilon)$  y posteriormente se toma el límite  $\epsilon \rightarrow 0$ . Como resultado de lo anterior se obtiene la siguiente condición de frontera para las derivadas de las funciones  $[\psi(x)]_a$ :

$$\frac{\partial [\psi(x_r)]_a^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial [\psi(x_r)]_a^{(1)}}{\partial x} = \sum_{b=1}^{\infty} (u_r)_{ab} [\psi(x_r)]_b^{(1)}, \quad (3.21b)$$

donde  $a$  puede ser tanto un índice de canal abierto como cerrado.

Como vimos en la sección 2.5.3, la manera más general en la que debemos describir la dispersión que produce un potencial en el interior de una guía, es aquella en la que hay incidencia a través de canales cerrados; por lo tanto, las expresiones de las funciones de onda  $[\psi(x)]_a$ , tanto del lado izquierdo como del derecho, las obtenemos de las ecuaciones (2.90) y (2.91), respectivamente.

Para abreviar la notación en el desarrollo que haremos a continuación, definimos las siguientes cantidades:

$$(A_r)_a = \frac{(T_r)_a}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}}, \quad (B_r)_a = \frac{(T_r^{-1})_a}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}}, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (3.22a)$$

$$(C_r)_a = e^{-i\pi/4} \frac{(T_r)_a}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}}, \quad (D_r)_a = e^{-i\pi/4} \frac{(T_r^{-1})_a}{\sqrt{2\pi\hbar^2/m}}, \quad a > N, \quad (3.22b)$$

donde las fases

$$(T_r)_a = e^{ik_a x_r}, \quad (T_r^{-1})_a = e^{-ik_a x_r}, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (3.22c)$$

$$(T_r)_a = e^{-\kappa_a x_r}, \quad (T_r^{-1})_a = e^{\kappa_a x_r}, \quad a > N. \quad (3.22d)$$

definen la matriz diagonal:

$$T_r = \begin{pmatrix} (T_r)_P & 0 \\ 0 & (T_r)_Q \end{pmatrix}, \quad (3.23a)$$

siendo  $(T_r)_P$  y  $(T_r)_Q$  las matrices diagonales que nos permiten trasladar las matrices de dispersión y transferencia (ver sección 3.3.1); éstas se expresan de la siguiente forma:

$$(T_r)_P = \begin{pmatrix} e^{ik_1 x_r} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{ik_N x_r} \end{pmatrix} \quad (3.23b)$$

$$(T_r)_Q = \begin{pmatrix} e^{-\kappa_{N+1} x_r} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-\kappa_{N+N'} x_r} \end{pmatrix} \quad (3.23c)$$

Haciendo uso de las definiciones (3.22) y de las ecuaciones (2.90)-(2.91), podemos expresar las condiciones de frontera, Ec. (3.21b); de esta manera obtenemos que las condiciones de frontera de las funciones de onda se escriben como:

$$\tilde{a}_a^{(1)} \frac{(A_r)_a}{\sqrt{k_a}} + \tilde{b}_a^{(1)} \frac{(B_r)_a}{\sqrt{k_a}} = \tilde{b}_a^{(2)} \frac{(B_r)_a}{\sqrt{k_a}} + \tilde{a}_a^{(2)} \frac{(A_r)_a}{\sqrt{k_a}}, \quad 1 \leq a \leq N \quad (3.24a)$$

$$\tilde{a}_a^{(1)} \frac{(C_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} + \tilde{b}_a^{(1)} \frac{(D_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} = \tilde{b}_a^{(2)} \frac{(D_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} + \tilde{a}_a^{(2)} \frac{(C_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}}, \quad a > N, \quad (3.24b)$$

mientras que las derivadas se expresan como:

$$ik_a \left[ \tilde{a}_a^{(2)} \frac{(A_r)_a}{\sqrt{k_a}} - \tilde{b}_a^{(2)} \frac{(B_r)_a}{\sqrt{k_a}} \right] = ik_a \left[ \tilde{a}_a^{(1)} \frac{(A_r)_a}{\sqrt{k_a}} - \tilde{b}_a^{(1)} \frac{(B_r)_a}{\sqrt{k_a}} \right] \quad (3.25a)$$

$$+ \left[ \sum_{b=1}^N (u_r)_{ab} \left( \tilde{a}_b^{(1)} \frac{(A_r)_b}{\sqrt{k_b}} + \tilde{b}_b^{(1)} \frac{(B_r)_b}{\sqrt{k_b}} \right) + \sum_{b=N+1}^{\infty} (u_r)_{ab} \left( \tilde{a}_b^{(1)} \frac{(C_r)_b}{\sqrt{\kappa_b}} + \tilde{b}_b^{(1)} \frac{(D_r)_b}{\sqrt{\kappa_b}} \right) \right], \quad 1 \leq a \leq N$$

$$\kappa_a \left[ -\tilde{a}_a^{(2)} \frac{(C_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} + \tilde{b}_a^{(2)} \frac{(D_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} \right] = \kappa_a \left[ -\tilde{a}_a^{(1)} \frac{(C_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} + \tilde{b}_a^{(1)} \frac{(D_r)_a}{\sqrt{\kappa_a}} \right] \quad (3.25b)$$

$$+ \left[ \sum_{b=1}^N (u_r)_{ab} \left( \tilde{a}_b^{(1)} \frac{(A_r)_b}{\sqrt{k_b}} + \tilde{b}_b^{(1)} \frac{(B_r)_b}{\sqrt{k_b}} \right) + \sum_{b=N+1}^{\infty} (u_r)_{ab} \left( \tilde{a}_b^{(1)} \frac{(C_r)_b}{\sqrt{\kappa_b}} + \tilde{b}_b^{(1)} \frac{(D_r)_b}{\sqrt{\kappa_b}} \right) \right], \quad a > N.$$

Al realizar algunas manipulaciones algebraicas de las ecuaciones (3.24) y (3.25) obtenemos las siguientes ecuaciones equivalentes:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_a^{(2)} &= \sum_{b=1}^N (T_r^{-1})_a [\delta_{ab} - i(\tilde{v}_r)_{ab}] (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} - \sum_{b=1}^N (T_r^{-1})_a i(\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{b}_b^{(1)} \\ &\quad - \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r^{-1})_a i(\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} - \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r^{-1})_a i(\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{b}_b^{(1)}, \quad 1 \leq a \leq N, \end{aligned} \quad (3.26a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{a}_a^{(2)} &= - \sum_{b=1}^N (T_r^{-1})_a i(\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} - \sum_{b=1}^N (T_r^{-1})_a i(\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{b}_b^{(1)} \\ &\quad + \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r^{-1})_a [\delta_{ab} - i(\tilde{v}_r)_{ab}] (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} - \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r^{-1})_a i(\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{b}_b^{(1)}, \quad a > N, \end{aligned} \quad (3.26b)$$

$$\tilde{b}_a^{(2)} = \sum_{b=1}^N (T_r)_a i (\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} + \sum_{b=1}^N (T_r)_a [\delta_{ab} + i (\tilde{v}_r)_{ab}] (T_r^{-1})_b \tilde{b}_b^{(1)} \quad (3.26c)$$

$$+ \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r)_a i (\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} + \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r)_a i (\tilde{v}_r)_{ab} (T_r^{-1})_b \tilde{b}_b^{(1)}, \quad 1 \leq a \leq N,$$

$$\tilde{b}_a^{(2)} = \sum_{b=1}^N (T_r)_a i (\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} + \sum_{b=1}^N (T_r)_a i (\tilde{v}_r)_{ab} (T_r^{-1})_b \tilde{b}_b^{(1)} \quad (3.26d)$$

$$+ \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r)_a i (\tilde{v}_r)_{ab} (T_r)_b \tilde{a}_b^{(1)} + \sum_{b=N+1}^{\infty} (T_r)_a [\delta_{ab} + i (\tilde{v}_r)_{ab}] (T_r^{-1})_b \tilde{b}_b^{(1)}, \quad a > N,$$

donde hemos utilizado los elementos de matriz  $(\tilde{v}_r)_{ab}$ , Ec. (3.17), y las fases  $(T_r)_a$ , Ec. (3.22). Si utilizamos los vectores definidos en la ecuación (2.89) y las matrices definidas en las ecuaciones (3.19) y (3.23), podemos expresar la ecuación (3.26) de manera matricial, obteniendo así:

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = T_r^{-1} [I - i\tilde{v}_r] T_r \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix} + T_r^{-1} [-i\tilde{v}_r] T_r^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix} \quad (3.27a)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = T_r [i\tilde{v}_r] T_r \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix} + T_r [I + i\tilde{v}_r] T_r^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (3.27b)$$

donde hemos definido a  $I$  como la matriz identidad de dimensión  $N + N'$ :

$$I = \begin{pmatrix} I_N & 0 \\ 0 & I_{N'} \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Como veremos más adelante, las relaciones de la ecuación (3.27) nos permitirán obtener las matrices de dispersión y transferencia extendidas [ver ecuaciones (3.30) y (3.34) respectivamente]

### 3.3.1. Matrices de dispersión y de transferencia extendidas de un potencial delta

#### La matriz de dispersión extendida de un potencial delta

La ecuación matricial (3.27) relacionan los vectores que agrupan las amplitudes de las ondas del lado derecho del potencial,  $\tilde{a}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(2)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ , con aquellos que agrupan las amplitudes de las ondas del lado izquierdo,  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(1)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(1)}$ . A partir de la ecuación (3.27), podemos expresar los vectores de las amplitudes salientes  $\tilde{b}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_Q^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_P^{(2)}$  y  $\tilde{a}_Q^{(2)}$  en términos de los vectores de las amplitudes entrantes  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ , obteniendo así:

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix} = -T_r [I + i\tilde{v}_r]^{-1} [i\tilde{v}_r] T_r \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix} + T_r [I + i\tilde{v}_r]^{-1} T_r^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} \quad (3.29a)$$

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = T_r^{-1} [I + i\tilde{v}_r]^{-1} T_r \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix} - T_r^{-1} [i\tilde{v}_r] [I + i\tilde{v}_r]^{-1} T_r^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} \quad (3.29b)$$

Al escribir la ecuación (3.29) de manera compacta obtenemos la siguiente relación matricial:

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \\ \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = \tilde{S}_r \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix}, \quad (3.30a)$$

donde  $\tilde{S}_r$  representa la matriz de dispersión extendida de un potencial delta ubicado en la posición arbitraria  $x_r$ , la cual se escribe de la siguiente manera:

$$\tilde{S}_r = \begin{pmatrix} T_r & 0 \\ 0 & T_r^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -[I + i\tilde{v}_r]^{-1} [i\tilde{v}_r] & [I + i\tilde{v}_r]^{-1} \\ [I + i\tilde{v}_r]^{-1} & -[i\tilde{v}_r] [I + i\tilde{v}_r]^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_r & 0 \\ 0 & T_r^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.30b)$$

Pensemos por un momento que la posición del potencial delta es  $x_r = 0$ ; en ese caso  $T_r = I$ , [ver ecuaciones (3.22) y (3.23)], y la matriz de dispersión extendida, Ec. (3.30b), toma la siguiente estructura:

$$\overset{\circ}{\tilde{S}} = \begin{pmatrix} \overset{\circ}{\tilde{r}}_r & \overset{\circ}{\tilde{t}}'_r \\ \overset{\circ}{\tilde{t}}_r & \overset{\circ}{\tilde{r}}'_r \end{pmatrix} \quad (3.31a)$$

donde hemos definido las matrices de reflexión y transmisión extendidas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\tilde{r}}_r &= -[I + i\tilde{v}_r]^{-1} [i\tilde{v}_r], & \overset{\circ}{\tilde{t}}_r &= [I + i\tilde{v}_r]^{-1}, \\ \overset{\circ}{\tilde{r}}'_r &= -[i\tilde{v}_r] [I + i\tilde{v}_r]^{-1}, & \overset{\circ}{\tilde{t}}'_r &= [I + i\tilde{v}_r]^{-1}. \end{aligned} \quad (3.31b)$$

La ecuación (3.31) permite reescribir la ecuación (3.30b) como:

$$\tilde{S}_r = \begin{pmatrix} T_r & 0 \\ 0 & T_r^{-1} \end{pmatrix} \overset{\circ}{\tilde{S}} \begin{pmatrix} T_r & 0 \\ 0 & T_r^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

La ecuación (3.32) da la regla de transformación de la matriz de dispersión extendida. Esta regla de transformación muestra que si un potencial se traslada de un punto a otro, entonces la matriz de dispersión de dicho potencial diferirá de punto a punto por fases dadas por la matriz  $T_r$ , Ec. (3.23); por lo tanto, las amplitudes de reflexión y de transmisión extendidas de un potencial delta en una posición  $x_r$  arbitraria son:

$$\begin{aligned}\tilde{r}_r &= T_r \overset{o}{\tilde{r}}_r T_r, & \tilde{t}_r &= T_r^{-1} \overset{o}{\tilde{t}}_r T_r, \\ \tilde{r}'_r &= T_r^{-1} \overset{o}{\tilde{r}}'_r T_r^{-1}, & \tilde{t}'_r &= T_r \overset{o}{\tilde{t}}'_r T_r^{-1}.\end{aligned}\quad (3.33)$$

Las expresiones de las amplitudes de reflexión y de transmisión, Ec. (3.33), se usarán en el cálculo numérico que presentaremos en la sección 6.4 y en el Capítulo 7, donde usaremos la regla de combinación para las matrices de dispersión, Ecs. (2.137) y (2.138), para obtener la matriz de dispersión de un sistema formado por una secuencia de potenciales delta.

### La matriz de transferencia extendida de un potencial delta

La ecuación matricial (3.27) relacionan los vectores que agrupan las amplitudes de las ondas del lado derecho del potencial,  $\tilde{a}_P^{(2)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(2)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(2)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(2)}$ , con aquellos que agrupan las amplitudes de las ondas del lado izquierdo,  $\tilde{a}_P^{(1)}$ ,  $\tilde{a}_Q^{(1)}$ ,  $\tilde{b}_P^{(1)}$  y  $\tilde{b}_Q^{(1)}$ . Al escribir dicha ecuación de manera compacta obtenemos la siguiente ecuación matricial:

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(2)} \\ \tilde{a}_Q^{(2)} \\ \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \end{bmatrix} = \widetilde{M}_r \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (3.34a)$$

donde  $\widetilde{M}_r$  es la matriz de transferencia extendida de un potencial delta ubicado en la posición arbitraria  $x_r$ . Esta matriz extendida se escribe de la siguiente manera:

$$\widetilde{M}_r = \begin{pmatrix} T_r^{-1} & 0 \\ 0 & T_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I - i\tilde{v}_r & -i\tilde{v}_r \\ i\tilde{v}_r & I + i\tilde{v}_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_r & 0 \\ 0 & T_r^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.34b)$$

Al igual que hicimos en el caso de la matriz dispersión extendida pensemos por un momento que el potencial delta está ubicado en  $x_r = 0$ . En este caso la matriz de transferencia extendida toma la siguiente estructura:

$$\overset{o}{\widetilde{M}}_r = \begin{pmatrix} \overset{o}{\tilde{\alpha}} & \overset{o}{\tilde{\beta}} \\ \overset{o}{\tilde{\gamma}} & \overset{o}{\tilde{\delta}} \end{pmatrix}, \quad (3.35a)$$

donde hemos definido las matrices extendidas:

$$\begin{aligned}\overset{o}{\tilde{\alpha}} &= I - i\tilde{v}_r, & \overset{o}{\tilde{\beta}} &= -i\tilde{v}_r, \\ \overset{o}{\tilde{\gamma}} &= i\tilde{v}_r, & \overset{o}{\tilde{\delta}} &= I + i\tilde{v}_r;\end{aligned}\quad (3.35b)$$

por lo tanto, la regla de transformación para la matriz de transferencia extendida es:

$$\widetilde{M}_r = \begin{pmatrix} T_r^{-1} & 0 \\ 0 & T_r \end{pmatrix} \overset{o}{\widetilde{M}}_r \begin{pmatrix} T_r & 0 \\ 0 & T_r^{-1} \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Esta regla de transformación, Ec. (3.36), nos permite expresar las submatrices de la matriz de transferencia extendida de un potencial delta ubicado en una posición arbitraria  $x_r$  de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_r &= T_r^{-1} [I - i\tilde{v}_r] T_r, & \tilde{\beta}_r &= T_r^{-1} [-i\tilde{v}_r] T_r^{-1}, \\ \tilde{\gamma}_r &= T_r [i\tilde{v}_r] T_r, & \tilde{\delta}_r &= T_r [I + i\tilde{v}_r] T_r^{-1}.\end{aligned}\tag{3.37}$$

### 3.3.2. Las matrices de dispersión y transferencia reducidas de un potencial delta: el potencial efectivo

Como vimos en la sección 2.5.3 si conocemos las matrices de dispersión y de transferencia extendidas, de éstas podemos extraer las matrices de dispersión y transferencia reducidas, Ecs. (2.95) y (2.100). La matriz de transferencia sí la obtendremos utilizando la ecuación (2.100), pero la matriz de dispersión reducida se obtendrá utilizando la ecuación (2.88) que da la matriz de dispersión reducida en función de la de transferencia reducida. Hay dos razones por las que decidimos obtener las matrices reducidas de la manera que acabamos de explicar. Estas son:

- La primera razón tiene que ver con la presentación del trabajo, ya que el resultado principal se basa en la matriz de transferencia reducida de tal manera que del Capítulo 4 al 6 todo el trabajo estará basado en la matriz de transferencia reducida.
- La segunda es una razón técnica, ya que, como veremos a continuación, la matriz de transferencia reducida se obtiene fácilmente en términos de la matriz del potencial efectivo ( $\hat{u}$ ), Ec. (3.49), mientras que la obtención de la matriz de dispersión reducida en términos del potencial efectivo es más complicada.

#### Matriz de transferencia reducida del potencial delta

Para obtener la matriz de transferencia reducida del  $r$ -ésimo potencial delta se utilizan las expresiones de la ecuación (2.100); por lo tanto, necesitamos la dependencia explícita de las matrices extendidas que aparecen en dicha ecuación, las cuales podemos extraer de la ecuación (3.37). Del bloque  $PP$ , Ec. (2.98), necesitamos las siguientes matrices:

$$(\tilde{\alpha}_r)_{PP} = (T_r^{-1})_P [I_P - i(\tilde{v}_r)_{PP}] (T_r)_P, \tag{3.38a}$$

$$(\tilde{\beta}_r)_{PP} = (T_r^{-1})_P [-i(\tilde{v}_r)_{PP}] (T_r^{-1})_P, \tag{3.38b}$$

$$(\tilde{\gamma}_r)_{PP} = (T_r)_P [i(\tilde{v}_r)_{PP}] (T_r)_P, \tag{3.38c}$$

$$(\tilde{\delta}_r)_{PP} = (T_r)_P [I_P + i(\tilde{v}_r)_{PP}] (T_r^{-1})_P. \tag{3.38d}$$

mientras que las matrices del bloque  $PQ$  que necesitamos son las siguientes:

$$(\tilde{\beta}_r)_{PQ} = (T_r^{-1})_P [-i(\tilde{v}_r)_{PQ}] (T_r^{-1})_Q, \tag{3.38e}$$

$$(\tilde{\delta}_r)_{PQ} = (T_r)_P [i(\tilde{v}_r)_{PQ}] (T_r^{-1})_Q. \tag{3.38f}$$

La única matriz del bloque  $QQ$  que usaremos será:

$$\left(\tilde{\delta}_r\right)_{QQ} = (T_r)_Q \left[ I_Q + i(\tilde{v}_r)_{QQ} \right] (T_r^{-1})_Q; \quad (3.38g)$$

por último, las matrices del bloque  $QP$  que necesitaremos son:

$$\left(\tilde{\gamma}_r\right)_{QP} = (T_r)_Q \left[ i(\tilde{v}_r)_{QP} \right] (T_r)_P, \quad (3.38h)$$

$$\left(\tilde{\delta}_r\right)_{QP} = (T_r)_Q \left[ i(\tilde{v}_r)_{QP} \right] (T_r^{-1})_P. \quad (3.38i)$$

Como ejemplo calculemos la matriz  $\alpha_r$  de la matriz de transferencia reducida  $M_r$ , que podemos expresar en términos de las matrices extendidas  $(\tilde{\alpha}_r)_{PP}$ ,  $(\tilde{\beta}_r)_{PQ}$ ,  $(\tilde{\delta}_r)_{QQ}$  y  $(\tilde{\gamma}_r)_{QP}$  de la siguiente manera:

$$\alpha_r = (\tilde{\alpha}_r)_{PP} - (\tilde{\beta}_r)_{PQ} \left[ (\tilde{\delta}_r)_{QQ} \right]^{-1} (\tilde{\gamma}_r)_{QP}. \quad (3.39a)$$

Al utilizar las dependencias explícitas de las matrices extendidas que aparecen en la ecuación anterior obtenemos que la matriz reducida  $\alpha_r$  se expresa en términos de la matriz  $\tilde{v}_r$ , Ec. (3.19), de la siguiente manera:

$$\alpha_r = (T_r^{-1})_P \left[ I_P - i(\tilde{v}_r)_{PP} + i(\tilde{v}_r)_{PQ} \left( \frac{I}{I_Q + i(\tilde{v}_r)_{QQ}} \right) i(\tilde{v}_r)_{QP} \right] (T_r)_P. \quad (3.39b)$$

De la ecuación (3.17) podemos relacionar los diferentes bloques de la matriz  $\tilde{v}_r$  con los bloques de la matriz  $v_r$ , obteniendo así:

$$\tilde{v}_{PP} = v_{PP}, \quad (3.40a)$$

$$\tilde{v}_{PQ} = e^{-i\pi/4} v_{PQ}, \quad (3.40b)$$

$$\tilde{v}_{QP} = e^{-i\pi/4} v_{QP}, \quad (3.40c)$$

$$\tilde{v}_{QQ} = -i v_{QQ}. \quad (3.40d)$$

La ecuación (3.40) nos permite escribir la matriz  $\alpha_r$  en términos de los bloques de la matriz  $v_r$  de la siguiente manera:

$$\alpha_r = (T_r^{-1})_P \left[ I_P - i(v_r)_{PP} + i(v_r)_{PQ} \left( I_Q + (v_r)_{QQ} \right)^{-1} (v_r)_{QP} \right] (T_r)_P. \quad (3.41)$$

Realizando el mismo procedimiento podemos encontrar las expresiones de las matrices  $\beta_r$ ,  $\gamma_r$  y  $\delta_r$ . Como resultado obtenemos que las submatrices de la matriz de transferencia reducida se escriben de la siguiente manera:

$$\alpha_r = (T_r^{-1})_P [I_P - i\widehat{v}_r] (T_r)_P, \quad (3.42a)$$

$$\beta_r = (T_r^{-1})_P [-i\widehat{v}_r] (T_r^{-1})_P, \quad (3.42b)$$

$$\gamma_r = (T_r)_P [i\widehat{v}_r] (T_r)_P, \quad (3.42c)$$

$$\delta_r = (T_r)_P [I_P + i\widehat{v}_r] (T_r^{-1})_P, \quad (3.42d)$$

donde hemos definido la matriz del “potencial efectivo sin unidades”  $\widehat{v}_r$  como:

$$\widehat{v}_r = (v_r)_{PP} - (v_r)_{PQ} \left[ I_Q + (v_r)_{QQ} \right]^{-1} (v_r)_{QP}. \quad (3.43)$$

Como era de esperarse la matriz del “potencial efectivo sin unidades”  $\widehat{v}_r$ , es de  $N \times N$ , ya que los bloques de la matriz de transferencia reducida deben ser de  $N \times N$ . En la sección 3.3.2 haremos una breve discusión del potencial efectivo y la relevancia que tendrá en el presente trabajo.

De ahora en adelante denotaremos la matriz de transferencia reducida  $M_r$  de un potencial delta de la siguiente manera:

$$M_r = \begin{pmatrix} M_r^{11} & M_r^{12} \\ M_r^{21} & M_r^{22} \end{pmatrix}, \quad (3.44a)$$

siendo

$$\begin{aligned} M_r^{11} &= \alpha_r & M_r^{12} &= \beta_r, \\ M_r^{21} &= \gamma_r & M_r^{22} &= \delta_r. \end{aligned} \quad (3.44b)$$

Es fácil ver que las submatrices de la matriz de transferencia reducida, Ec. (3.42), cumplen con la relación de invariancia ante inversiones temporales de las matrices de transferencia, Ec. (2.82); por lo tanto, la matriz de transferencia reducida del  $r$ -ésimo potencial delta  $M_r$  es invariante ante inversiones temporales, y puede escribirse de la siguiente manera

$$M_r = \begin{bmatrix} M_r^{11} & M_r^{12} \\ [M_r^{12}]^* & [M_r^{11}]^* \end{bmatrix} \equiv I_{2N} + \epsilon_r, \quad (3.45)$$

donde hemos definido la matriz  $\epsilon_r$  como una matriz de dimensión  $2N$  cuyos elementos tienen la siguiente estructura:

$$(\epsilon_r)_{ab}^{jl} = (\widehat{v}_r)_{ab} (\vartheta_r)_{ab}^{jl}, \quad (3.46a)$$

$$(\vartheta_r)_{ab}^{jl} = (\vartheta(x_r))_{ab}^{jl} = i(-1)^j e^{-i[(-1)^j k_a + (-1)^{l+1} k_b] x_r}, \quad (3.46b)$$

con  $a$  y  $b$  índices de canales abiertos.

### La matriz de dispersión reducida de un potencial delta

Una vez que hemos obtenido las submatrices de la matriz de transferencia reducida, podemos aplicar la ecuaciones (2.88) para obtener las matrices de transmisión y reflexión de la matriz de dispersión reducida, obteniendo así:

$$r_r = -(T_r)_P [I_P + i\hat{v}_r]^{-1} [i\hat{v}_r] (T_r)_P, \quad (3.47a)$$

$$t'_r = (T_r)_P [I_P + i\hat{v}_r]^{-1} (T_r^{-1})_P, \quad (3.47b)$$

$$t_r = (T_r^{-1})_P [I_P + i\hat{v}_r]^{-1} (T_r)_P, \quad (3.47c)$$

$$r'_r = -(T_r^{-1})_P [i\hat{v}_r] [I_P + i\hat{v}_r]^{-1} (T_r^{-1})_P. \quad (3.47d)$$

Es fácil ver que las amplitudes de transmisión y reflexión de la ecuación (3.47) satisfacen la relación de invariancia ante inversiones temporales, Ec. (2.78).

### El potencial efectivo

Como vimos en la sección 3.3.2 las matrices de transferencia y de dispersión reducidas se pueden expresar en términos del potencial efectivo sin unidades  $\hat{v}_r$ , Ec. (3.43). Dicho potencial efectivo se puede expresar de la siguiente manera:

$$\hat{v}_r = \frac{k_P^{-1/2}}{\sqrt{2}} \hat{u}_r \frac{k_P^{-1/2}}{\sqrt{2}}, \quad (3.48)$$

donde hemos definido la matriz

$$\hat{u}_r = (u_r)_{PP} - (u_r)_{PQ} \frac{\kappa_Q^{-1/2}}{\sqrt{2}} \left[ I_Q + \frac{\kappa_Q^{-1/2}}{\sqrt{2}} (u_r)_{QQ} \frac{\kappa_Q^{-1/2}}{\sqrt{2}} \right]^{-1} \frac{\kappa_Q^{-1/2}}{\sqrt{2}} (u_r)_{QP}, \quad (3.49)$$

como el *potencial efectivo*, el cual tiene unidades de número de onda  $k$ ; además, hemos utilizado las matrices diagonales  $k_P$  y  $\kappa_Q$  que denotan las matrices de los números de onda y de los factores de atenuación longitudinales, respectivamente:

$$k_P = \begin{pmatrix} k_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & k_N \end{pmatrix}, \quad (3.50a)$$

$$\kappa_P = \begin{pmatrix} \kappa_{N+1} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \kappa_{N+N'} \end{pmatrix}. \quad (3.50b)$$

Si bien en la definición del *potencial efectivo*, Ec. (3.49), aparecen tanto los bloques  $PQ$ ,  $QP$  y  $QQ$  de la matriz  $u_r$  como las matrices de los factores de atenuación  $\kappa_Q$ , los elementos de matriz del potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$  sólo pueden tener índices  $a$  y  $b$  de

canales abiertos, es decir, la matriz  $\widehat{u}_r$  es de  $N \times N$ . Lo anterior es de esperarse, pues la matriz de transferencia reducida [cuyos bloques son lineales en el potencial efectivo, Ec. (3.42)] relaciona las amplitudes de canales abiertos del lado derecho del potencial con las del lado izquierdo [ver ecuación (2.49)]; no obstante que los elementos de matriz del potencial efectivo  $(\widehat{u}_r)_{ab}$  sólo pueden tener índices  $a$  y  $b$  de canales abiertos, éstos sí toman en cuenta transiciones virtuales a canales cerrados.

Los elementos de matriz del potencial efectivo  $\widehat{u}_r$  (o en su caso  $\widehat{v}_r$ ) tendrán una gran relevancia en el Capítulo 4, donde se estudiará la dispersión que produce un sistema desordenado. La importancia del potencial efectivo se deberá a que el desorden del sistema se expresará en términos de un modelo estadístico para los elementos de matriz del potencial efectivo, Ec. (4.16). En dicho estudio estaremos interesados en el régimen de dispersión débil que, en términos del potencial efectivo de un dispersor individual, quiere decir que el valor absoluto de la cantidad

$$(\widehat{v}_r)_{ab} = \frac{(\widehat{u}_r)_{ab}}{2\sqrt{k_a k_b}}, \quad (3.51)$$

deberá mucho menor que uno.

De la ecuación (3.49) nos damos cuenta que para obtener el potencial efectivo debemos multiplicar matrices que en principio son infinitas, ya que los bloques  $PQ$  y  $QQ$  involucran canales cerrados, los cuales son una infinidad. Podríamos pensar que es suficiente si consideramos algunos canales cerrados para realizar nuestros cálculos; sin embargo, si hacemos lo anterior no podremos mostrar el conocido resultado de que un potencial delta en dos dimensiones no dispersa [29]. Este último hecho lo verificamos mediante una simulación numérica en la que consideramos un dispersor cuya dependencia  $u_r(y)$  también es una delta, que la guía sólo admite un canal abierto ( $N = 1$ ) y tomamos en cuenta dos mil canales cerrados ( $N' = 2000$ ). Calculando el potencial efectivo para este dispersor obtuvimos que  $Re(t_{11}) \simeq 0.9998$ ,  $Im(t_{11}) \sim 10^{-5}$ ,  $Re(r_{11}) \sim 10^{-5}$  y  $Im(r_{11}) \sim 10^{-5}$ .

# Capítulo 4

## Dispersión cuántica en guías de ondas desordenadas

### 4.1. Introducción

El presente Capítulo es la parte central de la tesis y del artículo publicado en Physical Review E [22]. El objetivo es estudiar las propiedades estadísticas de la dispersión en una guía de ondas desordenada; es decir, queremos obtener, como función de la longitud de la guía  $L$ , los *valores esperados* de observables macroscópicos relacionados con la dispersión: por ejemplo, las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$ , las intensidades  $T_{aa_0}$  y  $R_{aa_0}$ , etc.

El desorden de la guía de ondas se representará mediante un potencial aleatorio basado en el modelo microscópico definido en el Capítulo 3 para el potencial cuasi-unidimensional  $U_{ab}(x)$  para el que definiremos un modelo estadístico en la sección 4.3.2.

Supongamos que nos interesa medir el observable  $F$  a cada muestra de un ensemble de guías de ondas desordenadas que macroscópicamente tienen las mismas características. Debido a la naturaleza aleatoria del potencial, cada guía del ensemble representa una posible realización del desorden microscópico; por lo tanto, la medición de  $F$  diferirá de manera importante de muestra a muestra dando lugar así a las *fluctuaciones* en la medición de  $F$ . Por esta razón el estudio de los observables requerirá un tratamiento estadístico que nos permita conocer el valor esperado de  $F$  como función de la longitud  $L$  y de los parámetros microscópicos relevantes, que como veremos en este Capítulo, serán los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ , Ec. (4.22). El valor esperado de una observable  $F$  se denotará por  $\langle F \rangle_L$ , donde  $\langle \rangle_L$  significa promedio sobre el ensemble de guías de ondas de longitud  $L$ .

Para obtener  $\langle F \rangle_L$  se construirá una ecuación diferencial que dé la *evolución* con la *longitud*  $L$ ; dicha ecuación será la *ecuación de difusión*, Ec. (4.41). La ecuación de difusión sólo dependerá de los detalles microscópicos a través de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$  que únicamente dependerán del segundo momento de la distribución del potencial microscópico, ver Ec. (4.22); por lo tanto, la ecuación de difusión será insensible al resto de detalles de la distribución del potencial microscópico, lo que le da el carácter de *universal*. La universalidad de la ecuación de difusión será consecuencia de un *teorema*

de *límite central generalizado* válido en el límite denso de *dispersión débil* (DWSL por sus siglas en inglés): Ecs. (4.32)-(4.32d).

Modelos previos [15] al que expondremos en el presente Capítulo dieron lugar a la ecuación de DMPK, la cual daba una buena descripción para el desorden volumétrico, no así para la descripción de desorden superficial. La no muy buena descripción que da la ecuación de DMPK en el caso de desorden de superficie se debe a que ésta considera que todos los caminos libres medios son iguales. Como veremos en el Capítulo 6, al aplicar el modelo de este trabajo al desorden superficial se obtendrá una mejor descripción: ver figuras 6.5 y 6.6. Mello y Tomsovic [18] desarrollaron un modelo con el que obtuvieron una ecuación de difusión para los valores esperados que considera la diferencia entre los caminos libres medios; dicha ecuación es muy parecida a la que obtendremos en el presente Capítulo y reproduce la ecuación de DMPK al considerar el modelo de canales equivalentes; sin embargo, al igual que la ecuación de DMPK, en la ecuación de Mello y Tomsovic no aparece la energía de manera explícita, lo cual se debe a que ambas ecuaciones representan una descripción válida en el límite de altas energías. La ecuación de difusión que se obtendrá en el presente Capítulo, además de considerar diferentes caminos libres medios, es válida para valores arbitrarios de la energía que satisfagan el DWSL. El régimen de altas energías de Mello y Tomsovic se recuperará (salvo algunas diferencias que existen entre los dos modelos) al tomar la *aproximación de longitud de onda corta* (SWLA por sus siglas en inglés): ver sección 4.4.3.

## 4.2. Transporte en sistemas cuasi-unidimensionales.

Consideremos un sistema dispersor de longitud  $L$  en el interior de una guía de ondas entre  $x = 0$  y  $x = L$ . La dispersión de este sistema se estudiará mediante su matriz de transferencia reducida  $M^{(L)}$ , Ec.(2.49) cuya estructura es la siguiente:

$$M^{(L)} = \begin{bmatrix} M^{11} & M^{12} \\ M^{21} & M^{22} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix}, \quad (4.1a)$$

donde las submatrices  $M^{jl}$  (con  $j, l = 1, 2$ ) o equivalentemente las matrices  $\alpha, \beta, \gamma$  y  $\delta$  de la ecuación (4.1a) son matrices de  $N \times N$  [ver ecuación (2.49)], con  $N$  el número de canales abiertos que admite la guía de ondas. Debido a que el operador hamiltoniano de nuestro sistema es invariante ante inversiones temporales (TRI), Ec. (2.82), la matriz de transferencia reducida  $M^{(L)}$  se puede escribir de la siguiente manera:

$$M^{(L)} = \begin{bmatrix} M^{11} & M^{12} \\ M^{21} & M^{22} \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} M^{11} & M^{12} \\ [M^{12}]^* & [M^{11}]^* \end{bmatrix}. \quad (4.1b)$$

Supongamos que a la derecha del sistema de longitud  $L$  se añade un “pequeño bloque” de longitud  $\delta L \ll L$  (ver figura 4.1) cuya matriz de transferencia  $M^{(L, \delta L)}$  se expresa de la siguiente manera:

$$M^{(L, \delta L)} = I_{2N} + \varepsilon^{(L, \delta L)}, \quad (4.2)$$

donde la matriz  $\varepsilon^{(L, \delta L)}$  representa la diferencia entre la situación en que no hay sistema dispersor, en cuyo caso  $\varepsilon^{(L, \delta L)} = 0$ , y la situación en que hay sistema dispersor, es decir,

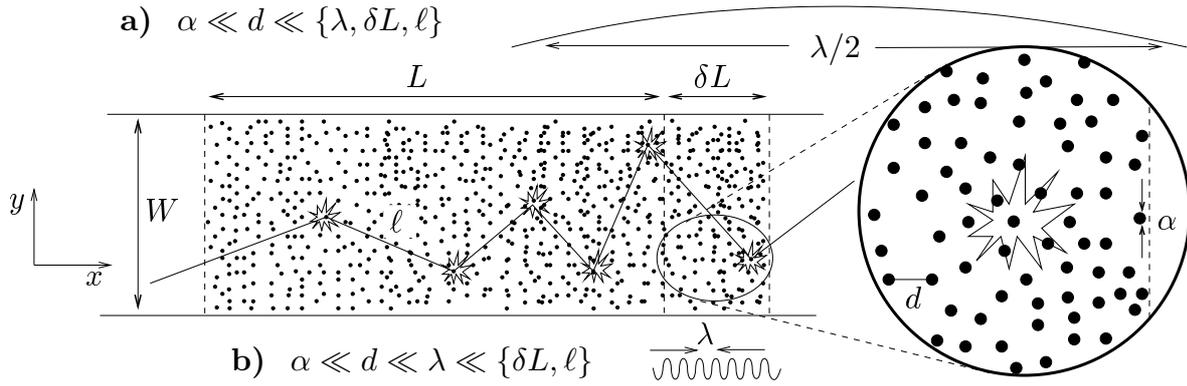


Figura 4.1: Representación esquemática del sistema desordenado (de longitud  $L$ ) y el bloque constitutivo (de longitud  $\delta L$ ). (a) y (b) definen los regímenes (ver sección 4.4) definidos en las desigualdades de la ecuación (4.37)

$\varepsilon^{L, \delta L} \neq 0$ . Se hace notar que este bloque pequeño lo hemos colocado en la posición  $L$ , por lo que su matriz de transferencia tendrá fases que dependerán de  $L$ . Por esta razón en la ecuación (4.2) hemos escrito  $M^{(L, \delta L)}$  y  $\varepsilon^{(L, \delta L)}$ . Este bloque recibe el nombre de bloque constitutivo o bloque constitutivo (BB), el cual jugará un papel trascendental en la obtención de la ecuación de difusión. En la sección 4.3 estudiaremos en detalle este sistema.

La dispersión del sistema de longitud  $L + \delta L$  se describe mediante la matriz de *transferencia extendida*  $\widetilde{M}^{(L + \delta L)}$  [ver ecuación (2.96)], que debido a la regla de combinación de las matrices de transferencia, Ec. (2.141), se puede expresar de la siguiente manera:

$$\widetilde{M}^{(L + \delta L)} = \widetilde{M}^{(L, \delta L)} \widetilde{M}^{(L)}, \quad (4.3)$$

donde las matrices  $\widetilde{M}^{(L, \delta L)}$  y  $\widetilde{M}^{(L)}$  son las matrices de transferencia extendidas del bloque constitutivo y del sistema de longitud  $L$ , respectivamente; sin embargo, la cantidad que nos interesa es la matriz de transferencia *reducida*  $M^{(L + \delta L)}$ , ya que ésta da la relación de las amplitudes del lado derecho en términos de las amplitudes de canales abiertos del lado izquierdo [ver ecuación (2.49a)]. La matriz  $M^{(L + \delta L)}$  puede obtenerse de la extendida  $\widetilde{M}^{(L + \delta L)}$  mediante el procedimiento que explicamos en la sección 2.5.3 [ver ecuaciones (2.100) y (2.101)]; no obstante lo anterior, en el presente trabajo *aproximaremos* la matriz reducida  $M^{(L + \delta L)}$  como el producto de las matrices reducidas del sistema de longitud  $L$   $M^{(L)}$  y del bloque constitutivo  $M^{(L, \delta L)}$ , es decir:

$$M^{(L + \delta L)} = M^{(L, \delta L)} M^{(L)}. \quad (4.4)$$

Por supuesto, la regla de combinación es válida para la matriz de *transferencia extendida*  $\widetilde{M}$  que incluye explícitamente la contribución de canales cerrados y no para la matriz de transferencia reducida  $M$ ; por lo tanto, la ecuación (4.4) es una aproximación de la ecuación (4.3) que no considera de *manera apropiada* la contribución de los canales cerrados; sin embargo, debemos recordar que las matrices de transferencia reducidas  $M^{(L, \delta L)}$  y  $M^{(L)}$  sí tienen información de los canales cerrados, ya que como se muestra

en la ecuación (2.100):

$$M = M\left(\widetilde{M}\right). \quad (4.5)$$

Antes de continuar con la discusión justificaremos la razón por la que usaremos la ecuación (4.4) en vez de la ecuación (4.3). Recordemos que el presente Capítulo es la parte central del artículo publicado en Physical Review E [22], en el cual nos interesaban las propiedades estadísticas de las intensidades  $T_{ab}$ ,  $R_{ab}$  y la conductancia  $g$ . Para ese entonces se sabía, de simulaciones numéricas, que para *una realización específica* del desorden microscópico la inclusión de los canales cerrados en el cálculo de los valores de  $T_{ab}$ ,  $R_{ab}$  y  $g$  era importante; sin embargo, de las simulaciones numéricas también se observó que las propiedades estadísticas de estas cantidades son, en muy buena aproximación, independientes del número de canales cerrados que se consideren en el cálculo numérico. Por esa razón, en el artículo publicado en Physical Review E [22] se utilizó la aproximación de la ecuación (4.4). Posteriormente a la publicación de dicho artículo se buscó la forma de tomar en cuenta adecuadamente la contribución de los canales cerrados, lo que dio lugar a la implementación de la serie Born (ver Capítulo 7), método que sólo es aplicable en el *régimen balístico*. Dicho método predice, en el régimen balístico, que *las propiedades estadísticas de las amplitudes* de transmisión  $t_{ab}$  y de reflexión  $r_{ab}$  sí dependen de los canales cerrados mientras que *las propiedades estadísticas* de las intensidades  $T_{ab}$ ,  $R_{ab}$  y la conductancia  $g$  no dependen de los canales cerrados (al menos en los primeros órdenes de la serie de Born). En las figuras 7.17, 7.18, 7.21 y 7.22 se muestran el resultado de la simulación numérica para las partes real e imaginaria de  $\langle t_{11} \rangle_{Num}$  y  $\langle r_{11} \rangle_{Num}$  respectivamente, en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando  $N' = 0, 1, 2$  canales cerrados; análogamente en las figuras 7.26, 7.27 y 7.31 se muestran, respectivamente, los resultados numéricos para  $\langle T_{aa} \rangle_{Num}$ ,  $\langle T_{a \neq b} \rangle_{Num}$  y  $\langle R_{ab} \rangle_{Num}$  en el caso de dos canales abiertos ( $N = 2$ ) y considerando  $N' = 0, 1, 2, 3$  canales cerrados. En esas figuras se observa que los valores esperados de las amplitudes sí son sensibles al número de canales cerrados que se consideren en el cálculo, mientras que las intensidades son insensibles al número de canales cerrados.

Regresando a la discusión, al implementar la aproximación de la ecuación (4.4) se obtiene que la matriz de transferencia del sistema de longitud  $L + \delta L$  es:

$$M^{(L+\delta L)} = M^{(L)} + \varepsilon^{(L,\delta L)} M^{(L)}, \quad (4.6a)$$

$$= M^{(L)} + \delta M^{(L,\delta L)} \quad (4.6b)$$

donde hemos definido

$$\delta M^{(L,\delta L)} = \varepsilon^{(L,\delta L)} M^{(L)}. \quad (4.6c)$$

De ahora en adelante nos referiremos a la matriz de transferencia reducida o de canales abiertos  $M$  como la matriz de transferencia.

Debido a que hemos elegido la matriz de transferencia para describir los procesos de dispersión, el observable  $F$  deberá expresarse como función de ésta, es decir,  $F = F(M)$ , donde  $F(M)$  podría ser una amplitud  $t_{ab}$ , una intensidad  $T_{ab}$  o bien la conductancia  $g$ .

Recordemos que nuestro interés es obtener los valores esperados de observables macroscópicos como función de la longitud  $L$ . Para obtener el valor esperado de  $F(M)$  del sistema de longitud  $L + \delta L$  consideraremos los siguientes *ensembles estadísticamente independientes*:

- El primero de estos ensembles contiene sistemas, todos de longitud  $L$ , donde cada uno representa una realización diferente del desorden microscópico. A cada muestra de este ensemble se le asigna una matriz de transferencia  $M^{(L)}$  generando así un *ensemble de matrices de transferencia aleatorias*.
- De manera análoga, el segundo ensemble contiene bloques constitutivos de longitud  $\delta L \ll L$ . A cada muestra de este ensemble se le asigna una matriz de transferencia  $M^{(L, \delta L)}$ .

Con estos dos ensembles de matrices de transferencia construimos el ensemble de sistemas de longitud  $L + \delta L$ , en el cual a cada muestra se le asigna una matriz de transferencia  $M + \delta M$ : ver ecuación (4.6); por lo tanto,  $F(M + \delta M)$  se puede expresar de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 F(M + \delta M) &= F(M) + \sum_{\substack{i\lambda \\ a\alpha}} (\delta M_{a\alpha}^{i\lambda}) \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{i\lambda h\mu \\ a\alpha c\beta}} (\delta M_{a\alpha}^{i\lambda}) (\delta M_{c\beta}^{h\mu}) \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} M_{c\beta}^{h\mu}} \\
 &+ \dots \\
 &= F(M) + \sum_{\substack{ij\lambda \\ ab\alpha}} \varepsilon_{ab}^{ij} M_{b\alpha}^{j\lambda} \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} M_{c\beta}^{h\mu}} \\
 &+ \dots,
 \end{aligned} \tag{4.7a}$$

donde hemos utilizado la ecuación (4.6c) y omitido los superíndices  $L$  y  $\delta L$  de las matrices  $M^{(L)}$  y  $\varepsilon^{(L, \delta L)}$  (o  $\delta M^{(L, \delta L)}$ ). Los índices de bloque (ver ecuación 4.1a)  $i, j, h, l, \lambda, \mu$  toman valores de 1 y 2, mientras que los de canal  $a, b, c, d, \alpha, \beta$  lo hacen de 1 a  $N$ . Al promediar la ecuación (4.7a) sobre el ensemble y recordar que las matrices  $M^{(L)}$  y  $\varepsilon^{(\delta L)}$  (equivalentemente  $M^{(L, \delta L)}$ ) son estadísticamente independientes se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \langle F(M) \rangle_{L+\delta L} &= \langle F(M) \rangle_L + \sum_{\substack{ij\lambda \\ ab\alpha}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \rangle_{L, \delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \right\rangle_L \\
 &+ \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L + \dots, \tag{4.7b}
 \end{aligned}$$

donde las cantidades  $\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \rangle_{L, \delta L}$  y  $\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L}$  son los valores esperados de los elementos de matriz  $\varepsilon^{(L, \delta L)}$ . La dependencia de estos momentos en  $L$  se debe a que el Building Block se colocó a la derecha del sistema de longitud  $L$ : ver ecuaciones (4.38)-(4.39b).

Al usar la ecuación (4.7b) y el modelo estadístico del bloque constitutivo (ver sección 4.3.2) obtendremos la *ecuación de difusión* que gobierna la evolución con la longitud  $L$  de  $\langle F(M) \rangle_L$ , siendo ésta:

$$\frac{\partial \langle F(M) \rangle_L}{\partial L} = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} D_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L) \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L, \quad (4.8)$$

donde  $D_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L)$  es el coeficiente de difusión, el cual está íntimamente relacionado con el segundo momento  $\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L}$ .

### 4.3. Construcción del bloque constitutivo

#### 4.3.1. Matriz de transferencia del bloque constitutivo

El objetivo de esta sección es construir la matriz de transferencia  $M^{(L, \delta L)}$  del bloque constitutivo. Para hacer lo anterior utilizaremos el modelo microscópico expuesto en el Capítulo 3, es decir, consideramos que el potencial del bloque constitutivo es una secuencia de  $m$  potenciales delta en la coordenada  $x$  separados entre sí una distancia fija  $d$  (ver figura 4.2), de tal manera que la longitud del bloque es  $\delta L = md$ ; por lo tanto, el potencial cuasi-unidimensional  $U_{ab}(x)$  del bloque tiene la estructura de la ecuación (3.13), que reescribimos a continuación:

$$U_{ab}(x) = \sum_{r=1}^m [U_r(x)]_{ab} = \sum_{r=1}^m (u_r)_{ab} \delta(x - x_r), \quad (4.9a)$$

$$[U_r(x)]_{ab} = (u_r)_{ab} \delta(x - x_r). \quad (4.9b)$$

Los elementos de matriz del potencial “desnudo”  $(u_r)_{ab}$  serán las *cantidades aleatorias* del problema; sin embargo, el modelo estadístico que definiremos en la sección 4.3.2 no será para el potencial  $(u_r)_{ab}$ , sino para el *potencial efectivo*  $(\hat{u}_r)_{ab}$ : ver ecuación (3.49).

La matriz de transferencia  $M_r$  del  $r$ -ésimo potencial delta se obtuvo en la sección 3.3.2, Ecs. (3.45) y (3.46). Dicha matriz de transferencia es proporcional al potencial efectivo sin unidades  $(\hat{v}_r)_{ab}$ , Ec. (3.43), o equivalentemente al potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$ , Ec. (3.49). Para construir la matriz de transferencia del Building Block  $M^{(L, \delta L)}$ , Ec. (4.2), aplicaremos la aproximación de la ecuación (4.4) a toda la secuencia de potenciales delta, es decir:

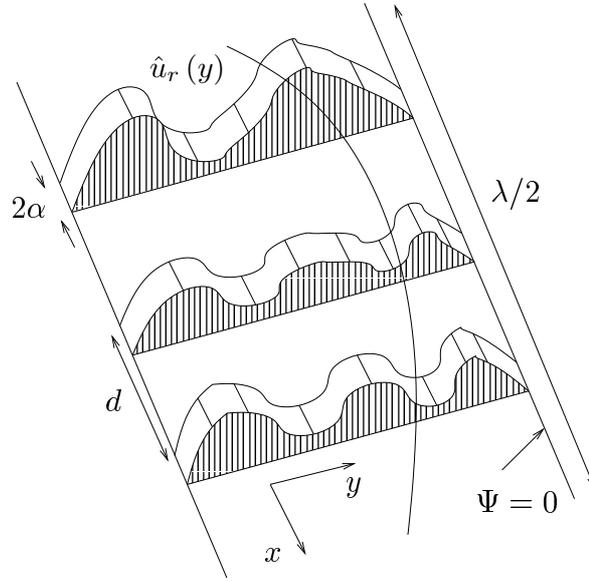


Figura 4.2: Representación esquemática de la secuencia de potenciales delta.

$$M^{(L,\delta L)} = M_m \cdots M_1 = (I_{2N} + \epsilon_m) \cdots (I_{2N} + \epsilon_1) \quad (4.10a)$$

$$= I_{2N} + \sum_r \epsilon_r + \sum_{r_1 > r_2} \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} + \cdots \quad (4.10b)$$

$$+ \sum_{r_1 > \cdots > r_\mu} \epsilon_{r_1} \cdots \epsilon_{r_\mu} + \cdots \quad (4.10c)$$

$$= I_{2N} + \varepsilon^{(L,\delta L)}. \quad (4.10d)$$

La Ec. (4.10) define la matriz  $\varepsilon^{(L,\delta L)}$  de la Ec. (4.2); ésta se reescribe de la siguiente manera

$$\varepsilon^{(L,\delta L)} = \sum_r \epsilon_r + \sum_{r_1 > r_2} \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} + \cdots + \sum_{r_1 > \cdots > r_\mu} \epsilon_{r_1} \cdots \epsilon_{r_\mu} + \cdots \quad (4.11a)$$

$$= \sum_{\mu} \varepsilon^{(\mu)}, \quad (4.11b)$$

$$\varepsilon^{(\mu)} = \sum_{r_1 > \cdots > r_\mu} \epsilon_{r_1} \cdots \epsilon_{r_\mu}, \quad (4.11c)$$

donde  $\varepsilon^{(\mu)}$  define la contribución a orden  $\mu$  en  $\epsilon$ 's individuales. De ahora en adelante omitiremos la dependencia en  $L$  y en  $\delta L$  de la matriz  $\varepsilon$ .

### 4.3.2. Propiedades estadísticas del bloque constitutivo

Para obtener la ecuación de difusión, Ec. (4.8), a partir de la ecuación (4.7b) hace falta conocer los valores esperados de la matriz  $\varepsilon$  del bloque constitutivo que aparecen en la ecuación (4.7b). Para obtener esos valores esperados debemos obtener la estadística de la matriz  $\varepsilon$ , lo cual conseguiremos al proponer un modelo estadístico para el potencial efectivo, ya que la matriz  $\varepsilon$  del bloque constitutivo depende de las matrices  $\epsilon_r$  de los dispersores individuales, Ec. (4.11), y éstos a su vez de los elementos de matriz del potencial efectivo  $(\hat{v}_r)_{ab}$  [ver ecuación (3.46)].

#### Modelo estadístico del potencial efectivo

El modelo estadístico que propondremos para el potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$  (o equivalentemente  $(\hat{v}_r)_{ab}$ ) tiene las siguientes características:

- Considera que los  $m$  potenciales que constituyen el bloque constitutivo son estadísticamente independientes y están idénticamente distribuidos.
- Por simplicidad imponemos que todos los momentos de orden impar de la distribución del potencial efectivo son cero, es decir, que la función de distribución es simétrica; de igual manera supondremos que la distribución de los potenciales efectivos es tal que todos los momentos pares son proporcionales al segundo momento; es decir,

$$\mu_{2p}^{(v)}(ab) \sim \left[ \mu_2^{(v)}(ab) \right]^p, \quad (4.12a)$$

$$\langle [(\hat{v}_r)_{ab}]^{2p} \rangle \sim \langle [(\hat{v}_r)_{ab}]^2 \rangle^p. \quad (4.12b)$$

Lo anterior se logra al considerar cualquier función de distribución que se pueda escribir de la siguiente manera:

$$f \left[ \frac{(\hat{v}_r)_{ab}}{\sqrt{\mu_2^{(v)}(ab)}} \right]. \quad (4.13)$$

Existen muchos ejemplos de funciones de distribución que se pueden escribir de esta manera; Por ejemplo, si la distribución de una variable aleatoria  $x$  es gaussiana, entonces los momentos pares de esta variable satisfacen siguiente relación:

$$\langle x^{2p} \rangle = (2p - 1)!! \langle x \rangle^p \quad (4.14)$$

- La distribución del potencial efectivo debe ser tal que los valores que éste tome satisfagan la siguiente condición:

$$|(\hat{u}_r)_{ab}| \ll \sqrt{k_a k_b}, \quad (4.15)$$

es decir, que los dispersores sean *débiles*. El régimen definido por la ecuación (4.15) será fundamental para definir el *límite denso de dispersión débil*, en el cual obtendremos la ecuación de difusión.

El  $p$ -ésimo momento del potencial efectivo lo denotaremos de la siguiente manera

$$\mu_p^{(u)}(a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_p b_p) = \left\langle (\widehat{u}_r)_{a_1 b_1} (\widehat{u}_r)_{a_2 b_2} \cdots (\widehat{u}_r)_{a_p b_p} \right\rangle, \quad (4.16a)$$

$$\mu_p^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_p b_p) = \left\langle (\widehat{v}_r)_{a_1 b_1} (\widehat{v}_r)_{a_2 b_2} \cdots (\widehat{v}_r)_{a_p b_p} \right\rangle. \quad (4.16b)$$

Debido a que todos los momentos de orden impar son cero tenemos:

$$\mu_{2p+1}^{(u)}(a_1 b_1, a_1 b_1, \dots, a_{2p+1} b_{2p+1}) = 0, \quad (4.16c)$$

$$\mu_{2p+1}^{(v)}(a_1 b_1, a_1 b_1, \dots, a_{2p+1} b_{2p+1}) = 0. \quad (4.16d)$$

Como veremos más adelante el resultado final sólo dependerá de los dos primeros momentos de la distribución del potencial efectivo. De acuerdo con las ecuaciones (4.16a) y (4.16c), podemos escribir estos dos momentos de la siguiente manera:

$$\langle (\widehat{u}_r)_{ab} \rangle = \mu_1^{(u)}(ab) = 0, \quad (4.16e)$$

$$\langle (\widehat{u}_r)_{ab} (\widehat{u}_s)_{cd} \rangle = \mu_2^{(u)}(ab, cd) \delta_{rs}; \quad (4.16f)$$

donde hemos utilizado que los dispersores son estadísticamente independientes. Debido a que en general tendremos un segundo momento del estilo de (4.16f) con  $a, b, c$  y  $d$  arbitrarios, es conveniente introducir los coeficientes de correlación entre los elementos de matriz  $(\widehat{u}_r)_{ab}$  y  $(\widehat{u}_r)_{cd}$  (que son idénticos a los coeficientes de correlación entre  $(\widehat{v}_r)_{ab}$  y  $(\widehat{v}_r)_{cd}$ ):

$$C(ab, cd) = \frac{\mu_2^{(u)}(ab, cd)}{\left[ \mu_2^{(u)}(ab) \mu_2^{(u)}(cd) \right]^{1/2}} = \frac{\mu_2^{(v)}(ab, cd)}{\left[ \mu_2^{(v)}(ab) \mu_2^{(v)}(cd) \right]^{1/2}}, \quad (4.17)$$

donde se ha definido la cantidad

$$\mu_2^{(u)}(ab) \equiv \mu_2^{(u)}(ab, ab), \quad (4.18a)$$

$$\mu_2^{(v)}(ab) \equiv \mu_2^{(v)}(ab, ab). \quad (4.18b)$$

Una vez que hemos definido el modelo estadístico de los elementos de matriz del potenciales  $(\widehat{u}_r)_{ab}$ , podemos encontrar la estadística de los elementos de matriz  $(\epsilon_r)_{ab}^{ij}$  y con estas la estadística de la matriz del bloque constitutivo. De las ecuaciones (3.46a), (4.16e) y (4.16f) se obtiene:

$$\langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} \rangle = 0, \quad (4.19a)$$

$$\langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} (\epsilon_s)_{cd}^{hl} \rangle = \mu_2^{(v)}(ab, cd) \left[ (\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_r)_{cd}^{hl} \right] \delta_{rs}. \quad (4.19b)$$

### Los caminos libres medios $\ell_{ab}$

De la ecuación (4.11) se puede ver que los valores esperados de los elementos de matriz  $\varepsilon$  que aparecen en la ecuación (4.7b) dependerán de los valores esperados de productos de matrices  $\epsilon_r$  de los dispersores individuales como los que se ilustran en la ecuación (4.19); por lo tanto, de la ecuación (4.19) nos damos cuenta que los momentos de la distribución del potencial efectivo  $(\hat{v}_r)_{ab}$  aparecerán en la estadística de la matriz  $\varepsilon$ . Por esta razón es importante que relacionemos los momentos del potencial efectivo con cantidades microscópicas relevantes, las cuales serán los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ .

El inverso del camino libre medio  $1/\ell_{ab}$  se define como la suma incoherente de la reflexiones del canal  $b$  al canal  $a$  de una secuencia de dispersores individuales por unidad de longitud; es decir:

$$\frac{1}{\ell_{ab}(k)} = \nu \langle |[r_r(k)]_{ab}|^2 \rangle, \quad (4.20)$$

donde  $\nu$  es la densidad de dispersores que en nuestro caso es  $\nu = 1/d$ . El camino libre medio  $\ell_{ab}$ , Ec. (4.20), es el análogo (en esta geometría) del coeficiente de atenuación  $\alpha$ , Ec. (1.52), discutido en el caso tridimensional.

En el modelo del potencial microscópico que presentamos en el capítulo 3, un dispersor individual es un potencial delta, por lo que podemos usar la ecuación (3.47) para expresar la amplitud de reflexión de canales abiertos del  $r$ -ésimo dispersor de la siguiente manera:

$$(r_r)_{ab} = -e^{ik_a x_r} \sum_{c=1}^N \left[ \frac{1}{I + i\hat{v}_r} \right]_{ac} [i\hat{v}_r]_{cb} e^{ik_b x_r}. \quad (4.21a)$$

De la ecuación (4.21a) vemos que la amplitud de reflexión  $r_{ab}$  depende de  $k$ , ya que el potencial efectivo sin unidades  $(\hat{v}_r)_{ab}$ , Ec. (3.51), depende de los números de onda longitudinales  $k_a$  y  $k_b$  que a su vez dependen de  $k$ , Ec. (2.9b); por lo tanto, como expresa en la ecuación (4.20) el camino libre medio  $\ell_{ab}$  depende de  $k$ . Para simplificar la notación, de ahora en adelante omitiremos la dependencia en  $k$  del camino libre medio.

Una de las suposiciones que hicimos para el modelo estadístico del potencial efectivo es que los dispersores son *débiles*, es decir, que la distribución de  $(\hat{v}_r)_{ab}$  es tal que éste satisface la ecuación (4.15) o equivalentemente que  $|(\hat{v}_r)_{ab}| \ll 1$ . Tomando en cuenta esta suposición, podemos aproximar la amplitud de reflexión del  $r$ -ésimo dispersor de la siguiente manera:

$$(r_r)_{ab} \simeq -e^{ik_a x_r} [i\hat{v}_r]_{ab} e^{ik_b x_r}, \quad (4.21b)$$

por lo que el camino libre medio se aproxima de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\ell_{ab}} \approx \frac{\langle [(\hat{v}_r)_{ab}]^2 \rangle}{d} \quad (4.22a)$$

$$= \frac{\mu_2^{(v)}(ab)}{d} = \frac{\mu_2^{(u)}(ab)}{4k_a k_b d} \quad (4.22b)$$

La ecuación (4.22) da el valor que debe tomar el segundo momento de la distribución del potencial efectivo  $(\hat{v}_r)_{ab}$  en función de la densidad de dispersores y del camino libre medio, es decir:

$$\mu_2^{(v)}(ab) = \langle [(\hat{v}_r)_{ab}]^2 \rangle = \frac{d}{\ell_{ab}}; \quad (4.23)$$

por lo tanto, usando las ecuaciones (4.17) y (4.23) obtenemos la expresión en general de un segundo momento  $\mu_2^{(v)}(ab, cd)$  siendo ésta:

$$\mu_2^{(v)}(ab, cd) = C(ab, cd) \left[ \mu_2^{(v)}(ab) \mu_2^{(v)}(cd) \right]^{1/2} \equiv \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} d. \quad (4.24)$$

Debido a las suposiciones que hemos hecho para la distribución del potencial efectivo  $(\hat{v}_r)_{ab}$ , Ec. (4.12), los momentos de orden par superiores al segundo cumplen la siguiente relación:

$$\mu_{2p}^{(v)}(ab) \sim \left( \frac{d}{\ell_{ab}} \right)^p, \quad (4.25a)$$

$$\langle [(\hat{v}_r)_{ab}]^{2p} \rangle \sim \left( \frac{d}{\ell_{ab}} \right)^p. \quad (4.25b)$$

La suposición que hacemos para los momentos del potencial efectivo de orden superior al segundo, Ec. (4.25), tendrá como consecuencia que, en el *límite denso de dispersión débil* (DWSL) [ver ecuación (4.32)], la ecuación de difusión, Ec. (4.41), sólo dependerá del segundo momento de la distribución de los potenciales microscópicos. Si la ecuación (4.25) no se cumpliera, todos los momentos superiores al segundo contribuirían en el límite denso (DWSL) y no obtendríamos la ecuación de difusión, ya que no tendríamos un *teorema de límite central*.

Para discusiones futuras es conveniente definir el *inverso del camino libre medio de transporte*  $1/\ell$  como la reflexión total por unidad de longitud de los canales salientes  $a$  (habiendo incidido por algún canal abierto  $b$ ) y promediada sobre todos los canales de incidencia  $b$ , que de acuerdo con las ecuaciones (4.20)-(4.22) se expresa como:

$$\frac{1}{\ell} = \frac{1}{N} \sum_{a,b=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \quad (4.26)$$

### Primero y segundo momentos de la matriz de transferencia del bloque constitutivo

Recordemos que nos interesa obtener el primero y segundo momentos de la matriz  $\varepsilon$  del bloque constitutivo que aparecen en la ecuación (4.7b). Con el objeto de simplificar el cálculo, por el momento consideraremos que el bloque constitutivo está centrado en  $x = 0$ , de tal manera que ocupa el espacio entre  $-\delta L/2$  y  $\delta L/2$ . Las expresiones para la matriz  $\varepsilon$  cuando el bloque constitutivo está entre  $L$  y  $L + \delta L$  se obtienen al hacer la translación correspondiente: ver sección 4.4 ecuación (4.38).

Supongamos que el número  $m$  de dispersores que forman el Building Block es impar (lo cual será irrelevante en el resultado final), de tal manera que las posiciones de los dispersores las expresamos de la siguiente manera:

$$x_r = rd, \quad (4.27a)$$

$$r = -\frac{m-1}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{m-1}{2}, \quad (4.27b)$$

$$\delta L = (m-1)d. \quad (4.27c)$$

Debido a que las matrices individuales  $\epsilon_r$ 's heredan la independencia estadística de los potenciales efectivos, al ser proporcionales a éstos, al promediar la ecuación (4.11) obtenemos el primer momento de la de la matriz  $\varepsilon$  del bloque constitutivo, siendo éste:

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{\mu}^m \langle \varepsilon^{(\mu)} \rangle \quad (4.28a)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_r \langle \epsilon_r \rangle + \sum_{r_1 > r_2} \langle \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} \rangle + \dots + \sum_{r_1 > \dots > r_{\mu}} \langle \epsilon_{r_1} \dots \epsilon_{r_{\mu}} \rangle + \dots \\ &= 0, \end{aligned} \quad (4.28b)$$

por lo que

$$\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \rangle_{\delta L} = 0. \quad (4.28c)$$

De igual manera el segundo momento de la matriz de  $\varepsilon$  que aparece en la ecuación (4.7b), resulta ser igual a:

$$\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_{\mu\mu'}^m \left\langle [\varepsilon^{(\mu)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(\mu')}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L}, \quad (4.29a)$$

que al desarrollar hasta cuarto orden en las matrices de los dispersores individuales  $\epsilon_r$  se obtiene:

$$\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \left\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} \quad (4.29b)$$

$$+ \left\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} + \left\langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} \quad (4.29c)$$

$$+ \left\langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} \quad (4.29d)$$

$$+ \left\langle [\varepsilon^{(3)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} + \left\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(3)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} \quad (4.29e)$$

+ ...

Debido a que los momentos de orden impar del potencia efectivo son cero y que los dispersores son estadísticamente independientes, Ec. (4.16), en la ecuación (4.29) sólo contribuyen los términos de orden par en las  $[\epsilon_r]_{ab}^{ij}$  individuales de las ecuaciones (4.29b) y (4.29d); por lo tanto, el segundo momento se escribe, hasta cuarto orden en las  $[\epsilon_r]_{ab}^{ij}$  individuales, como

$$\langle \epsilon_{ab}^{ij} \epsilon_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} + \langle [\epsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} + \dots \quad (4.30)$$

### Límite denso de dispersión débil (DWSL)

Pongamos nuestra atención en el primer término de la ecuación (4.30), el cual podemos expresar en términos de las matrices individuales  $[\epsilon_r]_{ab}^{ij}$  de la siguiente manera:

$$\langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_{r,s} \langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} (\epsilon_s)_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_r \langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} (\epsilon_r)_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L}, \quad (4.31a)$$

donde hemos utilizado que los dispersores son estadísticamente independientes. Utilizando las ecuaciones (4.19b) y (4.24) se obtiene que el término de segundo orden en matrices individuales  $[\epsilon_r]_{ab}^{ij}$  de la ecuación (4.30) se escribe como:

$$\langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \mu_2^{(v)}(ab, cd) \sum_{r=1}^m [(\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_r)_{cd}^{hl}] \quad (4.31b)$$

$$= \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} \sum_{r=1}^m [(\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_r)_{cd}^{hl}] \cdot d. \quad (4.31c)$$

Como mencionamos al inicio del presente Capítulo, nuestro interés es obtener una ecuación diferencial que de la evolución con la longitud  $L$  de los valores esperados; por lo tanto, debemos tomar el límite continuo, es decir, considerar que el número de dispersores en un bloque constitutivo es muy grande y que la distancia entre ellos es muy pequeña, pero siempre manteniendo fijo el tamaño del bloque constitutivo  $\delta L$ :

$$d \rightarrow 0, \quad (4.32a)$$

$$m \rightarrow \infty, \quad (4.32b)$$

$$\delta L = md; \quad (4.32c)$$

sin embargo, además de mantener fijo el tamaño del bloque constitutivo, debemos mantener fijo el camino libre medio, Ec. (4.22). Para lograr lo anterior se toma el caso extremo de la condición de dispersión débil, Ec. (4.15), de tal manera que para una *energía fija* el potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$  es extremadamente débil, por lo que:

$$\mu_2^{(u)}(ab) \rightarrow 0. \quad (4.32d)$$

En este *límite denso* (continuo) y *de dispersión débil* tanto la separación entre dispersores  $d$  como el segundo momento del potencial efectivo  $\mu_2^{(u)}(ab)$  tienden a cero pero manteniendo fijo el camino libre medio  $\ell_{ab}$ , Ec. (4.22), para una energía fija. El conjunto de expresiones de la ecuación (4.32) definen *límite denso de dispersión débil* (DWSL por sus siglas en inglés: dense weak scattering limit).

En el límite DWS, la suma de la Ec. (4.31c) se sustituye por la siguiente integral:

$$\begin{aligned}\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) &\equiv \lim_{DWS} \sum_r \left[ (\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_r)_{cd}^{hl} \right] \cdot d \\ &= \int_{-\delta L/2}^{\delta L/2} \vartheta_{ab}^{ij}(x) \vartheta_{cd}^{hl}(x) dx,\end{aligned}\quad (4.33)$$

donde la cantidad  $\vartheta_{ab}^{ij}(x)$  es la versión continua de la Ec. (3.46) y la función  $\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L)$  tiene la siguiente dependencia:

$$\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) = (-1)^{i+h+1} \frac{\sin \frac{K_{ab,cd}^{ij,hl} \delta L}{2}}{\frac{K_{ab,cd}^{ij,hl}}{2}}, \quad (4.34a)$$

siendo

$$K_{ab,cd}^{ij,hl} = (-1)^i k_a + (-1)^{j+1} k_b + (-1)^h k_c + (-1)^{l+1} k_d, \quad (4.34b)$$

una cantidad con unidades de longitud de onda que es simétrica ante el intercambio de índices  $ab \leftrightarrow cd$  e  $ij \leftrightarrow hl$ , es decir:

$$K_{ab,cd}^{ij,hl} = K_{cd,ab}^{hl,ij}. \quad (4.34c)$$

Por lo tanto, en el DWSL:

$$\lim_{DWS} \left\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} = \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{\ell_{ab} \ell_{cd}}} \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L). \quad (4.35)$$

El cuarto orden de la ecuación (4.30) no contribuye en la ecuación de difusión, ya que, en el DWSL, el término relevante es el de segundo orden en potencias de  $\delta L$ .

## 4.4. Coeficientes de difusión y ecuación de difusión

### 4.4.1. Los regímenes

Cuando introducimos el sistema bloque constitutivo en la sección 4.2 supusimos que este sistema tenía que ser pequeño comparado con el sistema original, de tal manera que  $\delta L \ll L$ ; sin embargo, como nos interesa describir al sistema como un continuo, en la sección anterior definimos el límite denso de dispersión débil (4.32), en el que el número de dispersores del bloque constitutivo tiende a infinito, mientras que la distancia entre éstos tiende a cero, y la longitud del sistema se mantiene constante; por lo tanto, si bien el

Building Block es pequeño comparado con el sistema de longitud  $L$ , es lo suficientemente grande para que en su interior hayan muchos dispersores. Por otro lado, como veremos en esta sección, también necesitaremos que el tamaño del bloque constitutivo sea mucho menor que los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ , Ec. (4.22), y el camino libre medio total  $\ell$ , Ec. (4.26). Lo anterior se debe a dos razones:

- El paso previo para obtener la ecuación de difusión consistirá en tomar el límite  $\delta L \rightarrow 0$ , pero manteniendo  $\ell$  finito.
- Como veremos en el Capítulo 7, cuando el sistema es muy pequeño comparado con el camino libre medio, es decir, cuando consideramos el régimen balístico, podemos obtener el valor esperado de un observable como una serie de potencias en  $\delta L/\ell$ ; sin embargo, tenemos evidencia de que, en general, dicho desarrollo es una serie asintótica (ver Apéndice D), válida únicamente cuando  $\delta L/\ell \ll 1$ .

Lo anterior quiere decir que el bloque constitutivo se considera como un sistema balístico, es decir, que satisface la relación:

$$\delta L \ll \ell. \quad (4.36)$$

Como mencionamos en la introducción de este Capítulo, en trabajos previos a éste [15, 18], la longitud de onda  $\lambda$  no aparece en la descripción, ya que los modelos que se usaron en dichos trabajos son válidos en el límite de altas energías,  $k \rightarrow \infty$ , ó equivalentemente de longitudes de onda corta  $\lambda \rightarrow 0$ . En este trabajo se ha considerado un modelo en el que el número de onda  $k$  es arbitrario, siempre que cumpla con el régimen de dispersión débil, (4.15). En el caso general, es decir, en el que consideraremos un valor de  $k$  arbitrario obtendremos el resultado más importante del presente trabajo: la ecuación de difusión cuyos parámetros fijos serán los caminos libres medios  $\ell_{ab}$  y los números de onda longitudinales  $k_a$ : ver sección 4.4.2. Posteriormente, en la sección 4.4.3 obtendremos la ecuación de difusión en la aproximación de longitud de onda corta  $k \rightarrow \infty$  (SWLA), en la que la ecuación de difusión será independiente del número de onda  $k$ . Estos dos regímenes representan, respectivamente, la idealización de las siguientes desigualdades (ver figura 4.1)

- El régimen arbitrario:

$$\alpha \ll d \ll \{\delta L \ll \lambda, \ell\}, \quad (4.37a)$$

en el que la ecuación de difusión resultante *depende del número de onda  $k$* .

- Aproximación de longitud de onda corta (SWLA):

$$\alpha \ll d \ll \lambda \ll \{\delta L \ll \ell\}. \quad (4.37b)$$

en el que la ecuación de difusión resultante *no depende del número de onda  $k$* .

### 4.4.2. Ecuación de difusión el régimen general: dependiente de la energía

#### Los coeficientes de difusión

En la sección 4.3.2 se obtuvieron las propiedades estadísticas del bloque constitutivo que, por conveniencia, se centro en el origen; sin embargo, como mostramos en la sección 4.2, el bloque constitutivo se añade a la derecha del sistema de longitud  $L$ , el cual colocamos entre  $x = 0$  y  $x = L$ ; por lo tanto, el resultado de la ecuación (4.35) debe modificarse de tal manera que se considere al bloque constitutivo ubicado entre  $x = L$  y  $x = L + \delta L$ . Lo anterior se puede hacer de dos formas: 1) realizando la integral (4.33) en el intervalo  $(L, L + \delta L)$  o 2) aplicando la regla de transformación de la referencia [10]. Ambos procedimientos dan como resultado que el segundo orden del segundo momento Ec. (4.35) toma la siguiente forma:

$$\lim_{DWS} \left\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{L, \delta L} = \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} \Delta_{ab, cd}^{ij, hl}(k, \delta L) e^{iK_{ab, cd}^{ij, hl}(L + \frac{\delta L}{2})}. \quad (4.38)$$

Al desarrollar, en el DWSL, el segundo momento del bloque constitutivo, Ec. (4.30), en potencias de  $\delta L$  se obtiene que el único término que tiene contribución de orden  $\delta L$  es el de segundo orden, Ec (4.38); por lo tanto, dicho desarrollo tiene la siguiente estructura:

$$\lim_{DWS} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} = 2D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \delta L + O(\delta L)^2, \quad (4.39a)$$

donde se han definido los *coeficientes de difusión*

$$D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) = (-1)^{i+h+1} \frac{C(ab, cd)}{2\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} e^{iK_{ab, cd}^{ij, hl}L}, \quad (4.39b)$$

los cuales dependen de la *longitud*  $L$  y de la *energía*, ya que dependen de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$  y de  $K_{ab, cd}^{ij, hl}$ : ver ecuaciones (4.21), (4.22) y (4.34b), respectivamente; además, los coeficientes de difusión únicamente dependen de la distribución del potencial microscópico a través de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ .

De las ecuaciones (4.34c) y (4.39b) nos damos cuenta que los coeficientes de difusión son simétricos ante los intercambios  $ab \leftrightarrow cd$  e  $ij \leftrightarrow hl$ , es decir:

$$D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) = D_{cd, ab}^{hl, ij}(k, L). \quad (4.39c)$$

#### La ecuación de difusión

Al introducir las ecuaciones (4.28c) y (4.39a) en la Ec. (4.7b), se obtiene a orden  $\delta L$

$$\begin{aligned} \langle F(M) \rangle_{L+\delta L} &= \langle F(M) \rangle_L + \sum_{\substack{ijhl, \lambda\mu \\ abcd, \alpha\beta}} D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \delta L \\ &+ O(\delta L)^2. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Al pasar el primer término de la ecuación (4.40) del lado izquierdo, dividir por  $\delta L$  y tomar el límite  $\delta L \rightarrow 0$  [lo que requiere que se cumpla la ecuación (4.36)] se obtiene:

$$\frac{\partial \langle \mathbf{F}(\mathbf{M}) \rangle_{\mathbf{k}, \ell, \mathbf{L}}}{\partial \mathbf{L}} = \sum_{\substack{ijhl, \lambda\mu \\ abcd, \alpha\beta}} \mathbf{D}_{ab, cd}^{ij, hl}(\mathbf{k}, \mathbf{L}) \left\langle \mathbf{M}_{b\alpha}^{j\lambda} \mathbf{M}_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 \mathbf{F}(\mathbf{M})}{\partial \mathbf{M}_{a\alpha}^{i\lambda} \partial \mathbf{M}_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_{\mathbf{k}, \ell, \mathbf{L}}, \quad (4.41)$$

que es la *ecuación de difusión*. Esta ecuación gobierna la evolución con la longitud  $L$  de  $\langle F(M) \rangle_{\mathbf{k}, \ell, L}$  y es **el resultado central del presente trabajo**. Los valores esperados que describe la (4.41) satisfacen la siguiente condición inicial en  $L = 0$ :

$$\langle F(M) \rangle_{L=0} = F(I), \quad (4.42)$$

ya que en  $L = 0$ , las matriz de transferencia vale  $M = I$ .

La ecuación de difusión, Ec. (4.41), sólo depende de los detalles del potencial microscópico a través de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ , es decir, sólo depende del segundo momento de la distribución del potencial efectivo, ya que los momentos de orden superior no contribuyen en el DWSL; esto indica la existencia de un *teorema de límite central generalizado* (CLT por sus siglas en inglés), pues la ecuación sólo depende del segundo momento de la distribución de los potenciales microscópicos, es decir, de los caminos libres medios; por lo tanto, una vez especificados los caminos libres medios la ecuación de difusión (4.41) es universal, es decir, independiente de los detalles de la estadística microscópica.

### 4.4.3. Ecuación de difusión: la aproximación de longitud de onda corta (SWLA), ó de desorden débil

En la sección anterior obtuvimos la ecuación de difusión en el caso general, Ec. (4.41), es decir, dependiente del número de onda  $k$ . Esta nueva ecuación es más general que las ecuaciones que se obtuvieron en los trabajos [15, 18], pues en dichos trabajos el número de onda  $k$  no aparece en la ecuación de difusión resultante.

En la presente sección estudiaremos el régimen en el que podemos recuperar la descripción que hacen Mello y Tomsovic [18], en la que el número de onda  $k$  no entra en la descripción. Para hacer lo anterior debemos considerar un régimen al que nos referiremos como la *aproximación de longitud de onda corta* (SWLA por sus siglas en inglés: short wave length approximation), que definimos en la ecuación (4.37b). La razón por la que este régimen recibe dicho nombre se debe a la analogía que tiene con el límite de la óptica geométrica en el que  $\lambda \rightarrow 0$  [37]. En este régimen se supone que en un bloque constitutivo *hay muchas longitudes de onda*, es decir,

$$\lambda \ll \delta L, \quad \text{ó} \quad k\delta L \gg 1, \quad (4.43a)$$

pero manteniendo la longitud de onda mucho mayor que la distancia entre dispersores  $\lambda \gg d$ . En términos del número de onda  $k$  y del camino libre medio  $\ell$  este régimen se expresa como:

$$k\ell \gg 1, \quad (4.43b)$$

donde hemos usado que el bloque constitutivo es un sistema balístico, Ec. (4.36). La ecuación (4.43b) se conoce en la literatura con el nombre de desorden débil (weak disorder).

Si en la ecuación (4.7b) tomamos en cuenta la ecuación (4.28c) obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle F(M) \rangle_{k,\ell,L+\delta L} &= \langle F(M) \rangle_{k,\ell,L} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{k,\ell,L,\delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_{k,\ell,L} \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (4.44)$$

Analicemos los sumandos que aparecen en el segundo término del lado derecho de la ecuación (4.44). Al igual que en la sección 4.4.2, en esta sección la contribución relevante del segundo momento de la matriz  $\varepsilon$  del bloque constitutivo, Ec. (4.30), será la de segundo orden en las matrices individuales  $\varepsilon$ , Ec.(4.38); por lo tanto, al considerar únicamente dicha contribución en el segundo término de la ecuación (4.44) se obtiene:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L,k} \langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k} \\ &= \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta \\ (K=0)}} \frac{C(ab,cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k,\delta L) e^{iK(L+\frac{\delta L}{2})} \langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k} \\ &+ \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta \\ (K \neq 0)}} \frac{C(ab,cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k,\delta L) e^{iK(L+\frac{\delta L}{2})} \langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

donde se uso la siguiente abreviatura

$$\langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{k,\ell,L} = \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_{k,\ell,L}, \quad (4.46a)$$

$$K = K_{ab,cd}^{ij,hl}. \quad (4.46b)$$

La primera suma del lado derecho de la ecuación (4.45) considera las combinaciones de índices que hagan  $K = 0$ , mientras que la segunda considera las combinaciones de índices que hagan  $K \neq 0$ : ver ecuación (4.34b). Será conveniente tomar el valor del número de onda  $k$  como

$$k = \frac{(N+1/2)\pi}{W}, \quad (4.47a)$$

es decir, a la mitad del umbral entre el último canal abierto y el primer canal cerrado, de tal manera que los números de onda longitudinales de los canales abiertos, Ec. (2.9b), se expresen como:

$$k_a = k \sqrt{1 - \left( \frac{a}{N + 1/2} \right)^2}. \quad (4.47b)$$

Analicemos las consecuencias que tiene la ecuación (4.43) en la expresión (4.45), que hasta el momento es exacta. De la Ec. (4.34b) se observa que para  $K \neq 0$ ,  $K$  es proporcional a  $k$  (el coeficiente de proporcionalidad sólo depende de los índices de canal); por lo tanto, al considerar la ecuación (4.43b) obtenemos que los términos con  $K = 0$  dan la contribución más importante (proporcional a  $\delta L$ ), ya que los términos con  $K \neq 0$  son inversamente proporcionales a  $k\ell$ , es decir, despreciables con respecto a los primeros. Lo anterior quiere decir que en SWLA la ecuación (4.45) se puede aproximar de la siguiente manera:

$$\lim_{DWS} \left\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \right\rangle_{\delta L} \approx (-1)^{i+h+1} \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} \delta_{K0} \cdot \delta L, \quad (4.48)$$

$$\approx 2\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \cdot \delta L, \quad (4.49)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} = (-1)^{i+h+1} \frac{C(ab, cd)}{2\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} \delta_{K0}, \quad (4.50)$$

$$\delta_{K0} = \left\{ \begin{array}{l} 1 \text{ si } K = 0 \\ 0 \text{ si } K \neq 0 \end{array} \right\}, \quad (4.51)$$

donde se han definido los coeficientes de difusión en el SWLA de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{ab,cd}^{11,11} &= -\frac{1}{1 + \delta_{ac}} \left[ \frac{C(aa, cc)}{2\sqrt{\ell_{aa}\ell_{cc}}} \delta_{ab}\delta_{cd} + \frac{1}{2\ell_{ab}} \delta_{ad}\delta_{bc} \right] \\ &= \tilde{D}_{ab,cd}^{22,22}, \end{aligned} \quad (4.52a)$$

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{ab,cd}^{11,22} &= \frac{1}{1 + \delta_{ad}} \left[ \frac{C(aa, cc)}{2\sqrt{\ell_{aa}\ell_{cc}}} \delta_{ab}\delta_{cd} + \frac{1}{2\ell_{ab}} \delta_{ac}\delta_{bd} \right] \\ &= \tilde{D}_{ab,cd}^{22,11}, \end{aligned} \quad (4.52b)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{12,21} = \frac{\delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}}{1 + \delta_{ab}} \frac{1}{2\ell_{ab}} = \tilde{D}_{ab,cd}^{21,12}, \quad (4.52c)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{11,12} = \tilde{D}_{ab,cd}^{11,21} = \tilde{D}_{ab,cd}^{12,12} = 0, \quad (4.52d)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{22,21} = \tilde{D}_{ab,cd}^{22,12} = \tilde{D}_{ab,cd}^{21,21} = 0. \quad (4.52e)$$

Del análisis anterior obtenemos que en el SWLA el segundo momento de la matriz  $\varepsilon$  del bloque constitutivo se expresa como:

$$\left\langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \right\rangle_{L, \delta L, k} \approx 2\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \cdot \delta L + O(\delta L)^2, \quad (4.53)$$

es decir, independiente del número de onda y de la longitud  $L$ .

Antes de continuar debemos hacer la siguiente suposición acerca del comportamiento de los valores esperados en el régimen SWLA:

$$\langle \cdots \rangle_{k,\ell,L} \approx \langle \cdots \rangle_{L/\ell}^{(0)}, \quad (4.54)$$

donde el lado derecho representa una función suave para toda escala de  $L/\ell$ , cuya dependencia en la energía sólo aparece a través del camino libre medio  $\ell$ . De esta manera, el único parámetro del problema es el camino libre medio  $\ell$ . Como veremos en los capítulos 5 y 7, la ecuación (4.54) representa una buena aproximación al valor esperado de observables cuando  $k\ell \gg 1$ .

Usando las ecuaciones (4.53) y (4.54) obtenemos que la ecuación (4.44) se aproxima de la siguiente manera:

$$\langle F(M) \rangle_{L+\delta L}^{(0)} = \langle F(M) \rangle_L^{(0)} + \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L^{(0)} \cdot \delta L + O(\delta L)^2. \quad (4.55)$$

Al realizar el mismo procedimiento que se hizo para obtener la ecuación (4.41), obtenemos que la ecuación de difusión en el SWLA es:

$$\frac{\partial \langle F(M) \rangle_L^{(0)}}{\partial L} = \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L^{(0)}, \quad (4.56)$$

con la condición inicial:

$$\langle F(M) \rangle_{L=0}^{(0)} = F(I) \quad (4.57)$$

La ecuación de difusión (4.56) es la ecuación que obtuvieron Mello y Tomsovic [18] salvo una sutil diferencia en los coeficientes de difusión, Ec. (4.52), ya que en el modelo de Mello y Tomsovic los coeficientes de correlación del  $C(aa, bb)$  son cero cuando  $a \neq b$  y uno cuando  $a = b$ ; por lo tanto, para recuperar la ecuación de difusión de Mello y Tomsovic a partir de la ecuación del SWLA, Ec. (4.56), debemos suponer que los coeficientes de correlación  $C(aa, bb)$  que aparecen en los coeficientes de difusión (4.52a) y (4.52b) son cero si  $a \neq b$ . Esta diferencia entre los dos modelos podría parecer poco importante, pero como veremos en el Capítulo 7, de no ser por estos coeficientes de correlación no podríamos obtener una explicación teórica para la covarianza  $Cov(R_{11}, R_{22})$  en el régimen balístico: ver figura 7.38.

# Capítulo 5

## Aplicación de la ecuación de difusión

### 5.1. Introducción

La ecuación de difusión que obtuvimos en el Capítulo 4 (ver sección 4.4) no se ha podido resolver para la mayoría de los observables de interés ni en el régimen general (dependiente del número de ondas  $k$ ) ni en la aproximación de longitud de onda corta: por ejemplo, para las intensidades  $T'_{mn} = |t'_{mn}|^2$  y  $R'_{mn} = |r'_{mn}|^2$ . Esta dificultad se debe a que, para estos observables, la ecuación de difusión genera un sistema de ecuaciones acopladas que *no cierra*; es decir, el sistema de ecuaciones tiene más incógnitas que ecuaciones, por lo que no se puede resolver (ver sección 5.3.2). La razón por la que en general sucede esto es el operador diferencial que aparece en el lado derecho de la ecuación de difusión genera observables que son diferentes a la del lado izquierdo.

En este Capítulo aplicaremos la ecuación de difusión a algunos observables particulares para los que sí es posible resolverla. Los observables y el régimen en el que resolveremos la ecuación de difusión se explican a continuación:

- En la sección 5.2.1 resolveremos la ecuación de difusión para las cantidades  $\alpha\alpha^*$  y  $\alpha\beta$ ; lo anterior se hará en el régimen general [ver ecuaciones (4.37a) y (4.41)] y en el caso de un canal abierto. Las soluciones que se obtendrán para estas cantidades, Ec. (5.7), se compararán con los resultados obtenidos de una simulación numérica, obteniendo un acuerdo excelente (ver figuras 5.1 y 5.2). Para estas mismas cantidades, resolveremos la ecuación de difusión en el SWLA [ver ecuaciones (4.37b) y (4.56)], obteniendo los resultados que ya se conocían en este régimen para estas cantidades [15, 18]: ver sección 5.2.1, ecuación (5.19).
- En la sección 5.3.1 resolveremos, en el SWLA, la ecuación de difusión para las amplitudes  $t'_{mn}$  y  $r'_{mn}$ . Los resultados que obtengamos para estas cantidades serán consistentes con los resultados que previamente se obtuvieron en el mismo régimen [18].

En la sección 5.3.2 veremos que al aplicar la ecuación de difusión a las intensidades  $T'_{mn}$  y  $R'_{mn}$  se generan sistemas de ecuaciones que *no cierran* aún en el SWLA, por lo que no se pueden resolver: ver ecuaciones (5.35a) y (5.37a), respectivamente; sin embargo, estas ecuaciones nos servirán para mostrar que la ecuación de difusión es consistente con las propiedades de conservación de flujo (FC), Ec. (2.66), e invariancia ante inversiones temporales (TRI), Ec. (2.78). Por último obtendremos los primeros términos del desarrollo en serie de potencia de  $L$  de las cantidades  $\langle T'_{mn} \rangle_{L/\ell}$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_{L/\ell}$ ; este desarrollo únicamente es válido en el régimen balístico, Ec. (4.36).

## 5.2. Solución exacta de la ecuación de difusión para un observable particular con un canal abierto

En esta sección resolveremos la ecuación de difusión en el régimen general, Ec. (4.41), para dos observables particulares y en el caso en que la guía admite un canal abierto ( $N = 1$ ). Los observables que estudiaremos serán los siguientes:

$$M^{11}M^{22} = \alpha\alpha^* = \frac{1}{tt^*} \equiv \frac{1}{T}, \quad (5.1a)$$

$$M^{11}M^{12} = \alpha\beta = -\left(\frac{r}{t^2}\right)^*, \quad (5.1b)$$

En la ecuación (5.1) hemos usado la relación entre la matriz de transferencia y la de dispersión, Ec. (2.88), así como la notación (4.1).

Debido a que estamos considerando el caso  $N = 1$  sólo hay un camino libre medio  $\ell_{11}$  y un número de onda  $k_1$ . Con el objeto de simplificar la notación en este caso omitiremos los índices de canal en estas dos cantidades, por lo que estas cantidades se denotarán de la siguiente manera:

$$\ell_{11} = \ell, \quad (5.2a)$$

$$k_1 = k. \quad (5.2b)$$

Análogamente, omitiremos los índices de canal en las cantidades  $M_{ab}^{ij}$  y  $D_{ab,cd}^{ij,kl}(k, L)$  que aparecen en la ecuación de difusión (4.41).

### 5.2.1. El régimen general: $k\ell$ arbitrario

En el caso en el que la guía sólo admite un canal abierto ( $N = 1$ ) la ecuación de difusión (4.41) se escribe de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \langle F(M) \rangle_{k,\ell,L}}{\partial L} = \sum_{ijhl\lambda\mu} D^{ijhl}(k, L) \left\langle M^{j\lambda} M^{l\mu} \frac{\partial F(M)}{\partial M^{i\lambda} \partial M^{h\mu}} \right\rangle_{k,\ell,L}. \quad (5.3)$$

Los coeficientes de difusión que aparecen en (5.3) se muestran explícitamente en la ecuación (B.1).

Al introducir las cantidades de (5.1) en la ecuación de difusión (5.3) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones acopladas:

$$\frac{\partial \langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s}}{\partial s} = \langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s} e^{ix_0 s} + \left( 2 \langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s} - 1 \right) + \langle \alpha^* \beta^* \rangle_{x_0, s} e^{-ix_0 s}, \quad (5.4a)$$

$$\frac{\partial \langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}}{\partial s} = - \langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s} - \left( 2 \langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s} - 1 \right) e^{-ix_0 s} - \langle \alpha^* \beta^* \rangle_{x_0, s} e^{-2ix_0 s}, \quad (5.4b)$$

donde hemos usado las siguientes cantidades adimensionales:

$$s = L/\ell, \quad (5.5a)$$

$$x_0 = 2k\ell. \quad (5.5b)$$

Para fijar las condiciones iniciales del sistema (5.4) debemos considerar que para  $s = 0$ , es decir, en ausencia de sistema dispersor, la matriz de transferencia es la identidad [ver ecuación (4.2)], lo que impone que  $\alpha = 1$  y  $\beta = 0$ ; por lo tanto, las condiciones iniciales del sistema de ecuaciones (5.4) son:

$$\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s=0} = 1, \quad (5.6a)$$

$$\langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s=0} = 0, \quad (5.6b)$$

Antes de resolver el sistema (5.4) es conveniente hacer los siguientes comentarios:

- Cuando se aplica el operador diferencial que aparece del lado derecho de la ecuación de difusión (5.3) a un observable  $F(M)$ , en general, se obtienen cantidades que son diferentes a la cantidad inicial  $F(M)$ ; por lo tanto, es necesario obtener la ecuación de difusión de estas nuevas cantidades. En general, este procedimiento genera un sistema de ecuaciones que *no cierra*, ya que en cada paso aparecen nuevos observables. Esta es la razón por la que no hemos podido resolver la ecuación de difusión para la mayoría de los observables.
- Para las cantidades que estamos considerando, la ecuación de difusión genera un sistema de ecuaciones, Ec. (5.4), que *sí cierra*, pues tanto del lado derecho como del izquierdo de (5.4), sólo aparecen las cantidades  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s}$  y  $\langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}$ ; por lo tanto, se puede resolver.
- La ecuación de difusión (5.3) en realidad genera un sistema de cuatro ecuaciones acopladas: las dos que se muestran en (5.4), una para  $\langle \beta \beta^* \rangle_{x_0, s}$  y otra para  $\langle \alpha^* \beta^* \rangle_{x_0, s}$ ; sin embargo, como se explica en el Apéndice B, el sistema se puede resolver al considerar las dos ecuaciones de (5.4).

Como se muestra en el Apéndice B, la pareja de ecuaciones (5.4) se puede escribir como un sistema de tres ecuaciones acopladas para cantidades relacionadas con  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s}$  (que es una cantidad real),  $\text{Re} \langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}$  e  $\text{Im} \langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}$  [ver ecuaciones (B.2)-(B.3)]. Dicho sistema se resuelve mediante el método de la transformada de Laplace, obteniendo así:

$$\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s} = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{p_1^2 + 2p_1 + x_0^2}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{p_1 s} + \frac{p_2^2 + 2p_2 + x_0^2}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{p_2 s} \right] + \frac{p_3^2 + 2p_3 + x_0^2}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{p_3 s}, \quad (5.7a)$$

$$\langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s} = - \left[ \frac{p_1 + ix_0}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{(p_1 - ix_0)s} + \frac{p_2 + ix_0}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{(p_2 - ix_0)s} + \frac{p_3 + ix_0}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{(p_3 - ix_0)s} \right], \quad (5.7b)$$

donde  $p_1$ ,  $p_2$ , y  $p_3$  son las raíces del polinomio de tercer grado

$$P(p) = p^3 + x_0^2 p - 2x_0^2, \quad (5.8)$$

siendo  $p_1 \in \mathbb{R}$ ,  $p_2, p_3 \in \mathbb{C}$  y  $p_3 = p_2^*$ . Las raíces del polinomio cúbico (5.8) se expresan en función del parámetro  $x_0$  [ver ecuaciones (B.10)-(B.11)], es decir, en función del número de onda  $k$  y del camino libre medio  $\ell$ .

La solución analítica (5.7) la obtuvieron P. A. Mello y el autor de la presente tesis a principios de 2006 y se publicó en la referencia [22] a principios de 2007. Estas soluciones son exactas, validas para  $L$ ,  $\ell$  y  $k$  arbitrarios. Como veremos a continuación estas soluciones concuerdan cuantitativamente con los promedios estadísticos que se obtienen de simulaciones numéricas de la ecuación de Schrödinger unidimensional: ver figuras 5.1 y 5.2.

### Comparación con la simulación numérica de un modelo unidimensional del potencial

Antes de que se publicase la referencia [22], la solución exacta (5.7) representaba un resultado nuevo que necesitaba ser comparado con algún resultado que fuese independiente a la ecuación de difusión. Dicha comparación se hizo mediante la simulación numérica de un potencial desordenado unidimensional, la cual realizó Luis Froufe, quien también es autor de dicho trabajo. En esta sección describiremos brevemente el modelo microscópico con el que se realizó dicha simulación y compararemos los resultados numéricos con la solución analítica (5.7).

Una versión estrictamente unidimensional del potencial cuasi-unidimensional  $U_{ab}(x)$  definido en el Capítulo 3, Ec. (3.13), se obtiene al considerar un canal abierto ( $N = 1$ ) e ignorar los canales cerrados (ver recuadro de la figura 5.1). El potencial unidimensional se construye con  $n$  dispersores individuales separados entre sí una distancia  $d$ , de tal manera que la longitud del sistema es  $L = nd$ . El  $r$ -ésimo dispersor está en la posición  $x_r = rd$  ( $r = 1, 2, \dots, n$ ) cuyo potencial individual es  $U_r(x) = u_r \delta(x - x_r)$ . Debido a

que el modelo es unidimensional, es decir, no hay canales cerrados, el potencial efectivo  $\hat{u}_r$ , Ec. (3.49), es igual al potencial  $u_r$ : ambos en unidades del número de onda  $k$ .

El modelo estadístico del potencial considera que los valores de  $u_r$  están uniformemente distribuidos en un intervalo  $[-u_0, u_0]$ , de tal manera que la función de distribución es la siguiente:

$$P(u_r) = \frac{1}{2u_0}; \quad (5.9)$$

por lo tanto, los dos primeros momentos del potencial  $u_r$  valen, respectivamente:

$$\langle(u_r)\rangle = 0 \quad (5.10a)$$

$$\langle(u_r)^2\rangle = \frac{1}{3}u_0^2; \quad (5.10b)$$

análogamente, los dos primeros momentos del potencial sin unidades  $v_r$ , Ec. (3.48), valen:

$$\langle(v_r)\rangle = 0 \quad (5.11a)$$

$$\langle(v_r)^2\rangle = \frac{1}{3}\left(\frac{u_0}{2k}\right)^2 = \frac{1}{3}v_0^2. \quad (5.11b)$$

y los valores de las cantidades  $v_r$  se distribuyen uniformemente en el intervalo  $[-v_0, v_0]$  siendo:

$$v_0 = \frac{u_0}{2k}. \quad (5.12)$$

Para poder comparar los resultados de la simulación numérica con los resultados obtenidos mediante la ecuación de difusión, Ec. (5.7), debemos tomar los parámetros relevantes de la simulación numérica de tal manera que sean consistentes con el DWSL, Ec. (4.32). Por supuesto, numéricamente no podemos tomar el límite idealizado

$$d \rightarrow 0, \quad (5.13a)$$

$$\langle(v_r)^2\rangle \rightarrow 0, \quad (5.13b)$$

$$n \rightarrow \infty; \quad (5.13c)$$

lo que sí podemos hacer es tomar los dispersores suficientemente débiles para cumplir la ecuación (4.15), de tal manera que podemos usar la ecuación (4.23) para escribir el cociente de  $d/\ell$  de la siguiente manera:

$$\langle(v_r)^2\rangle = \frac{1}{3}v_0^2 = \frac{d}{\ell} \ll 1. \quad (5.14)$$

La ecuación (5.14) nos permitirá simular numéricamente el DWSL, ya que fijando el valor de  $d/\ell \ll 1$  conocemos el valor de  $v_0$  y con éste se fija el intervalo  $[-v_0, v_0]$  en el que los potenciales individuales  $v_r$  toman *valores aleatorios*. En la simulación numérica se utilizó:

$$\frac{d}{\ell} = 10^{-3}. \quad (5.15a)$$

De la solución exacta, Ec. (5.7), vemos que las cantidades  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s}$  y  $\langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}$  dependen del parámetro  $k\ell$  a través de las raíces  $p_1$ ,  $p_2$  y  $p_3$  del polinomio cúbico (5.8); por lo tanto, para evaluar la expresión analítica (5.7) se debe especificar el valor de  $k\ell$ . En la simulación numérica se utilizó:

$$k\ell = 100 \quad (5.15b)$$

Los resultados numéricos de  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s}$  y  $\langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}$  se obtuvieron al promediar (para cada valor de  $L/\ell$ ) los valores de  $\alpha \alpha^*$  y  $\alpha \beta$  de  $10^7$  realizaciones diferentes del desorden microscópico. La comparación de los resultados numéricos y la solución analítica (5.7) se muestran en las figuras 5.1 y 5.2, respectivamente, donde se observa que *los resultados numéricos son indistinguibles de las soluciones analíticas*.

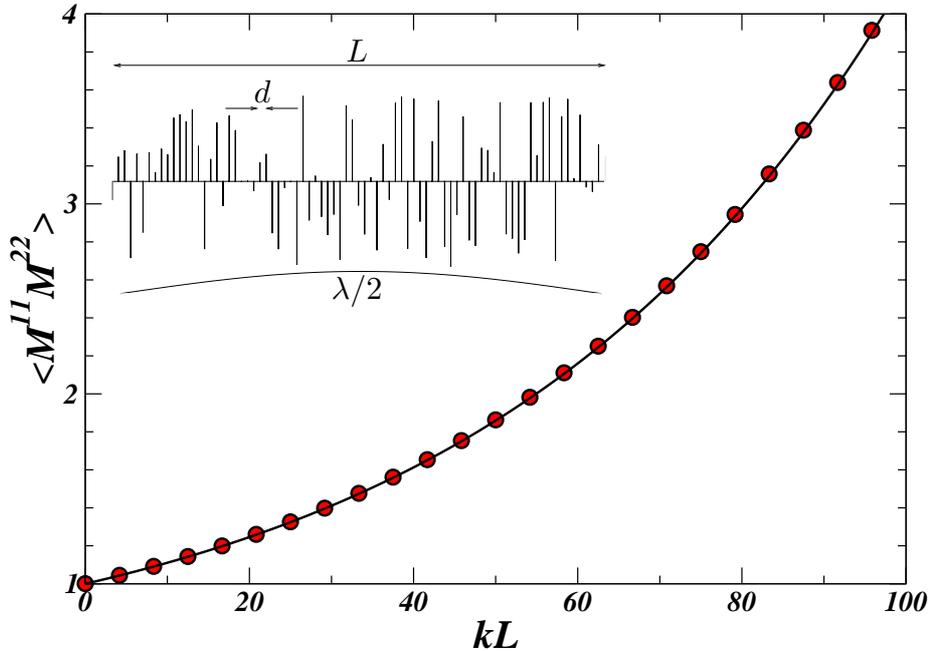


Figura 5.1:  $\langle M^{11} M^{22} \rangle = \langle \alpha \alpha^* \rangle$  vs  $kL = k\ell(L/\ell)$ . Los resultados numéricos (círculos) del modelo unidimensional son indistinguibles de los resultados analíticos (línea continua), Ec. (5.7a). Los resultados corresponden a  $x_0 = 2k\ell = 200$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

### 5.2.2. La aproximación de longitud de onda corta: $k\ell \rightarrow \infty$

Antes de que obtuviésemos la solución (5.7a) para  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s}$  mediante la ecuación de difusión (5.3), se conocía un resultado analítico [15, 18] para  $\langle \beta \beta^* \rangle_{L/\ell}$  que, como

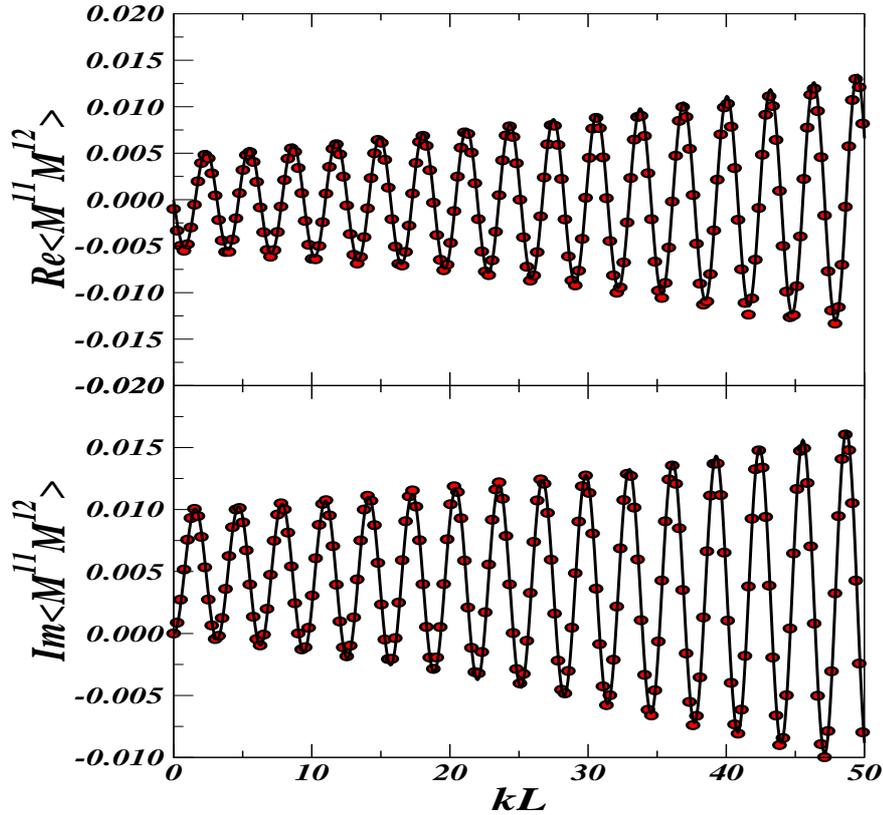


Figura 5.2: Partes real (arriba) e imaginaria (abajo) de  $\langle M^{11} M^{12} \rangle = \langle \alpha\beta \rangle$  vs  $kL = k\ell (L/\ell)$ . Los resultados numéricos (círculos) del modelo unidimensional son indistinguibles de los resultados analíticos (línea continua), Ec. (5.7b) Los resultados corresponden a  $x_0 = 2k\ell = 200$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

explicaremos a continuación, se puede expresar en términos de  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell}$ . En el caso  $N = 1$  la conservación de flujo, Ec. (2.70), y la invariancia ante inversiones temporales, Ec. (2.82), imponen la siguiente relación entre  $\alpha$  y  $\beta$

$$\alpha\alpha^* - \beta\beta^* = 1, \quad (5.16)$$

de tal manera que

$$\langle \beta\beta^* \rangle_{L/\ell} = \langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell} - 1. \quad (5.17)$$

El resultado que se obtuvo en las referencias [15, 18] predice un crecimiento exponencial para  $\langle \beta\beta^* \rangle_{L/\ell}$  o equivalentemente para  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell}$ . Dicho resultado es válido en la aproximación de longitud de onda corta (SWLA) [ver sección 4.4.3 ecuaciones (4.43) y (4.56)], ya que los modelos que se usaron en las referencias [15, 18] son válidos en dicha aproximación. Utilizando esos mismos modelos se obtiene que cantidades como  $\langle \alpha\beta \rangle_{L/\ell}$  (es decir, cantidades que contienen fases) son cero.

Para comparar el resultado de (5.7) con el resultado obtenido en [15, 18] debemos

obtener  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell}$  y  $\langle \alpha\beta \rangle_{L/\ell}$  en el SWLA, es decir, cuando  $k\ell \gg 1$ . Lo anterior se hará de dos maneras:

1. A partir de la solución exacta: ecuación (5.7).

El comportamiento de  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell}$  y  $\langle \alpha\beta \rangle_{L/\ell}$  en el SWLA se obtiene de la solución exacta (5.7) suponiendo que el valor de  $s = L/\ell$  es fijo y que el de  $x_0 = 2k\ell \gg 1$ . Estas suposiciones permiten construir un *desarrollo en potencias inversas* de  $k\ell$  para las cantidades  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell}$  y  $\langle \alpha\beta \rangle_{L/\ell}$ , obteniendo así:

$$\langle \alpha\alpha^* \rangle_{k,L} = \frac{1}{2} (1 + e^{2L/\ell}) \quad (5.18a)$$

$$+ \frac{1}{2(k\ell)^2} \left[ - \left( 1 + 2\frac{L}{\ell} \right) e^{2L/\ell} + e^{-L/\ell} \cos 2kL \right]$$

$$+ O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^3,$$

$$\langle \alpha\beta \rangle_{k,L} = \frac{i}{2k\ell} (e^{-L/\ell} - e^{2L/\ell} e^{-2ikL}) \quad (5.18b)$$

$$+ \frac{1}{2(k\ell)^2} \left[ \left( 1 - \frac{3L}{4\ell} \right) e^{-L/\ell} - e^{2L/\ell} e^{-2ikL} - \frac{i}{4} e^{-L/\ell} (1 - e^{-4ikL}) \right]$$

$$+ O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^3,$$

donde hemos hecho uso de las ecuaciones (B.3) y (B.14). Las soluciones (5.18a) y (5.18b) satisfacen, a cada orden en el desarrollo de potencias  $1/k\ell$ , las ecuaciones diferenciales (5.4) y las condiciones iniciales (5.6). Finalmente, la dependencia de las cantidades  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_{k,L}$  y  $\langle \alpha\beta \rangle_{k,L}$  en el SWLA, se obtiene al despreciar las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^p$  con  $p \geq 1$  y conservar las de orden  $1/(k\ell)^0$  ó equivalentemente al tomar el límite idealizado  $k\ell \rightarrow \infty$ ; por lo tanto, en el SWLA se tiene:

$$\lim_{SWLA} \langle \alpha\alpha^* \rangle_{k,L} = \langle \alpha\alpha^* \rangle_{L/\ell}^{(0)} = \frac{1}{2} (1 + e^{2L/\ell}), \quad (5.19a)$$

$$\lim_{SWLA} \langle \alpha\beta \rangle_{k,L} = \langle \alpha\beta \rangle_{L/\ell}^{(0)} = 0. \quad (5.19b)$$

La ecuación (5.19) verifica explícitamente la suposición hecha en la ecuación (4.54) para los valores esperados en esta aproximación.

2. Resolviendo la ecuación de difusión de difusión en el SWLA: ecuación (4.56).

Al introducir las cantidades de (5.1) en la ecuación de difusión del SWLA, Ec. (4.56), se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones acopladas:

$$\frac{\partial \langle \alpha \alpha^* \rangle_{L/\ell}^{(0)}}{\partial s} = \left( 2 \langle \alpha \alpha^* \rangle_{L/\ell}^{(0)} - 1 \right), \quad (5.20a)$$

$$\frac{\partial \langle \alpha \beta \rangle_{L/\ell}^{(0)}}{\partial s} = - \langle \alpha \beta \rangle_{L/\ell}^{(0)}, \quad (5.20b)$$

con las condiciones iniciales:

$$\langle \alpha \alpha^* \rangle_{L/\ell}^{(0)} = 1, \quad (5.21a)$$

$$\langle \alpha \beta \rangle_{L/\ell}^{(0)} = 0. \quad (5.21b)$$

Como es de esperar, las soluciones de  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_{L/\ell}^{(0)}$  y  $\langle \alpha \beta \rangle_{L/\ell}^{(0)}$  del sistema (5.20) son, respectivamente, las expresiones de (5.19).

Sustituyendo la expresión (5.19a) en la ecuación (5.17) obtenemos que en el SWLA el valor esperado de  $\beta \beta^*$  tiene la siguiente expresión:

$$\langle \beta \beta^* \rangle_{L/\ell}^{(0)} = \frac{1}{2} (e^{2L/\ell} - 1). \quad (5.22)$$

Antes de concluir esta sección discutiremos la relevancia del observable  $\beta \beta^*$ . Consideremos un alambre unidimensional desordenado de longitud  $L$  (en nuestro caso una guía de ondas que admite un canal abierto) que une dos reservorios de electrones. La resistencia  $\Omega$  de este alambre es proporcional al cociente  $R/T$  [21, 38], es decir:

$$\Omega \sim \frac{R}{T}. \quad (5.23)$$

Usando las relaciones entre la matriz de transferencia y la de dispersión, Ecs. (2.87)-(2.88) y la propiedad de invariancia ante inversiones temporales de éstas, Ecs. (2.78)-(2.82), se puede mostrar que el observable  $R/T$  se expresa en términos  $\beta \beta^*$  de la siguiente manera:

$$\frac{R}{T} = \beta \beta^*. \quad (5.24)$$

Debido a que el alambre es un sistema desordenado la cantidad  $R/T$  es una cantidad aleatoria. En la aproximación de longitud de onda corta, podemos calcular el promedio (sobre un ensemble de muestras) de esta cantidad utilizando las ecuaciones (5.24) y (5.22), obteniendo así:

$$\left\langle \frac{R}{T} \right\rangle_{L/\ell} = \frac{1}{2} (e^{2L/\ell} - 1). \quad (5.25)$$

La expresión (5.25) concuerda con el conocido *crecimiento exponencial* de la resistencia obtenido por primera vez por R. Landauer [21].

### 5.3. La ecuación de difusión en la aproximación de longitud de onda corta: el caso multicanal

A diferencia de los observables que estudiamos en la sección 5.2, en general, la ecuación de difusión, Ec. (4.41), no se puede resolver debido a que el sistema de ecuaciones diferenciales que se genera no cierra. Lo anterior se debe a que los observables que aparecen del lado derecho de la ecuación, en general, no son los mismos que los del lado izquierdo. Esta dificultad sucede aún en el modelo simplificado del SWLA (ver sección 4.4.3). Debido a esta dificultad se han desarrollado métodos numéricos para obtener los valores esperados de observables cuya ecuación no cierra; sin embargo, esos métodos numéricos no resuelven propiamente la ecuación de difusión: ver Capítulo 6.

En la presente sección obtendremos la ecuación de difusión de las amplitudes  $t'_{mn}$  y  $r'_{mn}$  así como la de las intensidades  $T'_{mn}$  y  $R'_{mn}$ . Para simplificar la exposición, lo anterior se hará en el SWLA, Ec. (4.56), ya que en este régimen las ecuaciones resultantes son más simples, pero aún así, nos permitirán exhibir los siguientes puntos:

1. Las ecuaciones de las amplitudes  $t'_{mn}$  y  $r'_{mn}$  sí se pueden resolver en el SWLA.
2. Las ecuaciones de las intensidades  $T'_{mn}$  y  $R'_{mn}$  no cierran, por lo que no se pueden resolver.
3. La consistencia de la ecuación de difusión con las propiedades de conservación de flujo (FC) y la invariancia ante inversiones temporales (TRI).
4. El comportamiento de los valores esperados de  $T'_{mn}$  y  $R'_{mn}$  cerca de  $L = 0$ .

Por comodidad del autor del presente trabajo, la exposición de los puntos anteriores se hará en términos de las cantidades  $t'_{mn}$ ,  $r'_{mn}$ ,  $T'_{mn}$  y  $R'_{mn}$  en vez de las cantidades  $t_{mn}$ ,  $r_{mn}$ ,  $T_{mn}$  y  $R_{mn}$ , ya que la obtención de las ecuaciones de las cantidades primadas requiere menos pasos algebraicos que los necesarios para obtener las cantidades no primadas.

En la sección 4.4.3 obtuvimos la ecuación de difusión (4.56) que da la evolución del valor esperado de un observable  $F(M)$  en el SWLA, el cual denotamos por  $\langle F(M) \rangle_{L/\ell}^{(0)}$ . Debido a que en lo que resta del presente Capítulo trabajaremos en el SWLA, de ahora en adelante omitiremos el superíndice (0) al denotar un valor esperado en este régimen.

Obtener las ecuaciones de difusión de las cantidades  $\langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell}$ ,  $\langle r'_{mn} \rangle_{L/\ell}$ ,  $\langle T'_{mn} \rangle_{L/\ell}$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_{L/\ell}$  representa un procedimiento muy complicado; por lo tanto, en la presente sección sólo presentamos los resultados finales, pero en el Apéndice B mostramos los pasos más importantes mediante los cuales se obtienen tales ecuaciones.

#### 5.3.1. La ecuación de difusión para las amplitudes

**La ecuación de difusión para  $\langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell}$**

Usando la expresión de la matriz de dispersión en términos de la matriz de transferencia, Ec. (2.88), la propiedad de invariancia ante inversiones temporales (2.82) y la notación (4.1) para  $M$ , podemos expresar  $t'_{mn}$  de la siguiente manera:

$$t'_{mn} = [(\alpha^*)^{-1}]_{mn} = [(M^{22})^{-1}]_{mn}. \quad (5.26)$$

Al introducir la expresión (5.26) en la ecuación de difusión del SWLA, Ec. (4.56), se obtiene la siguiente ecuación de evolución para  $\langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell}$ :

$$\frac{\partial \langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell}}{\partial L} = -\frac{1}{\ell_{n-}} \langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell}, \quad (5.27a)$$

cuya condición inicial es:

$$\langle t'_{mn} \rangle_0 = \delta_{mn}; \quad (5.27b)$$

por lo tanto, el valor esperado de  $t'_{mn}$  en el SWLA es:

$$\langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell} = e^{-L/\ell_{n-}} \delta_{mn}, \quad (5.27c)$$

en donde hemos hecho uso de la definición del camino libre medio del canal  $n$ :

$$\frac{1}{\ell_{n-}} = \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{nb}} = \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{bn}} = \frac{1}{\ell_{-n}}. \quad (5.28)$$

La ecuación de evolución, Ec. (5.27a), y su solución, Ec. (5.27c), coinciden con las correspondientes expresiones obtenidas por Mello y Tomsovic [18] para  $\langle t_{mn} \rangle_{L/\ell}$ . El éxito obtenido al resolver la ecuación de difusión para esta cantidad se debió a que (5.27a) representa un sistema de ecuaciones que *sí cierra*; sin embargo, si en vez de haber usado la ecuación de difusión del SWLA, Ec. (4.56), hubiésemos usado la ecuación de difusión en el régimen general (que depende explícitamente del número de onda  $k$ ), Ec. (4.41), hubiésemos encontrado que el sistema de ecuaciones para  $\langle t'_{mn} \rangle_{k,\ell,L}$  *no cierra*, por lo que no se puede resolver.

En el Capítulo 7 usaremos la serie de Born (ver sección 2.6) para obtener los valores esperados de algunos observables; los resultados con la serie de Born sólo serán válidos en el régimen balístico y en el SWLA: ver ecuación (7.23). Mediante la serie de Born (que es una serie en potencias inversas de  $\ell$ ) se construye una serie en potencias inversas de  $k\ell$ , de tal manera que en el SWLA el término dominante es el de orden  $(k\ell)^0$ . Como veremos en la sección 7.4.1, en el caso particular de  $\langle t_{mn} \rangle_{L/\ell}$  (o equivalentemente  $\langle t'_{mn} \rangle_{L/\ell}$ ), obtendremos una serie de potencias en  $L$  para la contribución de orden  $(k\ell)^0$ , la cual contendrá contribuciones de todos los órdenes de la serie de Born y será válida no sólo en el régimen balístico; dicha serie será la serie de Taylor de la expresión (5.27c): ver ecuación (7.89). Las correcciones de orden superior en potencias inversas de  $k\ell$  representarán correcciones al SWLA y únicamente serán válidas en el régimen balístico.

Además de la ecuación de evolución (5.27a), y la serie de Born, podemos obtener la expresión (5.27c) mediante el siguiente argumento:

- Consideremos un sistema constituido por la cadena de  $r_T$  (no confundir este índice de dispersor con la amplitud de reflexión) dispersores separados entre si una distancia  $d$  (ver sección 3.2.3), de tal manera que la longitud del sistema es  $L = r_T d$ .

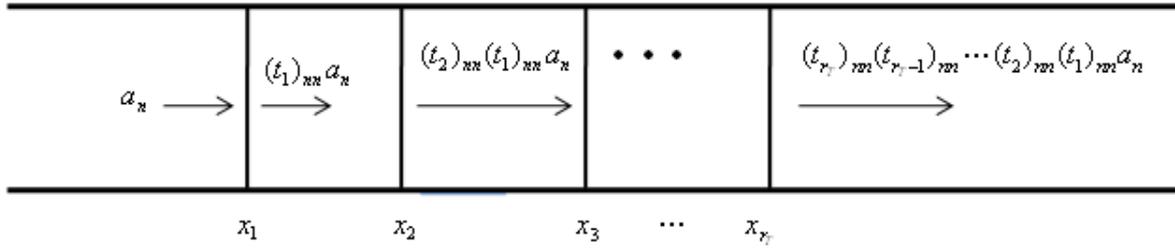


Figura 5.3: Los procesos de transmisión directa en el  $n$ -ésimo canal abierto.

- Supongamos que sobre el sistema incide, de izquierda a derecha, una onda plana en el canal abierto  $n$ .
- De los muchos procesos de dispersión múltiple que ocurren en el sistema pongamos nuestra atención en el que se muestra en la figura 5.3, es decir, la contribución a la amplitud de transmisión de todo el sistema  $t_{nn}$  que no contiene reflexiones múltiples entre dispersores ni transmisiones a otro canal que no sea el canal  $n$ . La amplitud de transmisión  $t_{nn}$  la podemos escribir de la siguiente manera:

$$t_{nn} = \prod_{r=1}^{r_T} (t_r)_{nn} + \dots, \quad (5.29)$$

donde el primer sumando representa la contribución del proceso que estamos considerando y los puntos suspensivos representan otro tipo de procesos de dispersión múltiple, como reflexiones entre los dispersores y transmisiones a otros canales abiertos, que por el momento no nos interesa discutir.

- De la ecuación (3.47c) obtenemos que la amplitud de transmisión  $(t_r)_{nn}$  del  $r$ -ésimo dispersor se expresa como:

$$(t_r)_{nn} = [(1 + i\hat{v}_r)^{-1}]_{nn}, \quad (5.30a)$$

que en el régimen de dispersión débil, Ec. (4.15), se puede aproximar, hasta segundo orden en el potencial efectivo, de la siguiente manera:

$$(t_r)_{nn} \simeq 1 - i(\hat{v}_r)_{nn} - \sum_{b_1=1}^N (\hat{v}_r)_{nb_1} (\hat{v}_r)_{b_1n} + \dots. \quad (5.30b)$$

- Por lo tanto, al considerar que los dispersores son estadísticamente independientes (ver sección 4.3.2), usar el modelo estadístico del potencial efectivo, Ec. (4.16), y las ecuaciones (4.23) y (5.28) se obtiene que el promedio de (5.29) se escribe de la siguiente manera

$$\langle t_{nn} \rangle \simeq \prod_{r=1}^{r_T} \langle (t_r)_{nn} \rangle + \dots = \prod_{r=1}^{r_T} \left( 1 - \frac{d}{\ell_{\cdot n}} \right) + \dots = \left( 1 - \frac{1}{r_T} \frac{L}{\ell_{\cdot n}} \right)^{r_T} + \dots \quad (5.31a)$$

- Al considerar el DWSL, Ec. (4.32), ( $r_T \rightarrow \infty$ ) obtenemos:

$$\lim_{DWSL} \langle t_{nn} \rangle = e^{-L/\ell_{\cdot n}} + \dots \quad (5.31b)$$

Al comparar las ecuaciones (5.27c) y (5.31b) podemos concluir que para este observable particular hemos encontrado que el SWLA no toma en cuenta los procesos de reflexiones múltiples ni transmisiones a otros canales diferentes al de incidencia.

### La ecuación de difusión para $\langle r'_{mn} \rangle_{L/\ell}$

De la misma manera en que expresamos  $t'_{mn}$  en términos de la submatriz  $M^{22}$ , Ec. (5.26), podemos expresar  $r'_{mn}$  de la siguiente manera:

$$r'_{mn} = [\beta (\alpha^*)^{-1}]_{mn} = [M^{12} (M^{22})^{-1}]_{mn} = \sum_{\sigma_1}^N [M^{12}]_{m\sigma_1} [(M^{22})^{-1}]_{\sigma_1 n} \quad (5.32)$$

Al introducir la expresión (5.32) en la ecuación de difusión del SWLA, Ec. (4.56), se obtiene la siguiente ecuación de evolución para  $\langle t'_{mn} \rangle_L$ :

$$\frac{\partial \langle r'_{mn} \rangle_L}{\partial L} = - \left[ \frac{1}{\ell_{m\cdot}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{\cdot n}} + \left( \frac{C(mm, nn)}{\sqrt{\ell_{mm}\ell_{nn}}} - \frac{\delta_{mn}}{\ell_{nn}} \right) \right] \langle r'_{mn} \rangle_L, \quad (5.33a)$$

cuya condición inicial es:

$$\langle r'_{mn} \rangle_0 = 0 \quad \forall m, n, \quad (5.33b)$$

por lo tanto, el valor esperado de  $r'_{mn}$  en el SWLA es:

$$\langle r'_{mn} \rangle_L = 0. \quad (5.33c)$$

La ecuación de evolución para  $\langle r'_{mn} \rangle_L$ , Ec. (5.33a), difiere un poco de la correspondiente ecuación de evolución que obtuvieron Mello y Tomsovic [18]. Como explicamos al final del Capítulo 4, lo anterior se debe a que dicho modelo no contempla los coeficientes de correlación [ver ecuación(4.17)]. Para recuperar la expresión de MT debemos suponer  $C(mm, nn) = 0$   $m \neq n$ ; sin embargo, en ambos modelos el resultado para  $\langle r'_{mn} \rangle_L$ , Ec. (5.33c), es el mismo.

Al igual que en el caso de  $\langle t'_{mn} \rangle_L$ , la ecuación de difusión de  $\langle r'_{mn} \rangle_L$  sólo puede resolverse en el SWLA, ya que en el régimen general, Ec. (4.41), el sistema de ecuaciones que se genera *no cierra*.

La serie de Born que usaremos en el Capítulo 7 dará un resultado consistente con (5.33c), ya que la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  es cero: ver sección 7.4.2, ecuación (7.98).

### 5.3.2. La ecuación de difusión para las intensidades

Obtener las ecuaciones de evolución para los valores esperados de las intensidades  $T'_{mn}$  y  $R'_{mn}$  es un procedimiento muy complicado, que omitiremos en el presente Capítulo, pero los pasos más importantes a partir de los cuales se pueden obtener estas ecuaciones se muestran en el Apéndice B; ver sección B.2.

Para obtener la ecuación de evolución de  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  debemos expresar la intensidad de transmisión  $T'_{mn} = t'_{mn} t'^*_{mn}$  de la siguiente manera

$$T'_{mn} = t'_{mn} t'^*_{mn} = \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn} \quad (5.34)$$

e introducirla en la ecuación (4.56), obteniendo así:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle T'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= -\frac{2}{\ell_{n-}} \langle T'_{mn} \rangle_L + \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{bn}} \langle T'_{mb} \rangle_L \\ &+ \sum_{a,b=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle T'_{ma} R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle t'^*_{ma} t'_{mb} r'^*_{bn} r'_{an} \rangle_L. \end{aligned} \quad (5.35a)$$

Las condiciones iniciales para las cantidades que aparecen en la ecuación (5.35a) son las siguientes:

$$\langle T'_{mn} \rangle_0 = \delta_{mn}, \quad (5.35b)$$

$$\langle T'_{ma} R'_{bn} \rangle_0 = 0, \quad (5.35c)$$

$$\langle t'^*_{ma} t'_{mb} r'^*_{bn} r'_{an} \rangle_0 = 0. \quad (5.35d)$$

De la misma manera en que obtuvimos la ecuación (5.35) para  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  obtendremos la ecuación para  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ . Para hacer lo anterior debemos expresar  $R'_{mn}$  de la siguiente manera:

$$R'_{mn} = r'_{mn} r'^*_{mn} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2=1}^N [M^{12}]_{m\sigma_1} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\sigma_1 n} [M^{21}]_{m\sigma_2} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\sigma_2 n}. \quad (5.36)$$

Al introducir (5.36) en (4.56) se obtiene la siguiente ecuación de evolución para  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle R'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= \frac{1}{\ell_{mn}} - 2 \left( \frac{1}{\ell_{m-}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{-n}} \right) \langle R'_{mn} \rangle_L \\ &+ \sum_{b=1}^N \left( \frac{1}{\ell_{mb}} \langle R'_{bn} \rangle_L + \frac{1}{\ell_{bn}} \langle R'_{mb} \rangle_L + 2 \frac{\delta_{mn}}{\ell_{mb}} \langle R'_{mb} \rangle_L \right) \\ &+ \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle R'_{ma} R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle r'^*_{ma} r'_{mb} r'^*_{bn} r'_{an} \rangle_L. \end{aligned} \quad (5.37a)$$

Las condiciones iniciales para las cantidades que aparecen en la ecuación (5.37a) son las siguientes:

$$\langle R'_{mn} \rangle_0 = 0, \quad (5.37b)$$

$$\langle R'_{ma} R'_{bn} \rangle_0 = 0, \quad (5.37c)$$

$$\langle r'^{*}_{ma} r'_{mb} r'^{*}_{bn} r'_{an} \rangle_0 = 0. \quad (5.37d)$$

Las ecuaciones (5.35a) y (5.37a) muestran la dificultad con que nos hemos enfrentado al querer resolver la ecuación de difusión: del lado derecho de ambas ecuaciones aparecen cantidades diferentes a las del lado izquierdo, por lo que habría que obtener las ecuaciones de evolución de estas nuevas cantidades; sin embargo, este procedimiento generará (en el lado derecho de las ecuaciones de estas nuevas cantidades) otras cantidades diferentes a las primeras y a las segundas. Por esta razón, el sistema de ecuaciones nunca cerrará.

Los términos que evitan que (5.35a) y (5.37a) cierren son, respectivamente, los siguientes:

$$\sum_{a,b=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle T'_{ma} R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle t'^{*}_{ma} t'_{mb} r'^{*}_{bn} r'_{an} \rangle_L, \quad (5.38a)$$

$$\sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle R'_{ma} R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle r'^{*}_{ma} r'_{mb} r'^{*}_{bn} r'_{an} \rangle_L. \quad (5.38b)$$

### 5.3.3. Consistencia de la ecuación de difusión

Hasta el momento hemos mostrado, en el SWLA, que la ecuación de difusión sí se puede resolver para las amplitudes, Ecs. (5.27c) y (5.33c), mientras que esto no es posible para las intensidades, aún en el SWLA. Otros observables para los cuales podríamos intentar resolver la ecuación de difusión son los relacionados con las propiedades de conservación de flujo (FC), Ec. (2.66) e invariancia ante inversiones temporales (TRI), Ec. (2.78). En esta sección obtendremos las ecuaciones que gobiernan la evolución de los valores esperados de dichos observables. Desafortunadamente, como veremos más adelante, las ecuaciones de estas cantidades no cierran excepto para la propiedad de TRI de las amplitudes, por lo que tampoco podremos resolver la ecuación de difusión de esas cantidades; sin embargo, para estos observables sabemos la respuesta.

Lo que haremos en esta sección será verificar la *consistencia* de la ecuación de difusión (4.56) con los resultados que físicamente esperamos para los valores esperados de cantidades relacionadas con la conservación de flujo y la invariancia ante inversiones temporales. Para hacer lo anterior usaremos el hecho de que cada muestra del ensemble (sobre el cual se calculan los valores promedio  $\langle F(M) \rangle_L$ ) satisface ambas propiedades; por lo tanto, los promedios estadísticos también deben satisfacerlas.

### Consistencia de la ecuación de difusión con la propiedad de conservación de flujo

La conservación de flujo, Ec. (2.66), impone la siguiente relación para los bloques de la matriz de dispersión  $S$ :

$$t'^{\dagger}t' + r'^{\dagger}r' = I_N, \quad (5.39a)$$

que en términos de los elementos de matriz se escribe

$$(t'^{\dagger}t' + r'^{\dagger}r')_{mn} = \sum_{a=1}^N [t'_{am}{}^*t'_{an} + r'_{am}{}^*r'_{an}] = \delta_{mn}. \quad (5.39b)$$

Si en la ecuación (5.39b) se toma el caso  $m = n$  se obtiene:

$$T'_{.n} + R'_{.n} = 1, \quad (5.40)$$

donde hemos definido la intensidad de transmisión total en el canal  $n$  como la suma (sobre todos los índices de canal abierto  $a$ ) de las probabilidades  $T'_{an}$  de que una onda que incide por el canal  $n$  se transmita en el canal  $a$ , es decir:

$$T'_{.n} = \sum_{a=1}^N T'_{an}; \quad (5.41a)$$

análogamente, la intensidad de reflexión total en el canal  $n$  se define como:

$$R'_{.n} = \sum_{a=1}^N R'_{an}. \quad (5.41b)$$

Por otro lado, si en la ecuación (5.39b) se toma el caso  $m \neq n$  se obtiene:

$$(t'^{\dagger}t')_{mn} + (r'^{\dagger}r')_{mn} = 0 \quad m \neq n. \quad (5.42)$$

Cada muestra del ensemble debe satisfacer la ecuación (5.39b) o equivalentemente las ecuaciones (5.40) y (5.42); por lo tanto, lo que se esperaría para  $\langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L$  es que *cumpliese* la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial}{\partial L} \langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L = 0, \quad (5.43a)$$

con la condición inicial:

$$\langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_0 = 1. \quad (5.43b)$$

Para obtener la de ecuación difusión de las cantidades  $\langle T'_{.n} \rangle_L$  y  $\langle R'_{.n} \rangle_L$  se debe sumar sobre el índice  $m$  las ecuaciones (5.35a) y (5.37a), obteniendo así:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle T'_{.n} \rangle_L}{\partial L} &= -\frac{2}{\ell_{.n}} \langle T'_{.n} \rangle_L + \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{bn}} \langle T'_{.b} \rangle_L + \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle T'_{.a} R'_{bn} \rangle_L \\ &\quad + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle (t'^{\dagger} t')_{ab} r'_{bn}{}^* r'_{an} \rangle_L, \end{aligned} \quad (5.44a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle R'_{.n} \rangle_L}{\partial L} &= \frac{1}{\ell_{.n}} - \frac{2}{\ell_{.n}} \langle R'_{.n} \rangle_L + \sum_{b=1}^N \left( \frac{1}{\ell_{bn}} \langle R'_{.b} \rangle_L - \frac{1}{\ell_{b.}} \langle R'_{bn} \rangle_L \right) \\ &\quad + \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle R'_{.a} R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle (r'^{\dagger} r')_{ab} r'_{bn}{}^* r'_{an} \rangle_L. \end{aligned} \quad (5.44b)$$

Al sumar las expresiones (5.44a)-(5.44b) se obtiene la ecuación de evolución que estábamos buscando:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial L} \langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L &= \frac{1}{\ell_{.n}} - \frac{2}{\ell_{.n}} \langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L + \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{bn}} \langle T'_{.b} + R'_{.b} \rangle_L - \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{b.}} \langle R'_{bn} \rangle_L \\ &\quad + \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle (T'_{.a} + R'_{.a}) R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle (t'^{\dagger} t' + r'^{\dagger} r')_{ab} r'_{bn}{}^* r'_{an} \rangle_L. \end{aligned} \quad (5.44c)$$

En la obtención de la ecuación (5.44c) no se hizo ninguna suposición ni aproximación, por lo que ésta es un resultado exacto en el SWLA. Desafortunadamente, al igual que las ecuaciones de evolución de  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ , Ecs. (5.35a) y (5.37a), la ecuación de evolución de  $\langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L$ , Ec. (5.44c), tampoco se puede resolver, pues ésta genera un sistema de ecuaciones que *no cierra*.

Como ya hemos mencionado, de la propiedad de conservación de flujo, Ec. (5.40) se espera que  $\langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L$  cumpla con la ecuación (5.43a). Por otro lado, de la ecuación de difusión hemos obtenido que esta cantidad satisface la ecuación (5.44c). Si la ecuación de difusión es *consistente* con la propiedad de conservación de flujo, entonces el lado derecho de la ecuación (5.44c) debe ser idénticamente cero. Para mostrar que lo anterior es cierto escribiremos el lado derecho de (5.44c) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} &\left\langle \frac{1}{\ell_{.n}} - \frac{2}{\ell_{.n}} (T'_{.n} + R'_{.n}) + \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{bn}} (T'_{.b} + R'_{.b}) - \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{b.}} R'_{bn} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} (T'_{.a} + R'_{.a}) R'_{bn} + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} (t'^{\dagger} t' + r'^{\dagger} r')_{ab} r'_{bn}{}^* r'_{an} \right\rangle_L. \end{aligned} \quad (5.45a)$$

Si en la ecuación (5.45a) usamos que cada muestra del ensemble satisface la propiedad de conservación de flujo, Ecs. (5.40) y (5.42), entonces las cantidades que aparecen dentro

del símbolo de promedio  $\langle \dots \rangle_L$  se simplifican, de tal manera que el lado derecho de (5.44c) toma la siguiente estructura:

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{1}{\ell_{-n}} - \frac{2}{\ell_{-n}} (1) + \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{bn}} (1) - \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{b-}} R'_{bn} + \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} (1) R'_{bn} + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} (0) r'_{bn} r'_{an} \right\rangle_L \\ & = \left\langle \frac{1}{\ell_{-n}} - \frac{2}{\ell_{-n}} + \frac{1}{\ell_{-n}} - \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_{b-}} R'_{bn} + \sum_{b=1}^N \frac{1}{\ell_b} R'_{bn} \right\rangle_L = 0. \end{aligned} \quad (5.45b)$$

donde hemos usado la definición del camino libre  $\ell_{n-}$ , Ec. (5.28).

Debe aclararse que no hemos resuelto la ecuación de evolución (5.44c), lo que hemos hecho es mostrar que la ecuación de difusión (4.56), *como era de esperarse*, es *consistente* con la propiedad de conservación de flujo, es decir, que la cantidad  $\langle T'_{-n} + R'_{-n} \rangle_L$  es constante para todo valor de  $L$ .

### Consistencia de la ecuación de difusión con la propiedad de invariancia ante inversiones temporales

La invariancia ante inversiones temporales, Ec. (2.78), impone las siguientes relaciones entre los elementos de la matriz de dispersión:

$$t' = t^T, \quad (5.46a)$$

$$r' = r'^T, \quad (5.46b)$$

que en términos de los elementos de matriz se expresa de la siguiente manera:

$$t'_{mn} = t_{nm}, \quad (5.47a)$$

$$r'_{mn} = r'_{nm}. \quad (5.47b)$$

De la pareja de ecuaciones (5.47a)-(5.47b) se obtiene que las intensidades cumplen las siguientes relaciones:

$$T'_{mn} = T_{nm}, \quad (5.48a)$$

$$R'_{mn} = R'_{nm}. \quad (5.48b)$$

De igual manera que mostramos la consistencia de la ecuación de difusión con la propiedad de conservación de Flujo mostraremos que la ecuación de difusión es consistente con la invariancia ante inversiones temporales. Debido a que la exposición la hemos hecho para las cantidades  $\langle t'_{mn} \rangle_L$ ,  $\langle r'_{mn} \rangle_L$ ,  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ , únicamente mostraremos

la consistencia de la ecuación de difusión con la propiedad de TRI para las cantidades  $\langle r'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ , pues con el objeto de abreviar la presentación no presentamos las ecuaciones de las cantidades  $\langle t'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle T'_{mn} \rangle_L$ .

Cada muestra del ensemble sobre el cual se calculan los promedios estadísticos tiene un Hamiltoniano que es invariante ante inversiones temporales, por lo que los elementos de la matriz de dispersión deben cumplir la ecuación (5.46) o equivalentemente las ecuaciones (5.47) y (5.48); por lo tanto, en el caso particular de las cantidades  $\langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} - R'_{nm} \rangle_L$  se esperaría que cumplieren, respectivamente, las siguientes ecuaciones de evolución:

$$\frac{\partial}{\partial L} \langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L = 0, \quad (5.49a)$$

$$\frac{\partial}{\partial L} \langle R'_{mn} - R'_{nm} \rangle_L = 0. \quad (5.49b)$$

**La ecuación de evolución para  $\langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L$ .** La ecuación de difusión de  $\langle r'_{nm} \rangle_L$  se obtiene al reemplazar  $m \rightarrow n$  y  $n \rightarrow m$  en la ecuación (5.33a); por lo tanto, las ecuaciones de difusión de las cantidades  $\langle r'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle r'_{nm} \rangle_L$  son, respectivamente:

$$\frac{\partial \langle r'_{mn} \rangle_L}{\partial L} = - \left[ \frac{1}{\ell_{m-}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{-n}} + \left( \frac{C(mm, nn)}{\sqrt{\ell_{mm}\ell_{nn}}} - \frac{\delta_{mn}}{\ell_{nn}} \right) \right] \langle r'_{mn} \rangle_L, \quad (5.50a)$$

$$\frac{\partial \langle r'_{nm} \rangle_L}{\partial L} = - \left[ \frac{1}{\ell_{n-}} + \frac{1}{\ell_{nm}} + \frac{1}{\ell_{-m}} + \left( \frac{C(nn, mm)}{\sqrt{\ell_{nn}\ell_{mm}}} - \frac{\delta_{nm}}{\ell_{mm}} \right) \right] \langle r'_{nm} \rangle_L. \quad (5.50b)$$

Al considerar la definición del camino libre medio de un canal específico ( $m$  o  $n$ ), Ec. (5.28) y que tanto  $C(mm, nn)$  como  $\ell_{mn}$  son simétricos ante el intercambio  $m \rightarrow n$ ,  $n \rightarrow m$  [ver ecuaciones (4.17) y (4.22)], obtenemos que la resta de las ecuaciones (5.50a)-(5.50b) da la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial L} \langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L = - \left[ \frac{1}{\ell_{m-}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{-n}} \left( \frac{C(mm, nn)}{\sqrt{\ell_{mm}\ell_{nn}}} - \frac{\delta_{mn}}{\ell_{nn}} \right) \right] \langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L, \quad (5.51a)$$

que se debe resolver con la condición inicial:

$$\langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_0 = 0. \quad (5.51b)$$

Debido a que la ecuación (5.51a) genera un sistema que sí cierra, podemos resolver la ecuación de difusión (5.51a) obteniendo que para todo valor de  $L$  se tiene:

$$\langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L = 0. \quad (5.51c)$$

En conclusión, para la cantidad  $\langle r'_{mn} - r'_{nm} \rangle_L$  hemos encontrado que la ecuación de difusión no sólo es consistente con la propiedad de TRI, Ec. (5.49a), sino que pudimos resolverla encontrando el resultado que se esperaba.

**La ecuación de evolución para  $\langle R'_{mn} - R'_{nm} \rangle_L$ .** Mediante un procedimiento análogo al que realizamos en el párrafo anterior se obtiene, a través de la ecuación (5.37a), las siguientes ecuaciones de evolución para las cantidades  $\langle R'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{nm} \rangle_L$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle R'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= \frac{1}{\ell_{mn}} - 2 \left( \frac{1}{\ell_{m-}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{-n}} \right) \langle R'_{mn} \rangle_L \\ &+ \sum_{b=1}^N \left( \frac{1}{\ell_{mb}} \langle R'_{bn} \rangle_L + \frac{1}{\ell_{bn}} \langle R'_{mb} \rangle_L + 2 \frac{\delta_{mn}}{\ell_{mb}} \langle R'_{mb} \rangle_L \right) \\ &+ \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle R'_{ma} R'_{bn} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle r'_{ma} r'_{mb} r'_{bn} r'_{an} \rangle_L, \end{aligned} \quad (5.52a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle R'_{nm} \rangle_L}{\partial L} &= \frac{1}{\ell_{nm}} - 2 \left( \frac{1}{\ell_{n-}} + \frac{1}{\ell_{nm}} + \frac{1}{\ell_{-m}} \right) \langle R'_{nm} \rangle_L \\ &+ \sum_{b=1}^N \left( \frac{1}{\ell_{nb}} \langle R'_{bm} \rangle_L + \frac{1}{\ell_{bm}} \langle R'_{nb} \rangle_L + 2 \frac{\delta_{nm}}{\ell_{nb}} \langle R'_{nb} \rangle_L \right) \\ &+ \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle R'_{na} R'_{bm} \rangle_L + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle r'_{na} r'_{nb} r'_{bm} r'_{am} \rangle_L. \end{aligned} \quad (5.52b)$$

Al considerar la definición del camino libre medio de un canal específico ( $m$  o  $n$ ), Ec. (5.28) y que el camino libre medio  $\ell_{mn}$  es simétrico ante el intercambio  $m \rightarrow n$ ,  $n \rightarrow m$ , Ec. (4.22), obtenemos que la resta de las ecuaciones (5.52a)-(5.52b) da la ecuación de evolución que se buscaba:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial L} \langle R'_{mn} - R'_{nm} \rangle_L &= -2 \left( \frac{1}{\ell_{m-}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{-n}} \right) \langle R'_{mn} - R'_{nm} \rangle_L \\ &+ \sum_{b=1}^N \left( \frac{1}{\ell_{mb}} \langle R'_{bn} - R'_{nb} \rangle_L + \frac{1}{\ell_{bn}} \langle R'_{mb} - R'_{bm} \rangle_L \right) + \sum_{a,b=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle R'_{ma} R'_{bn} - R'_{am} R'_{nb} \rangle_L \\ &+ \sum_{\substack{a,b \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \langle r'_{ma} r'_{mb} r'_{bn} r'_{an} \rangle_L - \sum_{\substack{a,b \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ba}} \langle r'_{na} r'_{nb} r'_{bm} r'_{am} \rangle_L. \end{aligned} \quad (5.52c)$$

Por su puesto, la ecuación (5.52c) genera un sistema de ecuaciones que no cierra, por lo que no se puede resolver; sin embargo, si en el lado derecho de (5.52c) usamos que cada muestra del ensemble satisface la propiedad TRI, Ecs. (5.47b) y (5.48b), entonces se obtiene la Ec. (5.49b).

En resumen, lo que hemos hecho es mostrar que la ecuación de difusión es consistente con las propiedades de conservación de flujo e invariancia ante inversiones temporales.

### Comportamiento de los valores esperados $\langle T'_{mn} \rangle_L$ y $\langle R'_{mn} \rangle_L$ para longitudes pequeñas

Si bien aún no hemos podido resolver las ecuaciones (5.35a) y (5.37a), sí podemos obtener información analítica de ellas, en particular, podemos conocer el comportamiento de los valores esperados  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$  cerca del origen ( $L \sim 0$ ). Para hacer lo anterior se utilizan las condiciones iniciales (5.35b)-(5.35d) y (5.37b)-(5.37d) para poder evaluar, en  $L = 0$ , las primeras derivadas de las cantidades  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ :

$$\frac{\partial \langle T'_{mn} \rangle_0}{\partial L = 0} = -\frac{2}{\ell_{n-}} \delta_{mn} + \frac{1}{\ell_{mn}} \quad (5.53a)$$

$$\frac{\partial \langle R'_{mn} \rangle_0}{\partial L = 0} = \frac{1}{\ell_{mn}}. \quad (5.53b)$$

Las expresiones de la (5.53) describen cualitativamente bien los resultados numéricos que presentaremos en la figuras 6.2 y 6.3 (ver sección 6.3), en las cuales se observa lo siguiente:

- En la figura 6.2 se observa que si  $m = n$ , la derivada en  $L = 0$  de  $\langle T'_{nn} \rangle_L$  es negativa al igual que lo predice la Ec. (5.53a), ya que

$$-\frac{2}{\ell_{n-}} + \frac{1}{\ell_{nn}} = -\frac{1}{\ell_{nn}} - 2 \sum_{\substack{b=1 \\ (b \neq n)}}^N \frac{1}{\ell_{nb}} < 0 \quad (5.54)$$

- En el recuadro de la figura 6.2 se observa que si  $m \neq n$  la derivada en  $L = 0$  del valor esperado  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  es positiva al igual que lo predice la Ec. (5.53a).
- En la figura 6.3 se observa que, tanto en el caso  $m = n$  como en el caso  $m \neq n$ , la derivada en  $L = 0$  del valor esperado  $\langle R'_{nn} \rangle_L$  es positiva al igual que lo predice la Ec. (5.53b).

Las expresiones de (5.53) también nos permiten conocer los respectivos desarrollos (a primer orden) en potencias de  $L$  de las cantidades  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$  alrededor de  $L = 0$ , siendo éstos:

$$\langle T'_{mn} \rangle_L = \left(1 - 2\frac{L}{\ell_{n-}}\right) \delta_{mn} + \frac{L}{\ell_{mn}} + O(L^2), \quad (5.55a)$$

$$\langle R'_{mn} \rangle_L = \frac{L}{\ell_{mn}} + O(L^2). \quad (5.55b)$$

Pensemos un momento que nos interesa conocer el término de orden  $L^2$  del desarrollo en potencias de  $L$  de la cantidad  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ . Si hubiésemos calculado las ecuaciones de difusión de las cantidades  $\langle R'_{ma} R'_{bn} \rangle_L$  y  $\langle r'^{*}_{ma} r'_{mb} r'^{*}_{bn} r'_{an} \rangle_L$  y hubiésemos definido adecuadamente las condiciones iniciales de todas las cantidades que apareciesen en dichas

ecuaciones, podríamos conocer el valor las derivadas de estas cantidades en  $L = 0$ . Conocer dichas derivadas en el origen nos ayudaría a conocer el valor de la segunda derivada de  $\langle R'_{mn} \rangle_L$  en  $L = 0$ , ya que al derivar la ecuación (5.37a) y evaluar el resultado obtendríamos la siguiente relación

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \langle R'_{mn} \rangle_0}{\partial L^2} &= -2 \left( \frac{1}{\ell_{m-}} + \frac{1}{\ell_{mn}} + \frac{1}{\ell_{-n}} \right) \frac{1}{\ell_{mn}} \\ &+ \sum_{b=1}^N \left( \frac{1}{\ell_{mb}} \frac{1}{\ell_{bn}} + \frac{1}{\ell_{bn}} \frac{1}{\ell_{mb}} + 2 \frac{\delta_{mn}}{\ell_{mb}} \frac{1}{\ell_{mb}} \right) \\ &+ \sum_{ab=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \frac{\partial \langle R'_{ma} R'_{bn} \rangle_0}{\partial L} + \sum_{\substack{a,b=1 \\ (a \neq b)}}^N \frac{1}{\ell_{ab}} \frac{\partial \langle r'^*_{ma} r'_{mb} r'^*_{bn} r'_{an} \rangle_0}{\partial L}. \end{aligned} \quad (5.56)$$

De esta manera obtendríamos el coeficiente de la potencia  $L^2$  del desarrollo en potencias de  $L$ . Este procedimiento iterativo lo hicieron por primera vez Mello y Tomsovic [18]. Podríamos pensar que al iterar una y otra vez la ecuación de difusión podríamos obtener todo el desarrollo en potencias de  $L$  de la cantidad  $\langle R'_{mn} \rangle_L$ ; desafortunadamente, esto representaría un gran esfuerzo cuyo resultado sólo sería válido en el régimen balístico,  $L \ll \ell$ , pues el resultado que obtendríamos sería un *desarrollo asintótico*: ver Apéndice D. Como veremos en el Capítulo 7 mediante la Serie de Born, que también es un método iterativo (ver sección 2.6), también obtendremos desarrollo asintóticos para los observables de interés.

Al sumar sobre el índice de canal saliente  $m$  las expresiones de (5.55) obtenemos (a orden  $L$ ) las intensidades de trasmisión y reflexión total, Ec. (5.41), siendo éstas:

$$\langle T'_{.n} \rangle_L = 1 - \frac{L}{\ell_{.n}} + O(L^2), \quad (5.57a)$$

$$\langle R'_{.n} \rangle_L = \frac{L}{\ell_{.n}} + O(L^2), \quad (5.57b)$$

las cuales son consistentes (al menos a orden  $L$ ) con la Conservación de Flujo, Ec. (5.40), pues al sumar dichas expresiones sobre el índice  $m$  se obtiene:

$$\langle T'_{.n} + R'_{.n} \rangle_L = 1 + O(L^2). \quad (5.57c)$$

Como veremos en el Capítulo 7, el comportamiento de los valores esperados en la aproximación de longitud de onda corta, corresponden a la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  en un desarrollo de potencias inversas de  $k\ell$ . En ese capítulo mostraremos que la contribución de orden  $L^2$  de la ecuación (5.57), también satisface conservación de flujo.

# Capítulo 6

## El Caminante Aleatorio vs Modelo Microscópico.

### 6.1. Introducción

Como mostramos en el Capítulo 5 sólo hemos podido resolver la ecuación de difusión para algunos observables particulares (ver sección 5.2); sin embargo, como exhibimos en la sección 5.3.2, al aplicar la ecuación de difusión a cantidades de mayor interés como los son las intensidades promedio  $\langle T_{ab} \rangle_{k,L}$  o  $\langle R_{ab} \rangle_{k,L}$ , nos enfrentamos al problema de que el sistema de ecuaciones que se genera no cierra, por lo que no podemos resolver el problema. Debido a esta dificultad se han desarrollado métodos numéricos para obtener información de los valores esperados; estos métodos no resuelven propiamente la ecuación de difusión, sino que representan métodos alternativos a ésta.

Los primeros resultados numéricos que presentaremos (ver sección 6.3) utilizan el método del “caminante aleatorio en el espacio de matrices de transferencia” (RWTMS). Estos resultados se basan en las propiedades estadísticas del bloque constitutivo en el régimen de longitud de onda corta [ver sección 4.4.3, ecuaciones (4.52)-(4.53)]. Los resultados obtenidos mediante el RWTMS se compararán con cálculos microscópicos basados en un modelo del potencial (ver sección 6.2). El acuerdo que obtendremos entre ambas simulaciones es excelente en casi todos los casos excepto en un caso (ver figura 6.6). Estos cálculos se realizaron a finales del 2005 por Luis Froude y posteriormente se publicaron en *Physical Review E* [22]. Debido a que los estos resultados numéricos los obtuvo Luis Froude en su tesis doctoral [39] y que ya están publicados, sólo esbozaremos el método y mostraremos los resultados.

Posteriormente a la publicación de la referencia [22] se continuó la investigación teniendo el mismo obstáculo: la imposibilidad de resolver la ecuación de difusión para observables de mayor interés; por esta razón, el autor del presente trabajo desarrolló un método basado en la serie de Born (ver sección 2.6), que de manera independiente a la ecuación de difusión, Ec. (4.41), obtiene, en el régimen balístico, el comportamiento de las cantidades de interés: ver Capítulo 7. Estas nuevas predicciones motivaron al autor del presente trabajo a realizar una verificación numérica, lo que dio lugar a un mod-

elo alternativo del potencial microscópico: ver sección 6.4. Al comparar los resultados numéricos (para dos observables particulares) obtenidos mediante los dos modelos del potencial se observa que son indistinguibles: compare las figuras 6.2-6.3 con las figuras 6.7-6.8. Todos los resultados numéricos que presentaremos en el Capítulo 7 usarán el modelo microscópico de la sección 6.4.

## 6.2. Un modelo microscópico del potencial

Consideremos el modelo microscópico del potencial que se esquematiza en la Fig. 6.1. En este modelo se considera una guía bidimensional de ancho  $W$  con paredes laterales impenetrables, en cuyo interior hay un potencial dispersor que ocupa la región  $0 \leq x \leq L$  en la dirección longitudinal, mientras que en la transversal  $W - \delta W \leq y \leq W$  con  $\delta W \leq W$ . Fuera de esta región el potencial es nulo.

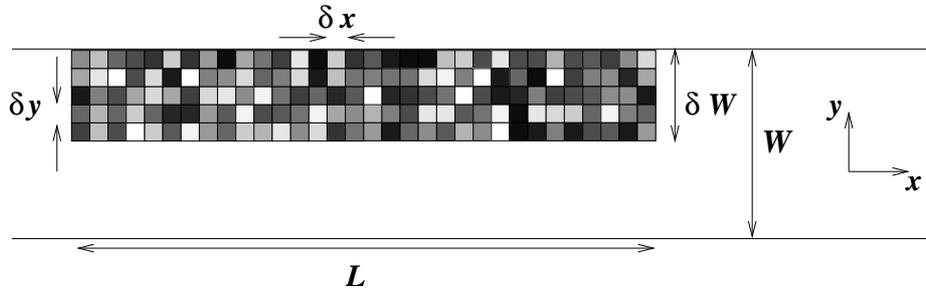


Figura 6.1: Representación esquemática del modelo microscópico basado en potenciales aleatorios. Cada cuadro, o “celda”, representa una región de potencial aleatorio constante.

La región en la que se encuentra el potencial se divide en “celdas” de dimensiones  $\delta x \times \delta y$ , de tal manera que éstas cumplen las siguientes relaciones:

$$\delta x, \delta y \ll \lambda, \quad (6.1a)$$

$$\delta x, \delta y \ll \delta W \ll W. \quad (6.1b)$$

En el lenguaje de la sección (3.2), el potencial de la  $r$ -ésima unidad dispersora, Ec. (3.7), se reemplaza por una delta finita

$$U_r(x, y) = u_r(y) \frac{\theta_{\delta x}(x - x_r)}{\delta x}, \quad (6.2)$$

donde  $\theta_{\delta x}(x - x_r)$  toma el valor 1 en el intervalo  $(x_r - \delta x/2, x_r + \delta x/2)$  y cero fuera de éste. La dependencia en la dirección transversal del potencial de la  $r$ -ésima unidad dispersora es la siguiente:

$$u_r(y) = \sum_{s=1}^{s_T} u_s \theta_{\delta y}(y - y_s), \quad (6.3)$$

donde  $s_T$  representa el número de celdas en la dirección transversal; por lo tanto, el potencial de la  $r$ -ésima unidad dispersora se expresa de la siguiente manera

$$U_r(x, y) = \sum_{s=1}^{s_T} U_s \theta_{\delta x}(x - x_r) \theta_{\delta y}(y - y_s), \quad (6.4a)$$

$$U_s = \frac{u_s}{\delta x}. \quad (6.4b)$$

Los valores  $U_s$  tienen unidades de número de onda  $k$  y toman valores aleatorios que se muestrean de una distribución uniforme en el intervalo  $[-U_0, U_0]$ .

Por comodidad, en este modelo aproximaremos los caminos libres al aplicar la definición (4.22) al potencial “desnudo”  $(u_r)_{ab}$  en vez del efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$ , es decir, despreciando el acoplamiento de los modos evanescentes. Como mostraremos en el capítulo 7, la contribución de los canales cerrados a los observables que estudiaremos aquí (las intensidades de transmisión y reflexión) no es apreciable. Usando esta aproximación, y las expresiones de (6.1) obtenemos la siguiente expresión para el camino libre medio:

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle [v_{ab}]^2 \rangle}{\delta x} = \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a k_b} \int_{W-\delta W}^W \chi_a^2(y) \chi_b^2(y) dy, \quad (6.5)$$

donde  $\chi_a(y)$  son los modos transversales definidos en la ecuación (2.5a).

En el caso de desorden de volumen,  $\delta W = W$ , el potencial desordenado ocupa toda la región  $0 < y < W$ , por lo que el camino libre medio toma la siguiente dependencia:

$$\left( \frac{1}{\ell_{ab}} \right)_{Volum} = \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a k_b} \frac{2 + \delta_{ab}}{2W}. \quad (6.6)$$

Por otro lado, en el caso de desorden superficial,  $\delta W \ll W$ , tenemos que el camino libre medio toma la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{\ell_{ab}} \right)_{Super} &= \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a k_b} \frac{1}{W} \left[ \frac{\delta W}{W} + \frac{\sin 2a\pi \left(1 - \frac{\delta W}{W}\right)}{2a\pi} - \frac{\sin [2(a-b)\pi \left(1 - \frac{\delta W}{W}\right)]}{4(a-b)\pi} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sin [2b\pi \left(1 - \frac{\delta W}{W}\right)]}{2b\pi} - \frac{\sin [2(a+b)\pi \left(1 - \frac{\delta W}{W}\right)]}{4(a+b)\pi} \right], \end{aligned} \quad (6.7a)$$

si  $a \neq b$ , mientras que si  $a = b$  el camino libre medio superficial toma la siguiente dependencia:

$$\left( \frac{1}{\ell_{aa}} \right)_{Super} = \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a^2} \frac{1}{W} \left[ \frac{3\delta W}{2W} - \frac{\sin 4a\pi \left(1 - \frac{\delta W}{W}\right)}{8a\pi} + \frac{\sin [2a\pi \left(1 - \frac{\delta W}{W}\right)]}{a\pi} \right]. \quad (6.7b)$$

### 6.3. Caminante aleatorio en el espacio de matrices de transferencia

La ecuación de difusión, Ec. (4.41), nos da la evolución con la longitud  $L$  de los valores esperados. La única dependencia microscópica de esta ecuación es a través de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ , por lo que una vez que se han especificado éstos, las propiedades estadísticas de los observables son universales, es decir, independientes de los detalles de la estadística microscópica. Sin embargo, no hemos podido resolver la ecuación de difusión, ya que en general es un reto difícil. Por esta razón hemos atacado el problema mediante un método alternativo, que en esencia es una generalización del *caminante aleatorio en el espacio de matrices de transferencia*, por esta razón el método recibe el nombre de “*Random Walk in the Transfer Matrix Space*”, el cual resumimos de la siguiente manera:

1. A partir de un modelo de potencial microscópico de la sección 6.2 se obtiene un conjunto de caminos libres medios.
2. Una vez que conocemos los caminos libres medios, Ecs. (6.6)-(6.7), se genera un ensemble de matrices de transferencia, cuyos primero y segundo momento son iguales a los correspondientes momentos del bloque constitutivo en la aproximación de longitud de onda corta: ver sección 4.4.3, ecuaciones (4.52)-(4.53).
3. La matriz de transferencia del sistema de longitud  $L = P\delta L$  se obtiene al combinar  $P$  [ver ecuación (4.4)] matrices de bloques constitutivos las cuales se obtienen aleatoriamente de un ensemble de bloques constitutivos. Este procedimiento se repite una y otra vez para obtener la distribución estadística de cualquier cantidad física. Como se demuestra en el Apéndice G de la Ref. [22], existe un *teorema de límite central (CLT por sus siglas en inglés)* asociado a la composición de bloques constitutivos. Este teorema demuestra que los momentos de orden superior al segundo de las matrices de transferencia del bloque constitutivo no tienen ninguna relevancia en la estadística final.

En el presente trabajo únicamente presentaremos los resultados obtenidos mediante el RWTMS para desorden volumétrico y superficial; los detalles del método se explican con mayor profundidad en la referencia [22].

Simultáneamente al método del RWTMS se resolvió numéricamente la ecuación de Schrödinger para el modelo microscópico expuesto en la sección 6.2. Las comparaciones entre ambas simulaciones se muestran simultáneamente y se grafican contra la variable  $L/\ell$  donde  $\ell$  es el camino libre medio de transporte definido en la ecuación (4.26), que reescribimos aquí:

$$\frac{1}{\ell} \equiv \frac{1}{N} \sum_{a,b=1}^N \frac{1}{\ell_{ab}}. \quad (6.8)$$

A diferencia del método “*Random Walk in the Transfer Matrix Space*”, la solución numérica de la ecuación de Schrödinger toma en cuenta de manera explícita la contribución de los canales cerrados, por lo que podemos decir que los resultados de estas

simulaciones son exactos; sin embargo, en el caso de los observables que presentaremos aquí, los valores promedio que se obtienen numéricamente son insensibles al número de canales cerrados que consideremos, ya que se observó que los resultados microscópicos convergían al tomar a lo más tres canales cerrados; sin embargo, como mostraremos en el Capítulo 7, lo anterior se debe a que en este Capítulo únicamente estudiamos los valores esperados de las intensidades o de la conductancia, observables que en efecto no dependen fuertemente de los canales cerrados. Por otro lado, en el Capítulo siguiente mostraremos tanto teóricamente como numéricamente que los canales cerrados son de gran importancia en el cálculo de las amplitudes promedio.

Para ejemplificar las simulaciones numéricas consideraremos el caso en el que la guía admite cinco canales abiertos  $N = 5$

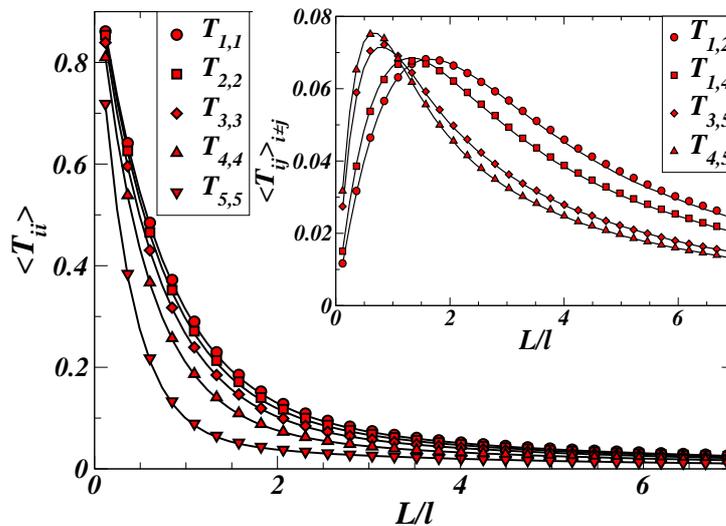


Figura 6.2: Desorden volumétrico en guías de ondas: valores promedio  $\langle T_{ii} \rangle$  (canal de entrada igual al de salida), como función de  $L/l$ . El recuadro muestra el resultado análogo para  $\langle T_{ij} \rangle$  con  $i \neq j$  para un conjunto representativo de índices de canal. Los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (cálculos microscópicos; símbolos) y el caminante aleatorio (línea continua) son indistinguibles. Los resultados se obtuvieron con cinco canales abiertos ( $N = 5$ ,  $kW = 5.5\pi$ ),  $U_0W^2 = 100$ ,  $\delta x/W = \delta y/W = 1/50$ , y  $10^5$  realizaciones del desorden microscópico.

### 6.3.1. Valores esperados en el caso de desorden volumétrico

#### Las intensidades de transmisión

El comportamiento del valor esperado de las intensidades  $\langle T_{ii} \rangle$  en el caso de desorden volumétrico (en el caso en que el canal de salida es el mismo que el de incidencia), se muestra en la figura 6.2 como función de  $L/l$ . El recuadro de la misma figura muestra el resultado para  $\langle T_{i \neq j} \rangle$  (en el caso en que el canal de salida es diferente que el de

incidencia). Los resultados obtenidos mediante el método del caminante aleatorio son indistinguibles de los que se obtienen al resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger.

### Las intensidades de reflexión

Los resultados del caminante aleatorio para el valor esperado  $\langle R_{ij} \rangle$  (líneas continuas) se muestran en la figura 6.3, donde se observa que éstos y los cálculos microscópicos tienen un excelente acuerdo, al igual que con trabajos numéricos previos [40]. El conjunto de intensidades de reflexión correspondientes a la retrodispersión, es decir,  $\langle R_{ii} \rangle$  son consistentes con el factor  $\langle R_{ii} \rangle / \langle R_{i \neq j} \rangle \approx 2$  del reforzamiento de la retrodispersión (EBS) que predice la ecuación de DMPK [15].

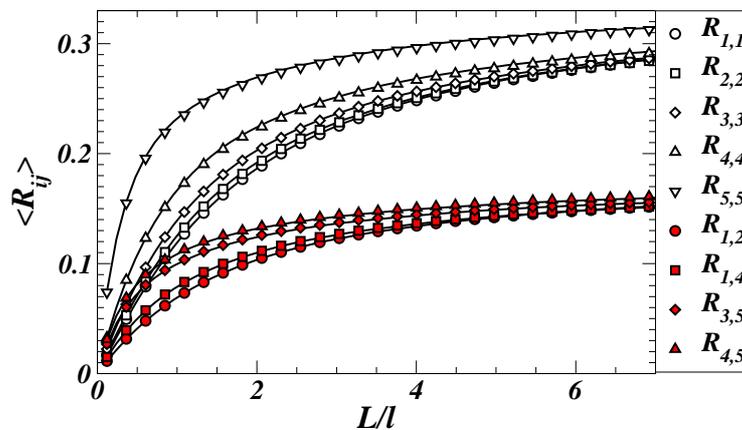


Figura 6.3: Desorden volumétrico en guías de ondas: intensidades de reflexión promedio  $\langle R_{ij} \rangle$  como función de  $L/l$ . El grupo de curvas superiores (símbolos huecos) corresponden a procesos en los que se incide por un canal y se refleja en el mismo canal ( $i = j$ ), mientras que las curvas inferiores (símbolos llenos) corresponden (para un conjunto de índices representativos) a procesos en los que se incide por un canal y se refleja por otro diferente ( $i \neq j$ ). Los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (cálculos microscópicos representados por los símbolos) y los del Caminante Aleatorio (líneas continuas) son indistinguibles. Los resultados se obtuvieron con cinco canales abiertos ( $N = 5$ ,  $kW = 5.5\pi$ ),  $U_0W^2 = 100$ ,  $\delta x/W = \delta y/W = 1/50$ , y  $10^5$  realizaciones del desorden microscópico.

### Distribución de la conductancia

La función de distribución  $P(g)$  de la conductancia adimensional [38]

$$g = \sum_{i,j=1}^N T_{ij}, \quad (6.9)$$

para desorden volumétrico se muestra en la figura 6.4. En esta figura se muestran varias funciones de distribución correspondientes a diferentes valores promedio de la conduc-

tancia  $\langle g \rangle$ . El recuadro de esta figura muestra la conductancia promedio como función de  $L/\ell$ .

Los resultados de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger para la distribución  $P(g)$  (histograma) son indistinguibles de los resultados del caminante aleatorio (círculos); además, en la figura 6.4 se muestra el resultado exacto de la ecuación de difusión de DMPK (línea continua) [15], la cual se obtuvo mediante una simulación de Monte Carlo [41]. El acuerdo entre las tres curvas es excelente.

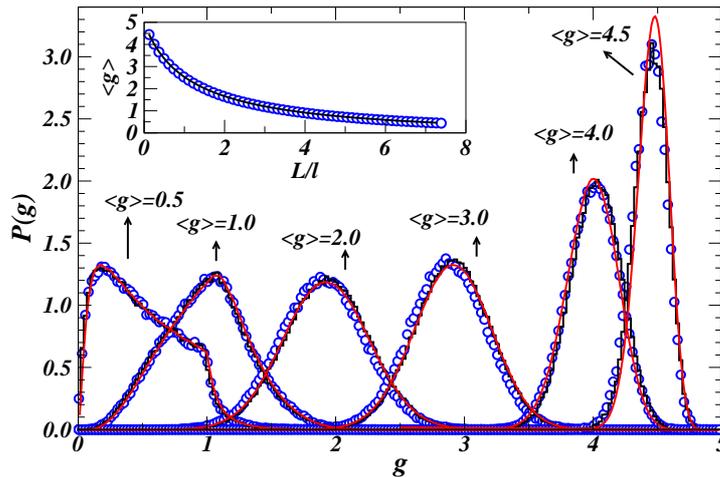


Figura 6.4: Desorden volumétrico en guías de ondas: distribución de la conductancia adimensional  $P(g)$ , para diferentes promedios de la conductancia,  $\langle g \rangle$ . Las tres curvas, basadas en diferentes tratamientos son indistinguibles. Los círculos corresponden al caminante aleatorio en la aproximación. La línea continua representa los resultados de la simulación de Montecarlo. El histograma representa los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger. El recuadro de la figura representa el promedio de la conductancia como función de  $L/\ell$ .

### 6.3.2. Valores esperados en el caso de desorden superficial

En el caso de desorden de superficie, los caminos libres medios que se obtienen de una distribución uniforme de dispersores son muy diferentes entre sí a diferencia de los correspondientes caminos libres que se obtienen en el caso de desorden volumétrico: ver ecuaciones (6.6)-(6.7). Los caminos libres del caso superficial muestran una fuerte anisotropía en los canales. Esto puede ser el origen entre las diferencias entre las distribuciones de desorden volumétrico y superficial.

### Distribución de la conductancia

La distribución de la conductancia adimensional  $P(g)$  obtenida con el método del caminante aleatorio (círculos) se muestra en la figura 6.5. En esta figura se muestran varias funciones de distribución correspondientes a diferentes valores del promedio de la conductancia  $\langle g \rangle$ . Los resultados de la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (histograma) nuevamente muestran un buen acuerdo con los resultados del Caminante Aleatorio y con trabajos numéricos previos [11, 17].

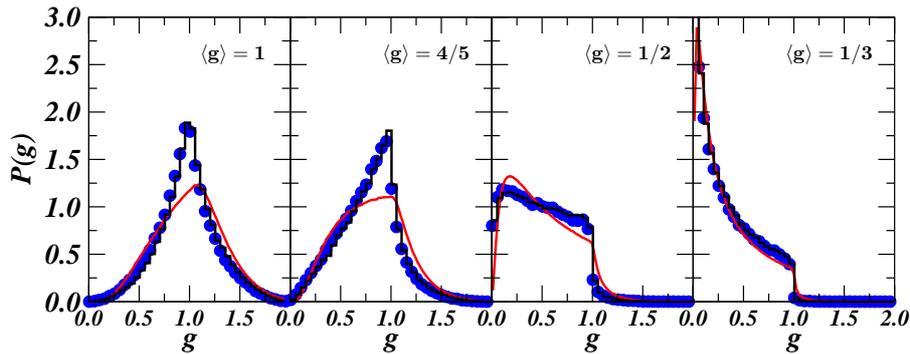


Figura 6.5: Desorden superficial en guías de ondas: distribución de la conductancia adimensional  $P(g)$ , para diferentes promedios de la conductancia,  $\langle g \rangle$ . Los círculos corresponden a las simulaciones del caminante aleatorio. El histograma corresponde a los resultados basados en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger. El resultado basado en la ecuación de DMPK (línea continua) no muestra un buen acuerdo con los otros dos tratamientos.

### Las intensidades de transmisión

Aunque en el caso de la distribución de la conductancia, Fig. 6.5, los cálculos numéricos basados en el caminante aleatorio muestran un buen acuerdo con los resultados obtenidos mediante la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (resultado exacto), no hay un buen acuerdo para el promedio de las transmisiones totales  $\langle T_{\text{a}} \rangle$ , donde

$$T_{\text{a}} = \sum_{b=1}^N T_{ba}. \quad (6.10)$$

En la figura 6.6 se muestra el comportamiento de  $\langle T_{\text{a}} \rangle$  como función de  $L/\ell$ . En esta figura se comparan los resultados del caminante aleatorio (líneas de segmentos) con los cálculos microscópicos (líneas continuas). La razón por la que el método del caminante aleatorio no da una buena descripción para este observable no la conocemos, pero se sospecha que puede deberse a las aproximaciones hechas al calcular la expresión (6.5).

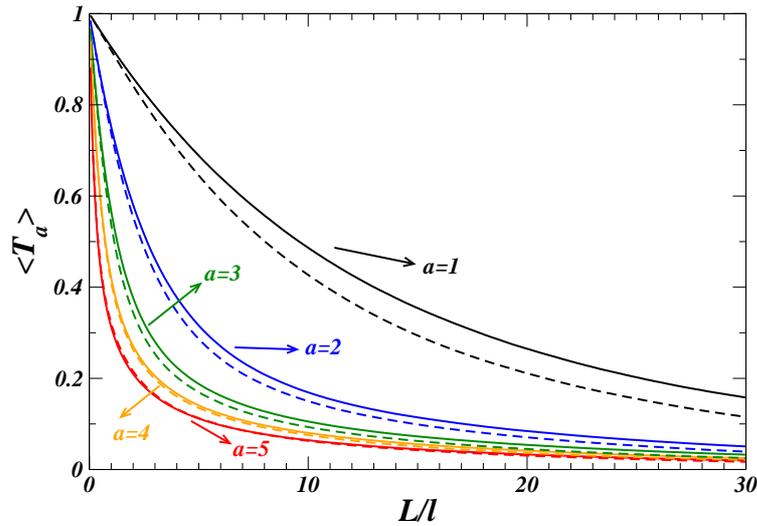


Figura 6.6: Desorden Superficial en Guías de Ondas: Coeficientes de transmisión promedio  $\langle T_a \rangle$  como función de  $L/\ell$ . El acuerdo entre los resultados basados en una solución numérica de la ecuación de Schrödinger (cálculos microscópicos: líneas continuas) y la simulación del método del caminante aleatorio (líneas punteadas) no es tan buena como lo es para las distribuciones de la conductancia

## 6.4. Un modelo microscópico alternativo

Como ya hemos anticipado en el Capítulo 7 haremos un estudio de la dispersión en el régimen balístico. Los resultados teóricos que ahí presentemos se compararán con simulaciones numéricas que realizaremos con un modelo microscópico un poco diferente al que presentamos en la sección 6.2. Esta serie de simulaciones numéricas las realizó en 2008 el autor del presente trabajo sin haber visto el método ni el código del programa de Luis Froufe. Las simulaciones que haremos en el Capítulo 7 sólo considerarán desorden volumétrico, por lo que el modelo microscópico que propondremos en la sección 6.4.1 sólo considerará este caso.

La manera en que abordaremos el problema será con el método de la matriz de *dispersión extendida*, es decir, nuestro objetivo es construir la matriz de dispersión del sistema de longitud  $L$ , haciendo uso de las matrices de dispersión de cada unidad dispersora.

En este modelo alternativo usaremos explícitamente que la  $r$ -ésima unidad dispersora en efecto es un potencial delta, de tal manera que el potencial de la  $r$ -ésima unidad dispersora tiene la estructura de la ecuación (3.10b), que reescribimos a continuación:

$$U_r(x, y) = u_r(y) \delta(x - x_r). \quad (6.11)$$

Debido a que la matriz de *dispersión extendida* de un potencial delta depende de la matriz  $\tilde{v}_r$ , Ecs. (3.30)-(3.33), que a su vez depende de la matriz  $u_r$ , Ecs. (3.15)-(3.19), debemos proponer un modelo microscópico para la dependencia transversal  $u_r(y)$  del  $r$ -ésimo potencial delta.

### 6.4.1. Modelo para la dependencia transversal del potencial

Para construir la ecuación de difusión, Ec. (4.41), supusimos que la dependencia transversal de los potenciales individuales  $u_r(y)$  era arbitraria, pero aleatoria, de tal manera que lo único que necesitamos para obtener dicha ecuación era el modelo estadístico del potencial efectivo; sin embargo, si queremos realizar una simulación numérica con base en un modelo microscópico del potencial debemos especificar dicha dependencia transversal. El modelo que propondremos para la cantidad  $u_r(y)$  se basa en las siguientes suposiciones:

1. El ancho de la guía de ondas  $W$  se subdivide en un arreglo de  $s_T$  segmentos cada uno de longitud:

$$\delta y = W/s_T \quad (6.12)$$

2. Cada segmento se identifica por el índice  $s$ , el cual toma los valores enteros  $s = 1, \dots, s_T$ .
3. El  $s$ -ésimo segmento estará centrado en la posición  $y_s = (s - 1/2) \delta y$ , por lo que dicho segmento está definido por los valores de  $y \in [(s - 1) \delta y, s \delta y]$ .
4. Para todo valor de  $y$  en el interior del intervalo  $[(s - 1) \delta y, s \delta y]$ , la función  $u_r(y)$  toma el valor constante  $(u_r)_s$ . Este valor constante se muestrea aleatoriamente del intervalo  $[-u_0, u_0]$ .

Las suposiciones anteriores pueden resumirse a través de la siguiente expresión para la función  $u_r(y)$ :

$$u_r(y) = \sum_{s=1}^{s_T} (u_r)_s \Theta_{\delta y}(y - y_s), \quad (6.13)$$

donde la función  $\Theta_{\delta y}(y - y_s)$  toma los siguientes valores:

$$\Theta_{\delta y}(y - y_s) = 1 \text{ si } y \in \left[ y_s - \frac{\delta y}{2}, y_s + \frac{\delta y}{2} \right], \quad (6.14)$$

$$\Theta_{\delta y}(y - y_s) = 0 \text{ si } y \notin \left[ y_s - \frac{\delta y}{2}, y_s + \frac{\delta y}{2} \right], \quad (6.15)$$

por lo tanto, el modelo microscópico de la  $r$ -ésima unidad dispersora toma la siguiente dependencia:

$$U_r(x, y) = u_r(y) \delta(x - x_r), \quad (6.16)$$

Una vez que tenemos el modelo microscópico de  $u_r(y)$ , podemos construir la matriz de *dispersión extendida* del  $r$ -ésimo dispersor, lo que requiere que apliquemos todo el procedimiento presentado en la sección 3.3.1, cuyo primer paso es obtener los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$  definidos en la ecuación (3.10). Al introducir la ecuación (6.13) en (3.10), obtenemos la siguiente expresión para los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$ :

$$(u_r)_{ab} = \sum_{s=1}^{s_T} (u_r)_s I_{ab}(s), \quad (6.17)$$

donde se ha definido la cantidad

$$I_{ab}(s) = \int_{(s-1)\delta y}^{s\delta y} \chi_a(y) \chi_b(y) dy, \quad (6.18a)$$

siendo  $\chi_a(y)$  y  $\chi_b(y)$  las funciones de onda transversal definidas en la ecuación (2.5). Si en la ecuación (6.18a)  $a = b$ , entonces:

$$I_{aa}(s) = \frac{1}{s_T} - \frac{\sin\left(2a\frac{s}{s_T}\pi\right) - \sin\left(2a\frac{(s-1)}{s_T}\pi\right)}{2a\pi}, \quad (6.18b)$$

por otro lado, si en la ecuación (6.18a)  $a \neq b$ , entonces:

$$I_{a \neq b}(s) = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\sin\left((a-b)\frac{s}{s_T}\pi\right) - \sin\left((a-b)\frac{(s-1)}{s_T}\pi\right)}{(a-b)} - \frac{\sin\left((a+b)\frac{s}{s_T}\pi\right) - \sin\left((a+b)\frac{(s-1)}{s_T}\pi\right)}{(a+b)} \right]. \quad (6.18c)$$

Los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$  de la expresión (6.17), son las cantidades fundamentales que nos permitirán obtener la matriz de dispersión extendida de cada potencial delta, de tal manera que al aplicar sucesivamente las reglas de combinación para las matrices de dispersión extendidas, Ecs. (2.137)-(2.138), podremos obtener la matriz de dispersión extendida del sistema de longitud  $L$ .

### 6.4.2. El modelo estadístico

El modelo estadístico que propondremos a continuación busca ser consistente con el modelo estadístico que propondremos en el Capítulo 7 para los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$  del potencial “desnudo”: ver ecuación (7.1). Esto se logra suponiendo lo siguiente:

- El primer momento de las cantidades  $(u_r)_{ab}$  de be ser cero, es decir,

$$\langle (u_r)_{ab} \rangle = 0, \quad (6.19a)$$

que se cumple [ver ecuación (6.17)] si:

$$\langle (u_r)_s \rangle = 0. \quad (6.19b)$$

- Las unidades dispersoras son estadísticamente independientes, de tal manera que debe cumplirse la siguiente relación:

$$\langle (u_r)_{ab} (u_{r'})_{cd} \rangle = \delta_{rr'} \langle (u_r)_{ab} (u_r)_{cd} \rangle. \quad (6.19c)$$

- Análogamente, cada segmento en la dirección transversal del  $r$ -ésimo dispersor debe ser estadísticamente independiente de los demás; por lo tanto, las cantidades  $(u_r)_s$  serán cantidades aleatorias que cumplan la siguiente relación:

$$\langle (u_r)_s (u_r)_{s'} \rangle = \delta_{rr'} \delta_{ss'} \langle (u_r)_s^2 \rangle. \quad (6.19d)$$

- Las cantidades aleatorias  $(u_r)_s$  tomarán valores aleatorios en el intervalo  $[-u_0, u_0]$ , de tal manera que el segundo momento (6.19d) toma el siguiente valor:

$$\langle (u_r)_s^2 \rangle = \frac{1}{3} u_0^2. \quad (6.19e)$$

Utilizando el modelo estadístico (6.19), podemos expresar los coeficientes de correlación  $C(ab, cd)$  y los caminos libres medios generalizados  $\ell_{ab}$  [ver ecuaciones (7.3) y (7.8) respectivamente] que necesitaremos para calcular las curvas teóricas del Capítulo 7. Las expresiones de estas cantidades son, respectivamente, las siguientes:

$$C(ab, cd) = \left[ \sum_{s=1}^{s_T} I_{ab}(s) I_{cd}(s) \right] \left[ \left( \sum_{s=1}^{s_T} I_{ab}^2(s) \right) \left( \sum_{s'=1}^{s_T} I_{cd}^2(s') \right) \right]^{-1/2}, \quad (6.20a)$$

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{v_0^2}{3d} \eta_a \left[ \sum_{s=1}^{s_T} I_{ab}^2(s) \right] \eta_b, \quad (6.20b)$$

donde  $d$  es la distancia entre cada unidad dispersora,  $v_0^2 = u_0^2/4k^2$  y las cantidades  $\eta_a$  se definen de la siguiente manera:

$$\eta_a = \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{a}{N+\frac{1}{2}}\right)^2}}, \quad 1 \leq a \leq N, \quad (6.21a)$$

$$\eta_a = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{a}{N+\frac{1}{2}}\right)^2 - 1}}, \quad a > N. \quad (6.21b)$$

### 6.4.3. Breve discusión de la simulación numérica

Utilizando el modelo microscópico de la sección 6.4.1 y el estadístico de la sección 6.4.2 desarrollamos un programa en FORTRAN que genera numéricamente, para cada valor de  $L/\ell$ , un ensemble de guías, del cual obtendremos los promedios estadísticos de observables macroscópicos. Para construir cada muestra del ensemble se hicieron las siguientes consideraciones:

1. Cada muestra de longitud  $L$  consiste de  $r_T$  potenciales delta  $U_r(x, y)$ , [ver Ecs. (6.13) y (6.16)], los cuales están separados entre sí una distancia  $d$ .
2. Cada dispersor se identifica con el índice  $r$ , el cual toma los valores entre 1 y  $r_T$ .

3. El  $r$ -ésimo dispersor delta está situado en la posición  $x_r = rd$ .
4. La longitud de la muestra se relaciona con el número total de dispersores a través de la relación

$$L = r_T d. \quad (6.22)$$

5. Por convención supondremos que el primer dispersor está ubicado en  $x_1 = d$ , es decir, que en el origen no hay dispersor. Como veremos más adelante, lo anterior nos permitirá definir las condiciones iniciales para los valores esperados de las observables de nuestro interés.

Para estudiar el problema de la dispersion producida por una muestra específica de longitud  $L$  haremos uso del método de la matriz de dispersión extendida  $\tilde{S}$  en vez de la matriz de transferencia extendida  $\tilde{M}$ . La razón por la cual se hace lo anterior se debe a que, numéricamente, es más estable generar matrices de dispersión que matrices de transferencia.

El procedimiento consistirá en generar, numéricamente, la matriz de dispersión extendida de una muestra específica de longitud  $L$  que contiene  $r_T$  dispersores en la dirección longitudinal  $x$ . Para lograr lo anterior habrá que generar las matrices de dispersión de los  $r_T$  dispersores delta, cada uno de ellos ubicado en la posición  $x_r = rd$  a lo largo de la dirección longitudinal  $x$ . La notación que utilizaremos para referirnos a la matriz de dispersión extendida del sistema constituido por los  $r_T$  dispersores será  $\tilde{S}_{r_T}$ . Por otro lado, para referirnos a la matriz de dispersión del  $r$ -ésimo dispersor delta usaremos  $\tilde{s}_r$ ; por lo tanto, para generar numéricamente la matriz de dispersión extendida  $\tilde{S}_{r_T}$ , deberemos hacer lo siguiente:

- Generar numéricamente la matriz de dispersión extendida  $\tilde{s}_1$  del primer dispersor ubicado en  $x_1 = d$ .
- Generar la matriz de dispersión extendida  $\tilde{s}_2$  del segundo dispersor ubicado en  $x_2 = 2d$ , combinar las matrices de dispersión extendidas  $\tilde{s}_1$  y  $\tilde{s}_2$  de los dos primeros dispersores para obtener la matriz de dispersión del sistema compuesto por dos dispersores  $\tilde{S}_2$ . La manera en que se combinan las matrices de dispersión de dos dispersores la describiremos más adelante.
- Al repetir sucesivamente lo anterior el  $r$ -ésimo paso consistirá en generar la matriz de dispersión del  $r$ -ésimo dispersor  $\tilde{s}_r$  ubicado en  $x_r = rd$  y combinarla con la matriz de dispersión del sistema compuesto de los  $r - 1$  dispersores previos, los cuales se ubican en las posiciones  $x_1 = d, x_2 = 2d, x_3 = 3d, \dots, x_{r-1} = (r - 1)d$ . De esta manera se obtiene la matriz de dispersión  $\tilde{S}_{r_T}$  del sistema compuesto por  $r_T$  dispersores.

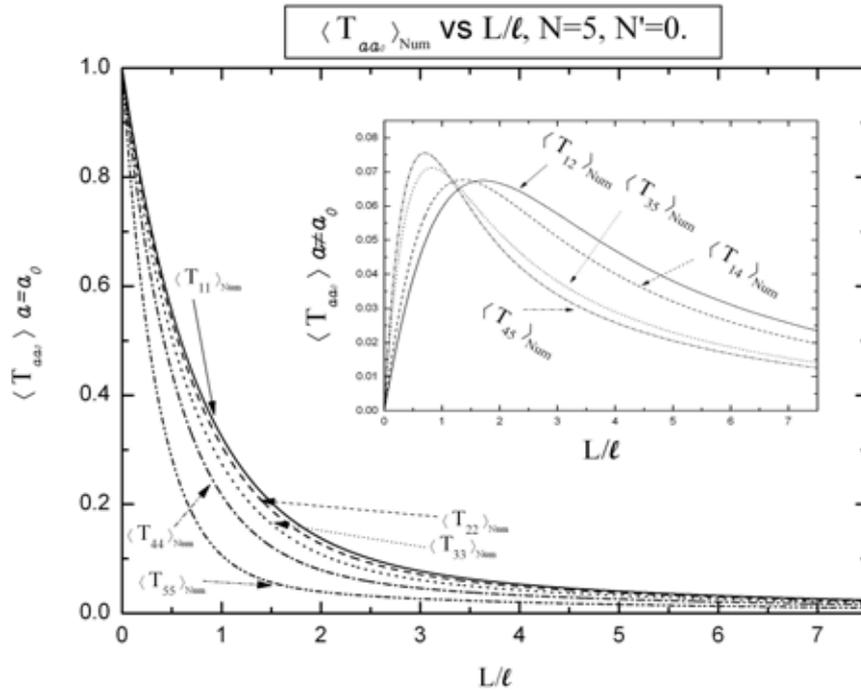


Figura 6.7:  $\langle T_{aa_0} \rangle$  vs  $L/\ell$ : En la figura se muestran los resultados numéricos para  $\langle T_{aa} \rangle$  utilizando el modelo alternativo del potencial. En recuadro se muestra el resultado análogo para  $\langle T_{a \neq a_0} \rangle$ . Los cálculos se realizaron en el caso de cinco canales abiertos ( $N = 5$ ), despreciando la contribución de los canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $k\ell = 100$  y para  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

#### 6.4.4. Resultados numéricos del modelo microscópico alternativo

Utilizando el programa descrito en la sección anterior, se realizó una simulación numérica considerando que la guía de ondas admite cinco canales abiertos ( $N = 5$ ) e ignorando la contribución de los canales cerrados. Bajos estas condiciones se obtuvieron numéricamente los valores promedio para las intensidades de transmisión  $\langle T_{aa_0} \rangle$  y de reflexión  $\langle R_{aa_0} \rangle$ . La realización de este cálculo buscó comparar los resultados de nuestro programa (basado en el modelo alternativo del potencial) con los resultados que obtuvo Luis Froufe en sus simulaciones numéricas para este caso: ver figuras 6.2 y 6.3. Los resultados obtenidos mediante nuestro programa se muestran en las figuras 6.7 y 6.8. Al comparar las curvas de las figuras 6.2-6.3 con las correspondientes curvas de las figuras 6.7-6.8, nos damos cuenta que son idénticas; es decir, las simulaciones numéricas hechas para estas observables por dos programas diferentes basados en modelos microscópicos diferentes, pero con modelos estadísticos semejantes, dieron los mismos resultados. Además de esta verificación el nuevo programa tuvo más verificaciones, dentro de las

cuales destaca que en cada paso el programa verificó que la matriz de *dispersión extendida* de los dispersores individuales y la del sistema completo cumpliesen las relaciones de conservación de flujo e invariancia ante inversiones temporales: ver ecuaciones (2.113) y (2.127), respectivamente. Estas y otras verificaciones de nuestro programa, nos dieron confianza en que el programa estaba trabajando de manera adecuada; por lo tanto, estábamos listos para realizar nuevas simulaciones numéricas para poder comparar los resultados teóricos que la serie de Born predice en el régimen balístico: ver Capítulo 7. Entre las predicciones que se obtienen de la serie de Born destaca que, en el régimen balístico, los valores esperados de las amplitudes dependen fuertemente de las contribuciones de los canales cerrados, mientras que las intensidades son insensibles a éstas; sin embargo, las simulaciones numéricas basadas en el modelo alternativo mostrarán que estas predicciones son ciertas más allá del régimen balístico.

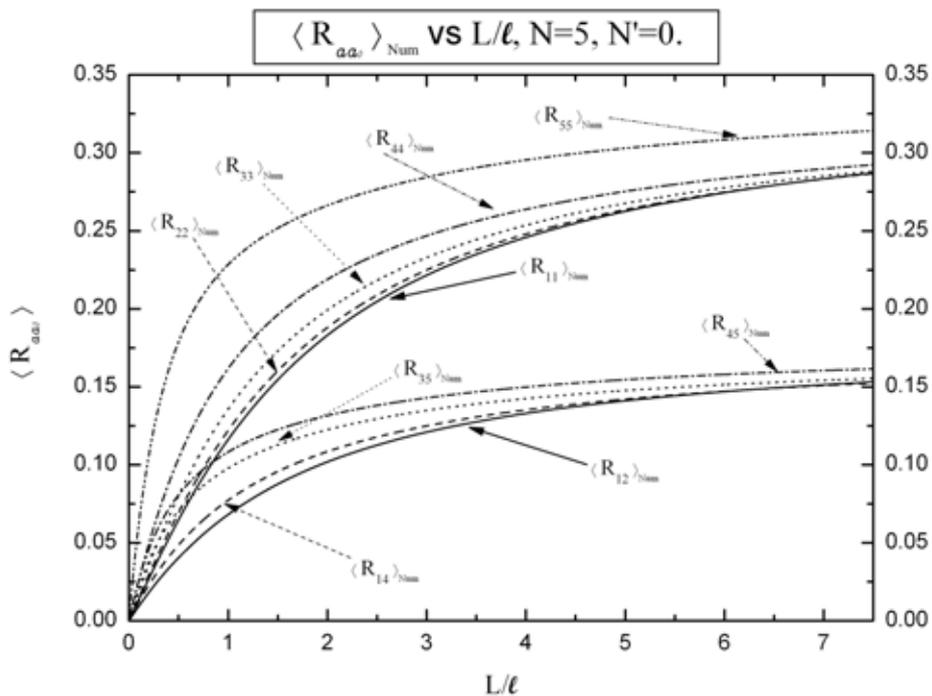


Figura 6.8:  $\langle R_{aa0} \rangle$  vs  $L/\ell$ : Resultados numéricos para  $\langle R_{aa0} \rangle$  utilizando el modelo alternativo del potencial. Los cálculos se realizaron en el caso de cinco canales abiertos ( $N = 5$ ), despreciando la contribución de los canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $k\ell = 100$  y para  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.



# Capítulo 7

## Estudio de la dispersión en el régimen balístico

### 7.1. Introducción

La redacción del presente Capítulo tiene tres motivaciones principales. Las primeras dos son diferentes entre sí, pero ambas relacionadas con la ecuación de difusión, Ec. (4.41).

La primera motivación se debe a la imposibilidad que hasta el momento hemos tenido de resolver la ecuación de difusión, Ec. (4.41), para observables relacionados con la matriz de dispersión, en especial con las intensidades de transmisión  $T_{aa_0}$  y de reflexión  $R_{aa_0}$ . Por esta razón el autor del presente trabajo buscó obtener información de este tipo de observables y otros, a través de un método que fuese independiente de la ecuación de difusión. Lo primero que se intentó fue aplicar un método que permitiese manipular cada observable de interés por separado, es decir, evitar que de alguna manera esos observables se acoplasen como sucede con el método de la ecuación de difusión.

La segunda motivación tiene que ver con el manejo adecuado de los canales cerrados, ya que, como vimos en el Capítulo 4, la ecuación de difusión se construyó multiplicando las matrices de transferencia reducidas del sistema de longitud  $L$  y del bloque constitutivo de longitud  $\delta L$ , Ecs. (4.1)-(4.4), que a su vez se obtienen multiplicando las matrices de transferencia reducidas de los dispersores individuales, Ecs. (3.44)-(3.46); sin embargo, este procedimiento es una aproximación, pues la regla de combinación de matrices de transferencia es válida para las matrices extendidas [ver la ecuación (2.141) de la sección 2.5.4 y la ecuación (4.3) de la sección 4.2]. Si bien la matriz de transferencia reducida de un dispersor individual tiene información de los canales cerrados [a través del potencial efectivo, Ec. (3.49)], la aproximación antes mencionada no toma en cuenta de manera apropiada la contribución de los canales cerrados al multiplicar matrices de transferencia; sin embargo, los resultados numéricos (que resuelven numéricamente la ecuación de Schrödinger, por lo que toman en cuenta los canales cerrados) obtenidos en trabajos previos e incluso los que presentamos en el Capítulo 6, muestran que los valores esperados de los observables de interés son insensibles a la contribución de los canales

cerrados. Dichos trabajos se enfocaron a estudiar los promedios de las intensidades  $T_{aa_0}$ ,  $R_{aa_0}$  y de manera muy especial al de la conductancia  $g$ , sin prestar atención a las amplitudes (promedio)  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$ ; sin embargo, mediante el método que desarrollaremos aquí, demostraremos teóricamente (al menos en el régimen balístico) que la contribución de los canales cerrados es de gran relevancia en las amplitudes (promedio)  $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$  y  $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$ . Por otro lado, demostraremos que las intensidades (promedio)  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$  y  $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$  sí tienen contribuciones de los canales cerrados, pero éstas son despreciables con respecto a la contribución dominante de los canales abiertos.

Estas dos motivaciones se pueden abordar mediante el método perturbativo de la serie de Born (ver sección 2.6), que de manera natural expresa las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$  en potencias del potencial; por lo tanto, únicamente necesitamos un nuevo planteamiento del modelo estadístico del potencial. Por supuesto, al igual que todos los métodos perturbativos, el que aplicaremos aquí tiene su límite de validez, pues el método sólo será válido en el régimen balístico y en la aproximación de longitud de onda corta: ver ecuación (7.23). La razón de esto se debe a que tenemos fuertes indicios, y la demostración en un caso particular, de que las series que se obtienen son asintóticas (ver Apéndice D), las cuales en general divergen, pero son útiles para aproximar funciones en un punto específico y a lo más con número óptimo de términos.

La tercera motivación se debe a que el *bloque constitutivo* [que es un sistema balístico: ver ecuación (4.36)] *tiene interés físico en sí mismo* y no sólo como un mecanismo para obtener la ecuación de difusión, ya que éste tiene propiedades estadísticas universales y *su estudio teórico puede motivar experimentos reales* en el laboratorio, quizá en guías de onda electromagnéticas u otro tipo de ondas clásicas (elásticas). De manera particular nos interesa estudiar las covarianzas de las intensidades, Ec. (7.69), y la varianza de la conductancia, ya que estas cantidades sólo se han estudiado en el régimen difusivo.

Los resultados teóricos basados en la serie de Born se compararán, en el régimen balístico, con resultados obtenidos mediante simulaciones numéricas basadas en el modelo microscópico que presentamos en la sección 6.4. El acuerdo entre los resultados teóricos y numéricos será excelente en la mayoría de los casos. Si bien los resultados teóricos sólo tendrán validez en el régimen balístico, de ellos podremos inferir información sobre el comportamiento de los valores esperados fuera del régimen balístico, lo que verificaremos con resultados numéricos.

El material que se presenta en este Capítulo aun no está concluido, pero representa la base de una futura publicación.

## 7.2. Modelo estadístico del potencial cuasi-unidimensional

Debido a que vamos a obtener los valores esperados de las amplitudes de transmisión  $t_{aa_0}$  y de reflexión  $r_{aa_0}$  de canales abiertos mediante el método de la serie de Born (ver sección 2.6) debemos definir un modelo estadístico para el potencial cuasi-unidimensional complejo  $\tilde{V}_{ab}(x)$ , Ec. (7.16), ya que la serie de Born depende directamente de éste. Obtendremos dicho modelo estadístico del que propongamos para los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$  de los potenciales delta individuales, a los cuales nos referiremos como los

potenciales “desnudos”.

Por simplicidad, propondremos un modelo estadístico análogo al que propusimos para el potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$ , Ec. (4.16), ya que este modelo ha resultado cómodo de manejar. El modelo estadístico que propondremos para el potencial desnudo, Ec. (7.1), no reproduce el modelo estadístico del potencial efectivo, Ec. (4.16); sin embargo, este último se podrá reproducir a partir del modelo del potencial desnudo, en el límite denso de dispersión débil, Ec. (7.5), identificando adecuadamente los parámetros.

Debemos notar que el potencial desnudo  $(u_r)_{ab}$  es más fundamental que el potencial efectivo, pues este último se obtiene del primero: ver ecuación (3.49).

### 7.2.1. El modelo estadístico de los potenciales delta

De la ecuación (3.13) vemos que el potencial cuasi-unidimensional  $U_{ab}(x)$  es una serie de  $n$  potenciales delta cada una de éstas con un factor  $(u_r)_{ab}$ . Debido a que las cantidades  $(u_r)_{ab}$  son las variables aleatorias con las que modelaremos el desorden microscópico, el potencial cuasi-unidimensional  $U_{ab}(x)$  también es una cantidad aleatoria; por lo tanto, el modelo estadístico del potencial  $U_{ab}(x)$  se obtendrá al definir el modelo estadístico que propongamos para los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$  (que tienen unidades de  $k$ ). Dicho modelo estadístico es el siguiente:

$$\langle (u_r)_{ab} \rangle = 0, \quad (7.1a)$$

$$\langle (u_r)_{ab} (u_s)_{cd} \rangle = \langle (u_r)_{ab} (u_r)_{cd} \rangle \delta_{rs}, \quad (7.1b)$$

$$\begin{aligned} & \vdots \\ \langle (u_r)_{a_1 b_1} (u_r)_{a_2 b_2} \cdots (u_r)_{a_{2p-1} b_{2p-1}} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (7.1c)$$

$$\langle (u_r)_{a_1 b_1} (u_r)_{a_2 b_2} \cdots (u_r)_{a_{2p} b_{2p}} \rangle \neq 0. \quad (7.1d)$$

El modelo de la ecuación (7.1b) considera a los dispersores estadísticamente independientes con segundo momento diferente de cero:

$$\langle (u_r)_{ab} (u_r)_{cd} \rangle \neq 0. \quad (7.1e)$$

Como vemos de la ecuación (2.150) la serie de Born de las amplitudes de canales abiertos  $t_{aa_0}$  y  $r_{bb_0}$  se expresan en términos de los elementos de matriz del potencial cuasi-unidimensional complejo  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$ , Ec. (3.18), por lo que de ahora en adelante nos enfocaremos a obtener el modelo estadístico para estas cantidades. Para obtener un modelo estadístico del potencial cuasi-unidimensional  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$  debemos expresar el de los potenciales  $(u_r)_{ab}$ , Ec. (7.1), en términos de los potenciales  $(v_r)_{ab}$  o equivalentemente de los potenciales  $(\tilde{v}_r)_{ab}$  [ver ecuaciones (3.15) y (3.17)]:

$$\langle (\tilde{v}_r)_{ab} \rangle = \Gamma(ab) \langle (v_r)_{ab} \rangle = 0, \quad (7.2a)$$

$$\langle (\tilde{v}_r)_{ab} (\tilde{v}_s)_{cd} \rangle = \Gamma(ab) \Gamma(cd) \langle (v_r)_{ab} (v_r)_{cd} \rangle \delta_{rs}, \quad (7.2b)$$

$$\begin{aligned} & \vdots \\ & \vdots \\ \langle (\tilde{v}_r)_{a_1 b_1} \cdots (\tilde{v}_r)_{a_{2p-1} b_{2p-1}} \rangle &= \Gamma(a_1 b_1) \cdots \Gamma(a_{2p-1} b_{2p-1}) \langle (v_r)_{a_1 b_1} \cdots (v_r)_{a_{2p-1} b_{2p-1}} \rangle = 0, \end{aligned} \quad (7.2c)$$

$$\langle (\tilde{v}_r)_{a_1 b_1} \cdots (\tilde{v}_r)_{a_{2p} b_{2p}} \rangle = \Gamma(a_1 b_1) \cdots \Gamma(a_{2p} b_{2p}) \langle (v_r)_{a_1 b_1} \cdots (v_r)_{a_{2p} b_{2p}} \rangle \neq 0, \quad (7.2d)$$

con

$$\langle (v_r)_{ab} \rangle = 0, \quad \langle (v_r)_{ab} (v_r)_{cd} \rangle \neq 0. \quad (7.2e)$$

Al igual que en el caso del potencial efectivo, definimos los coeficientes de correlación para el potencial desnudo de la siguiente manera:

$$C(ab, cd) = \frac{\langle (u_r)_{ab} (u_r)_{cd} \rangle}{[\langle [(u_r)_{ab}]^2 \rangle \langle [(u_r)_{cd}]^2 \rangle]^{1/2}} = \frac{\langle (v_r)_{ab} (v_r)_{cd} \rangle}{[\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle \langle [(v_r)_{cd}]^2 \rangle]^{1/2}}, \quad (7.3)$$

donde los índices  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  pueden ser de canales abiertos o cerrados. Debemos recordar que las cantidades  $(u_r)_{ab}$  y  $(v_r)_{ab}$  son cantidades reales, mientras que las cantidades  $(\tilde{v}_r)_{ab}$  en general son complejas (ver sección 3.2.3); por lo tanto, los coeficientes de correlación de la ecuación (7.3) son cantidades reales para cualquier combinación de los índices  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$ .

### El límite denso de dispersión débil

Al igual que en el Capítulo 4, estamos interesados en obtener los valores esperados de las series de Born de las observables de interés en el límite denso de dispersión débil (DWSL); por lo tanto, tenemos que definir lo que entendemos por dispersión débil en el contexto del potencial desnudo  $(u_r)_{ab}$  o equivalentemente del potencial  $(v_r)_{ab}$ . Por dispersión débil entendemos que la distribución de los elementos de matriz  $(u_r)_{ab}$  es tal que para toda pareja de canales  $a$  y  $b$ , sean *abiertos o cerrados*, se satisfacen las siguientes relaciones:

$$\frac{(u_r)_{ab}}{2\sqrt{k_a k_b}} = (v_r)_{ab} \ll 1, \quad (7.4a)$$

$$\frac{(u_r)_{ab}}{2\sqrt{k_a \kappa_b}} = (v_r)_{ab} \ll 1, \quad (7.4b)$$

$$\frac{(u_r)_{ab}}{2\sqrt{\kappa_a k_b}} = (v_r)_{ab} \ll 1, \quad (7.4c)$$

$$\frac{(u_r)_{ab}}{2\sqrt{\kappa_a \kappa_b}} = (v_r)_{ab} \ll 1. \quad (7.4d)$$

Por lo tanto, el límite denso de dispersión débil equivale a tomar los siguientes límites matemáticos:

$$\langle (v_r)_{ab}^2 \rangle \rightarrow 0, \quad (7.5a)$$

$$d \rightarrow 0, \quad (7.5b)$$

$$n \rightarrow \infty, \quad (7.5c)$$

pero manteniendo fijas las cantidades

$$\frac{\langle (v_r)_{ab}^2 \rangle}{d} \rightarrow \text{fijo} \quad (7.5d)$$

$$nd = L. \quad (7.5e)$$

La ecuación (7.5d) requiere que supongamos que el segundo momento del potencial desnudo  $(v_r)_{ab}$  sea proporcional a  $d$ .

Por otro lado, si utilizamos las ecuaciones (3.48) y (3.49) podemos expresar los elementos de matriz del potencial efectivo  $(\hat{v}_r)$  en términos de los elementos de matriz del potencial desnudo  $(v_r)$  de la siguiente manera:

$$(\hat{v}_r)_{ab} = (v_r)_{ab} - \sum_{c,d=N+1}^{\infty} (v_r)_{ac} \left[ \left( I_Q + (v_r)_{QQ} \right)^{-1} \right]_{cd} (v_r)_{db}, \quad (7.6)$$

donde  $a$  y  $b$  son índices de canal abierto. Utilizando la ecuación (7.6) en la expresión del camino libre medio, Ec. (4.22), obtenemos que, en el límite denso de dispersión débil, el camino libre medio se expresa en términos del potencial desnudo como:

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle [(\hat{v}_r)_{ab}]^2 \rangle}{d} = \frac{\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle}{d} \quad 1 \leq a, b \leq N. \quad (7.7)$$

De la ecuación (7.7) vemos que, en el límite denso de dispersión débil, el modelo estadístico del potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$ , Ec. (4.16), se puede recuperar a partir del modelo del potencial desnudo  $(u_r)_{ab}$ , Ec. (7.3), ya que el segundo momento de ambos potenciales es igual al camino libre medio.

### Extensión de los caminos libres medios

En el modelo estadístico del potencial efectivo, Ec. (4.16), los índices  $a$  y  $b$  de los potenciales  $(\hat{u}_r)_{ab}$  sólo pueden ser índices de canales abiertos; sin embargo, el modelo estadístico del potencial desnudo, Ec. (7.1), permite que los índices  $a$  y  $b$  de los potenciales  $(u_r)_{ab}$ , puedan ser abiertos o cerrados: lo anterior exhibe un punto importante a considerar.

De la ecuación (7.7) concluimos que, cuando  $a$  y  $b$  son índices de canales abiertos, el segundo momento del potencial desnudo  $(u_r)_{ab}$  es igual al segundo momento del potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$  y por ende al inverso del camino libre medio  $\ell_{ab}$ ; sin embargo, no hemos dicho nada acerca del segundo momento del potencial desnudo  $(u_r)_{ab}$  cuando

alguno de los índices o los dos son de canales cerrados. Lo anterior es importante, pues cuando calculemos el valor esperado de la serie de Born de alguna cantidad de interés, tendremos que evaluar momentos de éste estilo; por lo tanto, tenemos que “extender” el concepto de camino libre medio de la siguiente manera:

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle [(u_r)_{ab}]^2 \rangle}{4k_a k_b d} = \frac{\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle}{d}, \quad 1 \leq a, b \leq N \quad (7.8a)$$

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle [(u_r)_{ab}]^2 \rangle}{4\kappa_a k_b d} = \frac{\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle}{d}, \quad a > N, \quad 1 \leq b \leq N \quad (7.8b)$$

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle [(u_r)_{ab}]^2 \rangle}{4k_a \kappa_b d} = \frac{\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle}{d}, \quad 1 \leq a \leq N, \quad b > N \quad (7.8c)$$

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle [(u_r)_{ab}]^2 \rangle}{4\kappa_a \kappa_b d} = \frac{\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle}{d}, \quad a, b > N. \quad (7.8d)$$

Si bien las últimas tres expresiones de la ecuación (7.8) no representan un camino libre medio como sí lo hace la primera, [ver ecuación (4.22)], éstas jugarán el papel de un camino libre medio en los valores esperados de la serie de Born; además, como veremos más adelante, serán estos segundos momentos los que darán contribuciones explícitas de canales cerrados en los valores esperados de observables macroscópicas.

Utilizando la extensión del camino libre medio, Ec. (7.8), y los coeficientes de correlación, Ec. (7.3), podemos expresar la cantidad real  $\langle (v_r)_{ab} (v_r)_{cd} \rangle / d$ , en el límite denso de dispersión débil, de la siguiente manera:

$$\frac{\langle (v_r)_{ab} (v_r)_{cd} \rangle}{d} = C(ab, cd) \left[ \frac{\langle [(v_r)_{ab}]^2 \rangle}{d} \frac{\langle [(v_r)_{cd}]^2 \rangle}{d} \right]^{1/2} \equiv \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{\ell_{ab} \ell_{cd}}}, \quad (7.9)$$

donde de  $a, b, c$  y  $d$  pueden ser índices de canales abiertos o cerrados.

### 7.2.2. Modelo de ruido blanco generalizado

Una vez que hemos definido el modelo estadístico del potencial desnudo  $(u_r)_{ab}$ , veamos cómo se aplica para obtener el valor esperado de la serie de Born de una cantidad de interés.

Para ilustrar cómo obtener el valor esperado de la serie de Born de un observable calculemos, en el límite denso de dispersión débil, el valor esperado de la serie de Born de la amplitud de transmisión de canales abiertos  $t_{aa_0}$  (con  $a$  y  $a_0$  índices de canales abiertos): ver sección 2.6.2. La serie de Born de  $t_{aa_0}$  la escribimos de manera compacta en la ecuación (2.151a), donde las cantidades  $(t_{aa_0})_n$  representan el orden en el potencial de cada uno de los términos de las series de Born; por lo tanto, al promediar ambos lados de la ecuación (2.151a), utilizando el modelo estadístico de la ecuación (7.2), obtenemos:

$$\langle t_{aa_0} \rangle = \delta_{aa_0} + \langle (t_{aa_0})_1 \rangle + \langle (t_{aa_0})_2 \rangle + \langle (t_{aa_0})_3 \rangle + \langle (t_{aa_0})_4 \rangle + \cdots \quad (7.10)$$

Pongamos nuestra atención en el primer orden de la ecuación (7.10):  $\langle (t_{aa_0})_1 \rangle$ . Utilizando las ecuaciones (2.152a) y (3.18) obtenemos que  $\langle (t_{aa_0})_1 \rangle$  se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \langle (t_{aa_0})_1 \rangle &= (-i) \int_0^L \varphi_-(k_a; x_1) \langle \tilde{\mathcal{V}}_{aa_0}(x_1) \rangle \varphi_+(k_{a_0}; x_1) dx_1 \\
 &= (-i) \int_0^L \varphi_-(k_a; x_1) \left\langle \sum_{r=1}^n (\tilde{v}_r)_{aa_0} \delta(x_1 - x_r) \right\rangle \varphi_+(k_{a_0}; x_1) dx_1 \\
 &= (-i) \int_0^L \varphi_-(k_a; x_1) \sum_{r=1}^n \langle (\tilde{v}_r)_{aa_0} \rangle \delta(x_1 - x_r) \varphi_+(k_{a_0}; x_1) dx_1.
 \end{aligned} \tag{7.11a}$$

Pero del modelo estadístico, Ec. (7.2), sabemos que el primer momento  $\langle (\tilde{v}_r)_{aa_0} \rangle$  es cero; por lo tanto:

$$\langle (t_{aa_0})_1 \rangle = 0; \tag{7.11b}$$

mediante un procedimiento análogo es fácil darse cuenta que los términos de la serie de Born que sean de orden impar en el potencial, promediarán a cero; por lo tanto, la ecuación (7.10) toma la siguiente estructura:

$$\langle t_{aa_0} \rangle = \delta_{aa_0} + \langle (t_{aa_0})_2 \rangle + \langle (t_{aa_0})_4 \rangle + \dots \tag{7.12}$$

Consideremos ahora la contribución de segundo orden (en el potencial)  $\langle (t_{aa_0})_2 \rangle$ , la cual obtenemos al promediar la ecuación (2.152b)

$$\langle (t_{aa_0})_2 \rangle = (-i)^2 \sum_{b_1=1}^{\infty} \int_0^L \int_0^L f_{2;a,a_0}(x_1, x_2) \langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1a_0}(x_2) \rangle dx_1 dx_2, \tag{7.13a}$$

donde hemos definido la función de dos puntos:

$$f_{2;a,b_1,a_0}(x_1, x_2) = \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_1}; x_1 - x_2) \varphi_+(k_{a_0}; x_2). \tag{7.13b}$$

Observemos que en la ecuación (7.13) la suma sobre el índice  $b_1$  se realiza sobre los canales abiertos y los cerrados, de tal manera que en esta ecuación hemos utilizado la convención definida en la ecuación (2.145) para las funciones de Green.

Si utilizamos el modelo microscópico del potencial cuasi-unidimensional, Ec. (3.18), y el modelo estadístico, Ec. (7.2), obtenemos que la ecuación (7.13a) se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \langle (t_{aa_0})_2 \rangle &= (-i)^2 \sum_{b_1=1}^{\infty} \sum_{r=1}^n \int_0^L \int_0^L f_{2;a,b_1,a_0}(x_1, x_2) \langle (\tilde{v}_r)_{ab_1} (\tilde{v}_r)_{b_1a_0} \rangle \\
 &\quad \times \delta(x_1 - x_r) \delta(x_2 - x_r) dx_1 dx_2
 \end{aligned} \tag{7.14a}$$

$$\begin{aligned}
 &= (-i)^2 \sum_{b_1=1}^{\infty} \sum_{r=1}^n f_{2;a,b_1,a_0}(x_r, x_r) \Gamma(ab_1) \Gamma(b_1a_0) \frac{\langle (v_r)_{ab_1} (v_r)_{b_1a_0} \rangle}{d},
 \end{aligned} \tag{7.14b}$$

que en el limite denso de dispersión débil toma la siguiente forma:

$$\lim_{DWS} \langle (t_{aa_0})_2 \rangle = (-i)^2 \sum_{b_1=1}^{\infty} \Gamma(ab_1) \Gamma(b_1a_0) \frac{C(ab_1, b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}}} \int_0^L f_{2;a,a_0}(x_1, x_1) dx_1 \quad (7.14c)$$

De manera análoga, se puede mostrar que el promedio de la contribución de cuarto orden, en el límite denso de dispersión débil,  $\langle (t_{aa_0})_4 \rangle$  tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \lim_{DWS} \langle (t_{aa_0})_4 \rangle &= (-i)^4 \sum_{b_1 b_2 b_3=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1 b_2) \Gamma(b_2 b_3) \Gamma(b_3 a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 b_2} \ell_{b_2 b_3} \ell_{b_3 a_0}}} \quad (7.15a) \\ &\times \left[ C(ab_1, b_1 b_2) C(b_2 b_3, b_3 a_0) \int_0^L \int_0^L f_{4;a,b_1 b_2, b_3, a_0}(x_1, x_1, x_2, x_2) dx_1 dx_2 \right. \\ &+ C(ab_1, b_2 b_3) C(b_1 b_2, b_3 a_0) \int_0^L \int_0^L f_{4;a,b_1 b_2, b_3, a_0}(x_1, x_2, x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &\left. + C(ab_1, b_3 a_0) C(b_1 b_2, b_2 b_3) \int_0^L \int_0^L f_{4;a,b_1 b_2, b_3, a_0}(x_1, x_2, x_2, x_1) dx_1 dx_2 \right], \end{aligned}$$

donde hemos definido la función de cuatro puntos:

$$\begin{aligned} f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_2, x_3, x_4) &= \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_2}; x_2 - x_3) \\ &\times \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_3}; x_3 - x_4) \varphi_+(k_{a_0}; x_4), \quad (7.15b) \end{aligned}$$

pues al igual que en la función de dos puntos la de cuatro puntos utiliza la convención definida en la ecuación (2.145) para las funciones de Green.

De las ecuaciones (7.14) y (7.15) podemos ver que, en el limite denso de dispersión débil, el valor esperado de la serie de Born de la amplitud de transmisión, sólo depende de los detalles del potencial microscópico a través de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$ , es decir, sólo depende de los segundos momentos del potencial microscópico, siendo los momentos de orden superior irrelevantes en el límite. Lo anterior no es característico solamente del valor esperado  $\langle t_{aa_0} \rangle$ , sino que será característico del valor esperado de cualquier observable en límite denso de dispersión débil.

Obtener el valor esperado de la serie de Born como lo hicimos para las expresiones (7.14) y (7.15) es muy tedioso; sin embargo, es fácil ver que esas expresiones se pueden obtener más fácilmente si definimos un modelo de *ruido blanco generalizado* de la siguiente manera:

$$\langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x_1) \rangle = 0, \quad (7.16a)$$

$$\langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{cd}(x_2) \rangle = \frac{\Gamma(ab)\Gamma(cd)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}}} C(ab, cd) \delta(x_1 - x_2), \quad (7.16b)$$

$$\langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{cd}(x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{ef}(x_3) \rangle = 0, \quad (7.16c)$$

$$\langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{cd}(x_2) \tilde{\mathcal{V}}_{ef}(x_3) \tilde{\mathcal{V}}_{gh}(x_4) \rangle = \frac{\Gamma(ab)\Gamma(cd)\Gamma(ef)\Gamma(gh)}{\sqrt{\ell_{ab}\ell_{cd}\ell_{ef}\ell_{gh}}} \quad (7.16d)$$

$$\times \left[ C(ab, cd)C(ef, gh)\delta(x_1 - x_2)\delta(x_3 - x_4) + C(ab, ef)C(cd, gh)\delta(x_1 - x_3)\delta(x_2 - x_4) \right. \\ \left. + C(ab, gh)C(cd, ed)\delta(x_1 - x_4)\delta(x_2 - x_3) \right].$$

⋮

Los índices de canal que aparecen en la ecuación (7.16) pueden ser de canales abiertos como de canales cerrados. La ecuación (7.16) es el modelo estadístico del potencial cuasi-unidimensional  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$  que utilizaremos de ahora en adelante para obtener los valores esperados de la serie de Born de las cantidades de nuestro interés. Los resultados que obtengamos de aplicar el modelo estadístico de la ecuación (7.16) serán válidos en el límite denso de dispersión débil, por lo que, de ahora en adelante, omitiremos el símbolo  $\lim_{DWS}$ .

En conclusión, lo que hemos mostrado es que obtener el valor esperado de la serie de Born de un observable en el límite denso de dispersión débil utilizando el modelo microscópico del potencial cuasi-unidimensional  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$  junto con el modelo estadístico de los elementos de matriz  $(\tilde{v}_r)_{ab}$ , es equivalente a utilizar un modelo estadístico de ruido blanco generalizado, Ec. (7.16), que, a menos de que se diga lo contrario, será el que usaremos de ahora en adelante para hacer nuestros cálculos.

### 7.3. Valores esperados: caso unidimensional

En esta sección aplicaremos una versión unidimensional del modelo estadístico de la ecuación (7.16) para obtener el valor esperado de la serie de Born de las amplitudes  $t$  y  $r$ , así como sus intensidades  $T$  y  $R$  en el caso unidimensional. Por ser el caso unidimensional el más sencillo de tratar, discutiremos éste lo más posible tratando de exhibir tanto la implementación del método de la serie de Born como el comportamiento del valor esperado de ésta, lo cual es muy difícil de hacer para el caso multicanal.

La serie de Born de las amplitudes de transmisión  $t$  y de reflexión  $r$  del caso unidimensional se obtienen de las expresiones del caso multicanal poniendo  $N = 1$  e ignorando las contribuciones de canales cerrados, es decir, hay que considerar que las sumas que aparecen en las expresiones de la ecuación (2.152) sólo tienen un sumando.

Del modelo estadístico definido en la ecuación (7.16) para el potencial cuasi-unidimensional  $\tilde{\mathcal{V}}_{ab}(x)$ , podemos obtener el modelo estadístico para el potencial unidimensional  $\mathcal{V}(x)$  de la siguiente manera:

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \rangle = 0 \quad (7.17a)$$

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \rangle = \frac{1}{\ell} \delta(x_1 - x_2) \quad (7.17b)$$

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \rangle = 0 \quad (7.17c)$$

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \mathcal{V}(x_4) \rangle = \frac{1}{\ell^2} \left[ \delta(x_1 - x_2) \delta(x_2 - x_3) + \delta(x_1 - x_3) \delta(x_2 - x_4) + \delta(x_1 - x_4) \delta(x_2 - x_3) \right], \quad (7.17d)$$

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \mathcal{V}(x_4) \mathcal{V}(x_5) \rangle = 0 \quad (7.17e)$$

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \mathcal{V}(x_4) \mathcal{V}(x_5) \mathcal{V}(x_6) \rangle = \frac{1}{\ell^3} \left\{ \delta(x_1 - x_2) \times \left[ \delta(x_3 - x_4) \delta(x_5 - x_6) + \delta(x_3 - x_5) \delta(x_4 - x_6) + \delta(x_3 - x_6) \delta(x_4 - x_5) \right] + \text{todas las combinaciones} \right\}, \quad (7.17f)$$

⋮

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \cdots \mathcal{V}(x_{2p-1}) \rangle = 0 \quad (7.17g)$$

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \cdots \mathcal{V}(x_{2p-1}) \mathcal{V}(x_{2p}) \rangle = \frac{1}{\ell^p} \left\{ (2p-1)!! \text{ combinaciones de productos de } p \text{ deltas de Dirac} \right\}, \quad (7.17h)$$

donde hemos omitido la tilde, ya que en el caso unidimensional  $\mathcal{V}(x)$  no puede ser una cantidad compleja.

Utilizando la versión unidimensional de la notación compacta de la Ec. (2.152) y el hecho de que el promedio de un término de la serie de Born de orden impar en el potencial es cero, obtenemos que a cuarto orden en el potencial los valores esperados de las cantidades  $t$ ,  $r$ ,  $T$ , y  $R$  se escriben de la siguiente manera:

$$\langle t \rangle_{k,\ell,L} = 1 + \langle (t)_2 \rangle_{k,\ell,L} + \langle (t)_4 \rangle_{k,\ell,L} + \cdots, \quad (7.18a)$$

$$\langle T \rangle_{k,\ell,L} = 1 + \langle (T)_2 \rangle_{k,\ell,L} + \langle (T)_4 \rangle_{k,\ell,L} + \cdots, \quad (7.18b)$$

$$\langle r \rangle_{k,\ell,L} = \langle (r)_2 \rangle_{k,\ell,L} + \langle (r)_4 \rangle_{k,\ell,L} + \cdots, \quad (7.18c)$$

$$\langle R \rangle_{k,\ell,L} = \langle (R)_2 \rangle_{k,\ell,L} + \langle (R)_4 \rangle_{k,\ell,L} + \cdots. \quad (7.18d)$$

### 7.3.1. Valor esperado de la amplitud de transmisión: $\langle t \rangle_{k,L}$

El valor esperado  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$  es el ejemplo que estudiaremos con el mayor detalle posible, ya que nos permitirá exhibir la manera en que se aplica la serie de Born y los resultados que podemos obtener de ésta; además, el resultado que obtendremos para  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$  con el método de la serie de Born se podrá comparar con el resultado analítico que obtuvimos al resolver la ecuación de difusión en límite de longitud de onda corta ( $k\ell \gg 1$ ): ver ecuación (5.27).

Como ya hemos mencionado, obtener el valor esperado de la serie de Born más allá del cuarto orden en el potencial es muy complicado; sin embargo, sólo en el caso unidimensional y para  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$ , obtendremos el valor esperado del sexto orden en el potencial, ya que esto nos permitirá dar una mejor interpretación al resultado que obtendremos mediante la serie de Born.

Para calcular el valor esperado de los diferentes órdenes de la amplitud de transmisión de la serie de Born utilizaremos la versión unidimensional de las expresiones (2.152a)-(2.152d), junto con la versión unidimensional del modelo estadístico del potencial, Ec (7.17). Al hacer lo anterior obtenemos las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \langle (t)_2 \rangle_{k,\ell,L} &= (-i)^2 \int \varphi_-(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \varphi_+(k; x_2) \times \\ &\quad \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \rangle dx_1 dx_2, \end{aligned} \quad (7.19a)$$

$$\begin{aligned} \langle (t)_4 \rangle_{k,\ell,L} &= (-i)^4 \int \varphi_-(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \tilde{g}_0(k; x_2 - x_3) \tilde{g}_0(k; x_3 - x_4) \varphi_+(k; x_4) \times \\ &\quad \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \mathcal{V}(x_4) \rangle dx_1 dx_2 dx_3 dx_4; \end{aligned} \quad (7.19b)$$

$$\begin{aligned} \langle (t)_6 \rangle_{k,\ell,L} &= (-i)^6 \int \varphi_-(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \tilde{g}_0(k; x_2 - x_3) \tilde{g}_0(k; x_3 - x_4) \times \\ &\quad \tilde{g}_0(k; x_4 - x_5) \tilde{g}_0(k; x_5 - x_6) \varphi_+(k; x_6) \times \\ &\quad \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \mathcal{V}(x_4) \mathcal{V}(x_5) \mathcal{V}(x_6) \rangle dx_1 dx_2 dx_3 dx_4; \end{aligned} \quad (7.19c)$$

Los detalles del cálculo de las expresiones de (7.19) se muestran en el Apéndice C, de tal manera que aquí sólo escribiremos los resultados, siendo éstos:

$$\langle (t)_2 \rangle_{k,\ell,L} = -\frac{1}{1!} \frac{L}{\ell}, \quad (7.20a)$$

$$\langle (t)_4 \rangle_{k,\ell,L} = \frac{1}{\ell^2} \left[ \frac{L^2}{2!} + i \frac{9L}{4k} + \frac{1}{k^2} \left( \frac{17}{16} - e^{2ikL} - \frac{1}{16} e^{4ikL} \right) \right]. \quad (7.20b)$$

$$\begin{aligned} \langle (t)_6 \rangle_{k,\ell,L} &= \frac{1}{\ell^3} \left[ -\frac{L^3}{3!} - i \frac{17L^2}{8k} + \frac{L}{k^2} \left( \frac{165}{16} + 7e^{2ikL} + \frac{9}{8} e^{4ikL} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{k^3} \left( \frac{41}{4} (1 - e^{2ikL}) - \frac{33}{64} (1 - e^{4ikL}) \right) \right]; \end{aligned} \quad (7.20c)$$

por lo tanto, hasta sexto orden en la serie de Born el valor esperado de la amplitud de transmisión se escribe de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\langle t \rangle_{k,\ell,L} = & 1 - \frac{1}{\ell} \frac{L}{1!} + \frac{1}{\ell^2} \left[ \frac{L^2}{2!} + i \frac{9}{4} \frac{L}{k} + \frac{1}{k^2} \left( \frac{17}{16} - e^{2ikL} - \frac{1}{16} e^{4ikL} \right) \right] \\
& + \frac{1}{\ell^3} \left[ -\frac{L^3}{3!} - i \frac{17}{8} \frac{L^2}{k} + \frac{L}{k^2} \left( \frac{165}{16} + 7e^{2ikL} + \frac{9}{8} e^{4ikL} \right) \right. \\
& \left. - \frac{i}{k^3} \left( \frac{41}{4} (1 - e^{2ikL}) - \frac{33}{64} (1 - e^{4ikL}) \right) \right] + O\left(\frac{1}{\ell^4}\right). \tag{7.21}
\end{aligned}$$

La ecuación (7.21) expresa a  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$  como una serie de potencias inversas en camino libre medio  $\ell$ , es decir, como una serie de potencias en la interacción. Cada una de las potencias inversas del camino libre medio  $\ell$  multiplica a una *suma finita* de términos que dependen del número de onda  $k$  y de la longitud  $L$ .

Una vez que tenemos la dependencia explícita la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$  hasta sexto orden, Ec. (7.21), podemos preguntarnos bajo que circunstancias esta serie de Born es una buena aproximación de dicho valor esperado? Para responder esta pregunta debemos recordar que nuestro interés en describir la evolución con la longitud  $L$  del valor esperado  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$ , manteniendo fijos el camino libre medio  $\ell$  y el número de onda  $k$ . Por esta razón denotaremos a  $\langle t \rangle_{k,L}$  como una función de  $L/\ell$  con parámetro  $k\ell$  fijo. Tomando en cuenta lo anterior reescribimos la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,\ell,L}$ , Ec. (7.21), de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\langle t \rangle_{k\ell,L/\ell} = & \left( 1 - \left(\frac{L}{\ell}\right) + \frac{1}{2!} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2 - \frac{1}{3!} \left(\frac{L}{\ell}\right)^3 + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^4 \right) \\
& + \frac{i}{k\ell} \left( \frac{9}{4} \left(\frac{L}{\ell}\right) - \frac{17}{8} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2 + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^3 \right) \\
& + \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ \left( \frac{17}{16} + \frac{165}{16} \left(\frac{L}{\ell}\right) + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \right) \right. \\
& \quad \left. - \left( 1 - 7 \left(\frac{L}{\ell}\right) + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \right) e^{2ikL} \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{16} \left( 1 - 18 \left(\frac{L}{\ell}\right) + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \right) e^{4ikL} \right] \\
& - \frac{i}{(k\ell)^3} \left[ \left( \frac{623}{64} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) \right. \\
& \quad \left. - \left( \frac{41}{4} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) e^{2ikL} \right. \\
& \quad \left. + \left( \frac{33}{64} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) e^{4ikL} \right] \\
& + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^4, \tag{7.22}
\end{aligned}$$

Si en la ecuación (7.22) comparamos el orden  $1/(k\ell)$  con el orden  $1/(k\ell)^2$  nos damos cuenta que los factores numéricos de las potencias de  $L/\ell$  del orden  $1/(k\ell)^2$  son grandes comparados con los correspondientes factores del orden  $1/(k\ell)$ . Esta misma tendencia la observamos al comparar el orden  $1/(k\ell)^2$  con el orden  $1/(k\ell)^3$ ; por lo tanto, para que la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$  represente una buena aproximación se necesita que de manera simultánea se cumplan las siguientes condiciones:

$$L/\ell \ll 1 \quad (7.23a)$$

$$k\ell \gg 1 \quad (7.23b)$$

Las expresiones de la ecuación (7.23) nos dicen que el valor esperado de la serie de Born de la amplitud de transmisión, Ec. (7.21), es una buena aproximación en el *régimen balístico*, Ec. (7.23a), y en la *aproximación de longitud de onda corta*, Ec. (7.23b).

Analicemos la estructura de la ecuación (7.22). Si bien la ecuación (7.22) es idéntica a la ecuación (7.21), no es la forma natural de escribir la serie de Born ya que la serie de Born es un desarrollo en potencias inversas en el camino libre medio, Ec. (7.21), mientras que la ecuación (7.22) es un desarrollo *doble*, ya que expresa a  $\langle t \rangle_{k\ell, L/\ell}$  como un desarrollo en potencias inversas del parámetro  $k\ell$  donde cada una de las potencias de  $1/k\ell$  multiplica a una o varias series en potencias de  $L/\ell$ , que a su vez pueden tener como factor a una exponencial compleja con argumento  $0ikL$ ,  $2ikL$  o  $4ikL$ . Los diferentes órdenes del desarrollo en  $1/k\ell$  se construyen al extraer ciertos términos específicos de cada orden en la serie de Born: por ejemplo, el orden  $1/(k\ell)^0$  [primer renglón de la ecuación (7.22)] tiene las contribuciones

$$1, \quad -\frac{1}{1!} \frac{L}{\ell}, \quad \frac{1}{2!} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2, \quad -\frac{1}{3!} \left(\frac{L}{\ell}\right)^3, \quad (7.24a)$$

que corresponden a orden cero, orden dos, orden cuatro y orden seis en la serie de Born, respectivamente; análogamente, el orden  $1/(k\ell)^1$  tiene las contribuciones

$$i\frac{9}{4} \left(\frac{L}{\ell}\right), \quad -i\frac{17}{8} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2, \quad (7.24b)$$

que corresponden a orden cuatro y orden seis en la serie de Born, respectivamente.

En conclusión las series de potencias en  $L/\ell$  que aparecen en la ecuación (7.22) se construyen a partir de la serie de Born seleccionando de cada orden de ésta, las contribuciones a los diferentes órdenes en potencias de  $1/k\ell$ . La manera en que escribimos la serie de  $\langle t \rangle_{k,L}$  en la ecuación (7.22) tiene la estructura que propusimos en el Apéndice F de la referencia [42] para los valores esperados del caso unidimensional en el límite de longitud de onda corta no idealizado:  $k\ell \gg 1$ . Dicha estructura la discutiremos más adelante.

### El término dominante de $\langle t \rangle_{k,L}$

Como ya hemos mencionado, la razón por la que estamos presentando con todo detalle el método de la serie de Born para  $\langle t \rangle_{k,L}$  se debe a que en este caso particular podemos extraer mucha información a través de la serie de Born.

Consideremos el primer renglón de la ecuación (7.22). La serie en potencias de  $L/\ell$  que aparece en dicho renglón difiere notablemente de las otras series: no está multiplicada por ninguna función que dependa del número de onda  $k$  ni por una potencia inversa de  $k\ell$ , es decir, sólo depende de  $L/\ell$ ; además, los factores de las potencias de la variable  $L/\ell$  nos hacen pensar que se trata de una serie convergente bien conocida, la serie de la exponencial decreciente  $e^{-L/\ell}$ . Para mostrar que esta sospecha es cierta consideremos el valor esperado de la serie completa de la amplitud de transmisión:

$$\langle t \rangle_{k\ell, L/\ell} = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} (-i)^{2p} \int_0^L \cdots \int_0^L \varphi_-(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \cdots \tilde{g}_0(k; x_{2p-1} - x_{2p}) \varphi_+(k; x_{2p}) \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \cdots \mathcal{V}(x_{2p-1}) \mathcal{V}(x_{2p}) \rangle dx_1 \cdots dx_{2p}. \quad (7.25)$$

El momento de orden  $2p$  en el potencial  $\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \cdots \mathcal{V}(x_{2p}) \rangle$  tiene  $(2p-1)!!$  términos, cada uno de los cuales es el producto de  $p$  deltas de Dirac, es decir:

$$\langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \cdots \mathcal{V}(x_{2p-1}) \mathcal{V}(x_{2p}) \rangle = \frac{1}{\ell^p} \left[ \delta(x_1 - x_2) \delta(x_3 - x_4) \delta(x_5 - x_6) \cdots \delta(x_{2p-3} - x_{2p-2}) \delta(x_{2p-1} - x_{2p}) + \text{todas las combinaciones} \right]. \quad (7.26)$$

Al introducir la ecuación (7.26) en la ecuación (7.25) obtenemos la serie de  $\langle t \rangle_{k\ell, L/\ell}$ , siendo ésta:

$$\langle t \rangle_{k\ell, L/\ell} = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{\ell^p} \left[ \int_0^L \cdots \int_0^L \varphi_-(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \cdots \tilde{g}_0(k; x_{p-1} - x_p) \varphi_+(k; x_p) dx_1 \cdots dx_p + \cdots \right]. \quad (7.27)$$

Los puntos suspensivos que aparecen después del símbolo  $+$  en el segundo renglón de la ecuación (7.27) quieren decir que hay más integrales como la que escribimos explícitamente en el primer renglón, las cuales provienen de evaluar los productos de deltas de Dirac que agrupamos en la frase “todas las combinaciones” de la ecuación (7.26).

No es casualidad que hayamos escrito de manera explícita la integral que aparece en el primer renglón de la ecuación (7.27), ya que ésta dará el  $p$ -ésimo término de la serie que estamos buscando. Debido a que las funciones de Green  $\tilde{g}_0(k; x - x')$  dependen del valor absoluto  $|x - x'|$ , la integral en cuestión se rompe en varias integrales, cada una de las cuales se realiza en una región diferente dependiendo de las relaciones que haya entre todas las  $x_i$ 's del integrando. Una de esas regiones es aquella en la que las  $x_i$ 's cumplen la relación:  $x_1 > x_2 > x_3 > \cdots > x_{p-1} > x_p$ . La integral sobre esa región es la siguiente:

$$\begin{aligned} & \int_0^L \int_0^{x_1} \cdots \int_0^{x_{p-1}} e^{-ikx_1} e^{ik(x_1-x_2)} e^{ik(x_2-x_3)} \cdots e^{ik(x_{p-2}-x_{p-1})} e^{ik(x_{p-1}-x_p)} e^{ikx_p} dx_1 \cdots dx_p \\ &= \int_0^L \int_0^{x_1} \cdots \int_0^{x_{p-1}} dx_1 \cdots dx_p = \frac{1}{p!} L^p, \end{aligned} \quad (7.28)$$

cuyo valor *no depende* de  $k$  ni está multiplicado por alguna potencia inversa de  $k\ell$ ; por lo tanto, este tipo de contribuciones deben agruparse en el primer renglón de la ecuación (7.22). Las demás contribuciones de la integral del primer renglón de la ecuación (7.27) y todas las contribuciones de las integrales que indicamos con los puntos suspensivos

del segundo renglón de la misma ecuación, dependerán en potencias inversas de  $k\ell$ , las cuales multiplicarán a potencias de  $L/\ell$  y posiblemente a exponenciales complejas con argumentos  $2ikL$  y  $4ikL$  tal como se muestra en la ecuación (7.22). Utilizando este último argumento, las ecuaciones (7.27) y (7.28) y el hecho de que la serie de la exponencial decreciente  $e^{-L/\ell}$  es:

$$e^{-L/\ell} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p!} \left(\frac{L}{\ell}\right)^p, \quad (7.29)$$

obtenemos que la serie de Born predice que  $\langle t \rangle_{k,L}$  tiene la siguiente estructura general

$$\langle t \rangle_{k\ell, L/\ell} = e^{-L/\ell} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \langle t \rangle_{k,L}^{(p)}. \quad (7.30)$$

En la ecuación (7.30) hemos agrupado en la serie de  $e^{-L/\ell}$  todos los términos de orden  $1/(k\ell)^0$ , Ec. (7.28), los cuales se genera a diferente orden en la serie de Born. Por otro lado, en las cantidades  $\langle t \rangle_{k,L}^{(p)}$  hemos “agrupado” todos los términos de orden  $1/(k\ell)^p$  con  $p \geq 1$ , los cuales se generan a diferentes órdenes en la serie de Born; sin embargo, a diferencia del orden  $1/(k\ell)^0$  no conocemos toda la dependencia de las cantidades  $\langle t \rangle_{k,L}^{(p)}$ , pero sí podemos inferir que la estructura de las cantidades  $\langle t \rangle_{k,L}^{(p)}$  es una o varias series de potencias en la variable  $L/\ell$  las cuales pueden estar multiplicadas por exponenciales complejas: ver ecuación (7.22).

En conclusión, para el caso particular de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , pudimos identificar y sumar las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^0$  que se generan a todo orden en la serie de Born reproduciendo así el conocido comportamiento exponencial [18] para este valor esperado;

Cuando comparemos el resultado teórico de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.30), con el resultado numérico para el mismo valor esperado, Fig. 7.1, veremos que el *término dominante* de la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , en el régimen  $k\ell \gg 1$ , es la exponencial decreciente  $e^{-L/\ell}$ , siendo las demás contribuciones correcciones de orden superior en potencias inversas de  $k\ell$ .

### Comportamiento de $\langle t \rangle_{k,L}$ en el límite idealizado de longitud de onda corta:

$k\ell \rightarrow \infty$

De las ecuaciones (7.21) y (7.22) se observa que a partir de la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , que es una serie de potencias inversas en el camino libre medio, se puede construir una serie en potencias inversas de  $1/(k\ell)$  como se abrevia en la ecuación (7.30). La estructura que se muestra en la ecuación (7.30) coincide con la estructura general que supusimos para los valores esperados en el caso unidimensional y en límite de longitud de onda corta (SWLA)  $k\ell \gg 1$  (ver Apéndice F de la referencia [42]). En el caso particular de  $\langle t \rangle_{k,L}$  dicha estructura es la siguiente:

$$\langle t \rangle_{k,L} = \langle t \rangle_L^{(0)} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle t \rangle_{m, L/\ell}^{(p)} e^{imk\ell \frac{L}{\ell}}. \quad (7.31a)$$

donde las cantidades  $\langle t \rangle_L^{(0)}$  y  $\langle t \rangle_{m, L/\ell}^{(p)}$  dependen de  $L/\ell$ , pero no de  $k\ell$ , por lo que al hacer las siguientes identificaciones

$$\langle t \rangle_L^{(0)} = e^{-L/\ell}, \quad (7.31b)$$

$$\langle t \rangle_{k,L}^{(p)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle t \rangle_{m,L/\ell}^{(p)} e^{imk\ell \frac{L}{\ell}}, \quad p \geq 1, \quad (7.31c)$$

podemos expresar las cantidades  $\langle t \rangle_{k,L}^{(p)}$  que introdujimos en la ecuación (7.30) en términos de las cantidades  $\langle t \rangle_{m,L/\ell}^{(p)}$ .

Si bien en la ecuación (7.22) sólo tenemos los primeros términos de las cantidades  $\langle t \rangle_L^{(0)}$  y  $\langle t \rangle_{m,L/\ell}^{(p)}$ , esta ecuación junto con la expresión del término dominante, Ec. (7.29), nos dejan ver que  $\langle t \rangle_{k,L}$  sí satisface la estructura propuesta en la ecuación (7.31), ya que podemos hacer las siguientes identificaciones:

- A orden  $1/(k\ell)^0$  tenemos toda la serie, por lo que:

$$\langle t \rangle_L^{(0)} = \left( 1 - \frac{1}{1!} \frac{L}{\ell} + \frac{1}{2!} \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 - \frac{1}{3!} \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^4 \right) = e^{-L/\ell}. \quad (7.32a)$$

- A orden  $1/(k\ell)^1$ :

$$\langle t \rangle_{0,L/\ell}^{(1)} = i \left( \frac{9}{4} \left( \frac{L}{\ell} \right) - \frac{17}{8} \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right). \quad (7.32b)$$

- A orden  $1/(k\ell)^2$ :

$$\langle t \rangle_{0,L/\ell}^{(2)} = \left( \frac{17}{16} + \frac{165}{16} \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right), \quad (7.32c)$$

$$\langle t \rangle_{2,L/\ell}^{(2)} = - \left( 1 - 7 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right), \quad \langle t \rangle_{-2,L/\ell}^{(2)} = 0, \quad (7.32d)$$

$$\langle t \rangle_{4,L/\ell}^{(2)} = - \frac{1}{16} \left( 1 - 18 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right). \quad \langle t \rangle_{-4,L/\ell}^{(2)} = 0. \quad (7.32e)$$

- A orden  $1/(k\ell)^3$ :

$$\langle t \rangle_{0,L/\ell}^{(3)} = -i \left( \frac{623}{64} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right), \quad (7.32f)$$

$$\langle t \rangle_{2,L/\ell}^{(3)} = i \left( \frac{41}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right), \quad \langle t \rangle_{-2,L/\ell}^{(3)} = 0, \quad (7.32g)$$

$$\langle t \rangle_{4,L/\ell}^{(3)} = -i \left( \frac{33}{64} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right). \quad \langle t \rangle_{-4,L/\ell}^{(3)} = 0. \quad (7.32h)$$

Para el caso particular de la contribución de orden  $(k\ell)^0$ , Ec. (7.32a), fuimos capaces de obtener todo el desarrollo en serie de potencias de la variable  $L/\ell$  obteniendo así la serie de la exponencial decreciente  $e^{-L/\ell}$ , la cual converge para todo valor de  $L/\ell$ . Por otro lado, de los pocos términos con los que contamos para las contribuciones de orden superior en potencias de  $1/k\ell$ , Ecs. (7.32b)-(7.32e), vemos que los factores de las potencias de  $L/\ell$  muestran una tendencia a disminuir muy lentamente, Ec. (7.32b), o a aumentar muy rápidamente, Ec. (7.32c), lo cual nos hace pensar que dichas series ¡pueden ser divergentes! Como mostraremos en la siguiente sección, la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$  generará *series asintóticas* (ver Apéndice D) para los diferentes ordenes en  $1/k\ell$  excepto el orden  $1/(k\ell)^0$ .

La cantidad  $\langle t \rangle_L^{(0)}$  de la ecuación (7.31a) tiene una gran relevancia, ya que ésta es la solución de la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta (SWLA) en el caso unidimensional: ver ecuación (5.27). La ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta  $k\ell \gg 1$ , Ec. (4.56), da la evolución con la longitud  $L$  de la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  despreciando las contribuciones de orden superior en potencias inversas de  $1/k\ell$ , ya que para obtener dicha ecuación de difusión se tomó el límite idealizado  $k\ell \rightarrow \infty$ ; por lo tanto, el único término que contribuye al valor esperado de una observable en el límite de longitud de onda corta es el de orden  $1/(k\ell)^0$ . Si tomamos el límite de longitud de onda corta  $k\ell \rightarrow \infty$  el en caso particular de  $\langle t \rangle_L$ , Ec. (7.31a), obtenemos:

$$\lim_{k\ell \rightarrow \infty} \langle t \rangle_{k,L} \rightarrow \langle t \rangle_L^{(0)} = e^{-L/\ell}. \quad (7.33)$$

En este límite de longitud de onda corta consideramos que  $k\ell \rightarrow \infty$  pero manteniendo fijo el camino libre medio, es decir,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\langle (u_r)^2 \rangle}{4k^2 d} = \frac{\langle (v_r)^2 \rangle}{d} = \frac{1}{\ell} = \text{fijo}, \quad (7.34)$$

que quiere decir que la distribución de los potenciales delta, Ec. (3.10), debe ser tal que el segundo momento de las cantidades  $\langle (u_r)^2 \rangle$  crezca tan rápido como lo hace  $k^2$ , logrando así que el segundo momento de las cantidades  $\langle (v_r)^2 \rangle$ , Ec. (3.15), siga escalando como  $d$ . De esta manera conseguimos que en el límite denso de dispersión débil, Ec. (7.5), el camino libre medio se mantenga fijo.

El resultado de la ecuación (7.33) coincide con el resultado que obtuvimos al resolver la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta, Ec. (5.27), que a su vez obtuvieron Mello y Tomsovic [18] con una ecuación de difusión que, salvo los coeficientes de correlación, Ec. (4.17), es idéntica a la ecuación (4.56). En conclusión, mediante dos métodos independientes, la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta por un lado y la serie de Born por el otro, pudimos obtener el mismo resultado para  $\langle t \rangle_L^{(0)}$ .

### Comparación de la serie de Born de $\langle t \rangle_{k,L}$ con la simulación numérica

En esta sección compararemos el valor esperado de la serie de Born de la amplitud de transmisión que obtuvimos en las secciones previas con el valor esperado de una simulación numérica basada en la versión unidimensional del potencial cuasi-unidimensional

definido en la ecuación (3.13). Dicha comparación la haremos para un valor finito del parámetro  $k\ell$ , pero mucho mayor que uno.

Utilizando la contribución de orden  $(k\ell)^0$  de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.32a), junto con los términos que conocemos de los órdenes  $1/(k\ell)^1$ ,  $1/(k\ell)^2$  y  $1/(k\ell)^3$ , Ec. (7.22), podemos expresar la parte real e imaginaria de  $\langle t \rangle_{k,L}$ . Para la parte real obtenemos

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \langle t \rangle_{k,L} &= e^{-L/\ell} & (7.35a) \\ &+ \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ \left( \frac{17}{16} + \frac{165}{16} \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) - \left( 1 - 7 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \cos 2kL \right. \\ &- \left. \frac{1}{16} \left( 1 - 18 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \cos 4kL \right] \\ &+ \frac{1}{(k\ell)^3} \left[ - \left( \frac{41}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \sin 2kL + \left( \frac{33}{64} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \sin 4kL \right] \\ &+ O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^4, \end{aligned}$$

mientras que para la parte imaginaria

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \langle t \rangle_{k,L} &= \frac{1}{k\ell} \left[ \left( \frac{9}{4} \left( \frac{L}{\ell} \right) - \frac{17}{8} \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right) \right] & (7.35b) \\ &+ \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ - \left( 1 - 7 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \sin 2kL - \frac{1}{16} \left( 1 - 18 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \sin 4kL \right] \\ &+ \frac{1}{(k\ell)^3} \left[ - \left( \frac{623}{64} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) + \left( \frac{41}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \cos 2kL - \left( \frac{33}{64} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \cos 4kL \right] \\ &+ O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^4. \end{aligned}$$

Para poder comparar los resultados numéricos con las expresiones que obtuvimos a partir de la serie de Born, Ec (7.35), debemos cumplir las condiciones de la ecuación (7.23), por lo que el programa se ejecutó tomando  $k\ell = 100$ .

**Parte real del valor esperado de  $\langle t \rangle_{k,L}$ .** Como ya habíamos anticipado en la ecuación (7.30), el término dominante de la parte real de  $\langle t \rangle_{k,L}$  es la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ , es decir,  $\langle t \rangle_{k,L}^{(0)} = e^{-L/\ell}$ . Por esta razón en la figura 7.1 comparamos el término dominante  $\langle t \rangle_{k,L}^{(0)}$  con la parte real del valor esperado de la amplitud de transmisión que obtuvimos de la simulación numérica. De la figura 7.1 observamos lo siguiente:

- El término dominante  $\langle t \rangle_{k,L}^{(0)}$  y la simulación numérica son indistinguibles en todo el intervalo  $L/\ell \in [0, 2.5]$ , no sólo para valores pequeños del cociente  $L/\ell$ . Lo anterior se debe a que la serie de  $e^{-L/\ell}$  converge para todo valor de  $L/\ell$  no sólo para valores pequeños de esta cantidad.

- También observamos que la dependencia oscilatoria que predice la serie de Born (para valores  $L/\ell \ll 1$ ), Ec. (7.35a), es imperceptible. Lo anterior se debe a que las contribuciones oscilatorias más importantes de la ecuación (7.35a) son inversamente proporcionales a  $1/(k\ell)^2$ , por lo que son 4 órdenes de magnitud más pequeños que la contribución de la exponencial  $e^{-L/\ell}$ , ya que  $k\ell = 100$ .

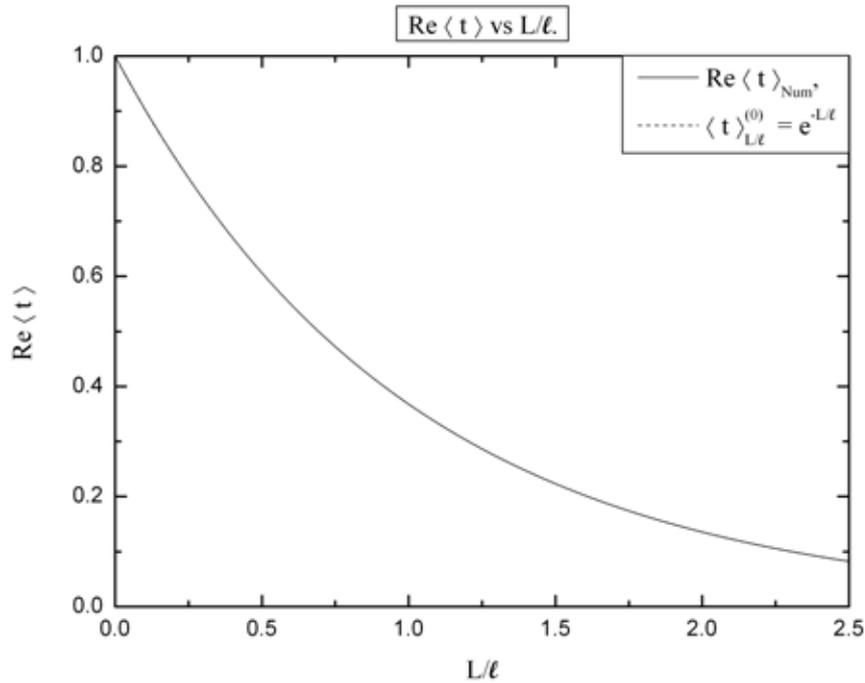


Figura 7.1:  $\text{Re}\langle t \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) es indistinguible del resultado teórico del término dominante  $\langle t \rangle_L^{(0)} = e^{-L/\ell}$  (curva de segmentos) para todo valor de  $L/\ell$ . Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

Para averiguar si las contribuciones oscilatorias que predice la serie de Born, Ec. (7.35a), realmente se manifiestan en el cálculo numérico, al valor esperado del cálculo numérico le restaremos la exponencial  $e^{-L/\ell}$  y la comparemos con su análogo teórico, es decir, con:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re} \langle t \rangle_{k,L} - e^{-L/\ell} &= \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ \left( \frac{17}{16} + \frac{165}{16} \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - \left( 1 - 7 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \cos 2kL - \frac{1}{16} \left( 1 - 18 \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \cos 4kL \right] \\
&\quad + \frac{1}{(k\ell)^3} \left[ - \left( \frac{41}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \sin 2kL + \left( \frac{33}{64} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \sin 4kL \right] \\
&\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^4.
\end{aligned} \tag{7.36}$$

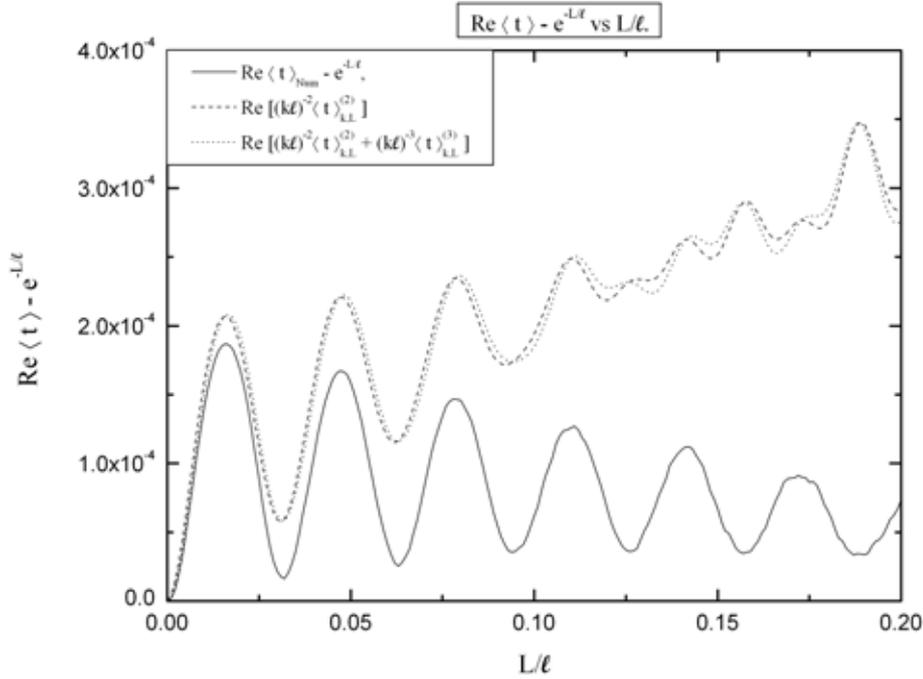


Figura 7.2:  $\operatorname{Re} \langle t \rangle - e^{-L/\ell}$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $\operatorname{Re} \left[ (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de segmentos) y  $\operatorname{Re} \left[ (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} + (k\ell)^{-3} \langle t \rangle_{k,L}^{(3)} \right]$  (curva de puntos) sólo muestran un acuerdo muy cerca del origen. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

La comparación entre la curva numérica y la teórica, Ec. (7.36), se muestra en la figura 7.2, donde observamos lo siguiente

- La curva teórica y la numérica sólo muestran un acuerdo cuantitativo al inicio de la gráfica (aproximadamente para  $0 < L/\ell < 0.01$ ).

- Al ver la figura 7.2 podemos pensar que para obtener un mejor acuerdo entre ambas curvas necesitamos calcular la contribución de octavo orden! de la serie de Born y de ésta extraer los términos del estilo

$$\frac{1}{(k\ell)^2} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2, \quad \frac{1}{(k\ell)^2} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \cos 2kL, \quad \frac{1}{(k\ell)^2} \left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \cos 4kL, \quad (7.37)$$

los cuales contribuirían en el primer renglón de la ecuación (7.36); sin embargo, también podemos pensar que la figura 7.2 es una manifestación del *comportamiento asintótico* de la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , el cual discutiremos más adelante.

- No obstante que en la figura 7.2 no vemos un buen acuerdo cuantitativo entre la curva teórica y la curva numérica, sí vemos un buen acuerdo cualitativo, ya que los máximos y mínimos de las oscilaciones que presentan ambas curvas suceden aproximadamente en los mismos puntos.
- Por último, en la figura 7.2 observamos que las últimas oscilaciones de la curva numérica que se aprecian comienzan a presentar un comportamiento que ya no es suave como las primeras oscilaciones, esto es una manifestación debida a las fluctuaciones del cálculo numérico. Dichas fluctuaciones las observamos de mejor manera en la figura 7.3, en la cual sólo graficamos la curva numérica en un intervalo más grande.

De las figuras 7.1, 7.2 y 7.3 podemos concluir lo siguiente:

- En el límite  $k\ell \gg 1$  la diferencia entre el resultado de la simulación numérica  $Re \langle t \rangle_{Num}$  y el término dominante  $\langle t \rangle_L^{(0)}$  sólo es perceptible cerca del origen, ya que al alejarnos del origen dicha diferencia da las fluctuaciones del cálculo numérico.
- La diferencia entre  $Re \langle t \rangle_{Num}$  y  $\langle t \rangle_L^{(0)}$  tiene el comportamiento cualitativo que predice la serie de Born, Ec. (7.36).

**Parte imaginaria del valor esperado de  $\langle t \rangle_{k,L}$ .** La ecuación (7.35b) muestra los primeros términos de las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^1$ ,  $1/(k\ell)^2$  y  $1/(k\ell)^3$  que pudimos obtener para la parte imaginaria de  $\langle t \rangle_{k,L}$ . A diferencia de la parte real de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , la contribución dominante de la parte imaginaria es de orden  $1/(k\ell)^1$  siendo nula la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ . Además, para la parte imaginaria sólo conocemos los primeros términos de la contribución dominante. En la figura 7.4 comparamos el resultado teórico de la ecuación (7.35b) con la parte imaginaria de la amplitud de transmisión que obtuvimos de la simulación numérica, de la cual observamos lo siguiente:

- Las tres curvas teóricas y la numérica muestran un muy buen acuerdo desde el origen hasta valores de  $L/\ell \sim 0.3$ , de tal manera que para esos valores de  $L/\ell$  la ecuación (7.35b) es una buena aproximación para  $Im \langle t \rangle_{k,L}$ .
- Por otro lado, las curvas teóricas difieren notablemente de la curva numérica si  $L/\ell > 0.3$  siendo malas aproximaciones para esos valores de  $L/\ell$ .

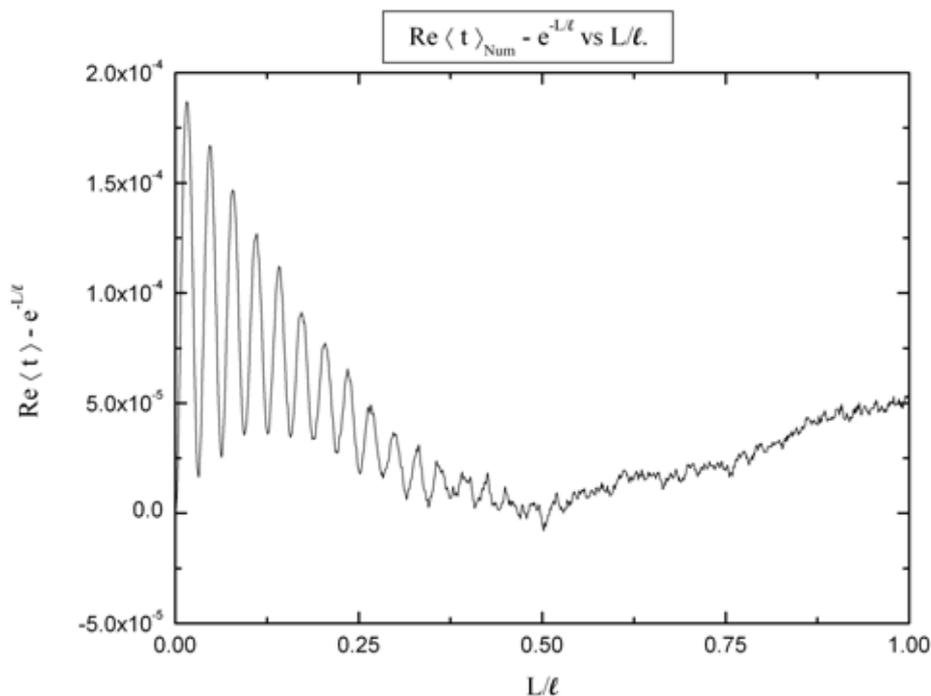


Figura 7.3:  $Re \langle t \rangle_{Num} - e^{-L/\ell}$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) muestra las fluctuaciones del cálculo numérico de la cantidad  $Re \langle t \rangle_{Num} - e^{-L/\ell}$ , las cuales a partir de  $L/\ell \sim 0.3$  dominan el comportamiento de la curva. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

- En la región de la figura 7.4 en la que las curvas teóricas son buenas aproximaciones para  $Im \langle t \rangle_{k,L}$  no podemos identificar cual de éstas representa una mejor aproximación.
- La curva que contiene las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^1$  y  $1/(k\ell)^2$  al igual que la curva que contiene las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^1$ ,  $1/(k\ell)^2$  y  $1/(k\ell)^3$  oscilan alrededor de la curva que sólo tiene la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$ . Lo anterior se debe a que la curva que sólo contiene la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$  no tiene funciones trigonométricas, mientras que las otras dos sí.

Para saber cual de las tres curvas teóricas de la figura 7.4 es una mejor aproximación a la curva numérica, en la figura 7.5 mostramos una ampliación de la región  $L/\ell \in [0, 0.3]$  de la figura 7.4 donde observamos lo siguiente:

- La curva teórica que sólo contiene la contribución de orden  $(k\ell)^1$  es la curva que menos se parece a la curva numérica, ya que ésta no tiene funciones trigonométricas que puedan reproducir las pequeñas oscilaciones que la curva numérica tiene cerca del origen; sin embargo, esta curva teórica no es una mala aproximación de la curva numérica cerca del origen.

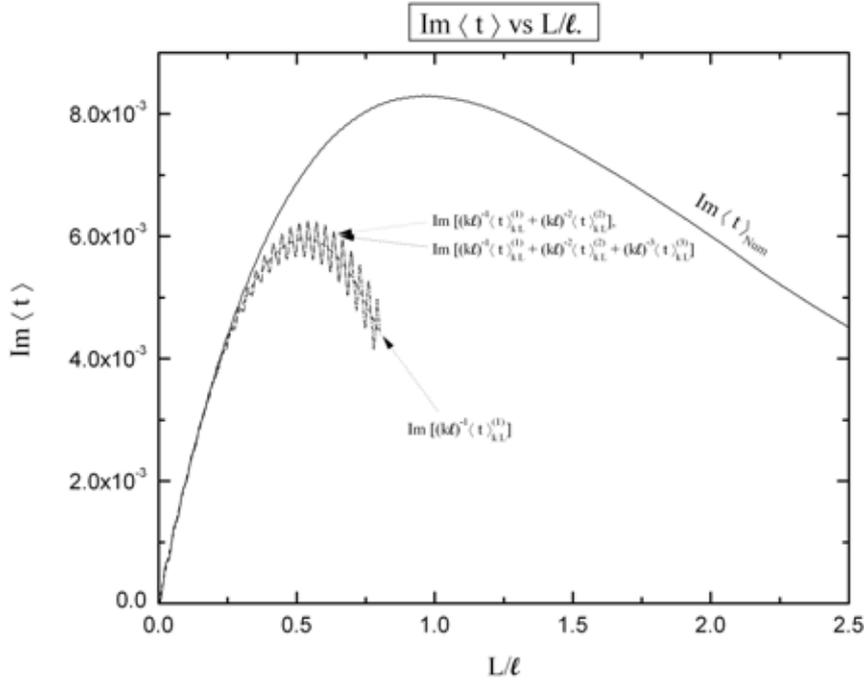


Figura 7.4:  $Im \langle t \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos),  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) y  $Im \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} + (k\ell)^{-3} \langle t \rangle_{k,L}^{(3)} \right]$  (curva de segmentos y de puntos) muestran un muy buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

- La segunda curva teórica, la cual contiene las contribuciones de orden  $(k\ell)^1$  y de orden  $(k\ell)^2$ , es una excelente aproximación a la curva numérica, ya que al inicio de la gráfica se encima ésta última.
- Al añadir la contribución de orden  $1/(k\ell)^2$  a la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$  se obtienen las oscilaciones alrededor de la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$  de tal manera que la suma de ambas contribuciones nos da la segunda curva de la figura 7.5 que cerca del origen se encima a la curva numérica; por lo tanto, para obtener una buena aproximación de  $Im \langle t \rangle_{k,L}$  necesitamos la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$  y la primera corrección de orden  $1/(k\ell)^2$ .
- Debido a que  $k\ell = 100$  la contribución de orden  $1/(k\ell)^3$  da correcciones que son cuatro ordenes de magnitud menores que la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$  y dos ordenes de magnitud menor que la contribución de orden  $1/(k\ell)^2$ , por lo que en la figura no se aprecia diferencia entre la segunda y la tercera curva. Lo anterior nos deja ver que para aproximar la curva numérica  $Im \langle t \rangle_{Num}$  es suficiente conocer la contribución de orden  $1/(k\ell)^1$  y la corrección de orden  $1/(k\ell)^2$ .

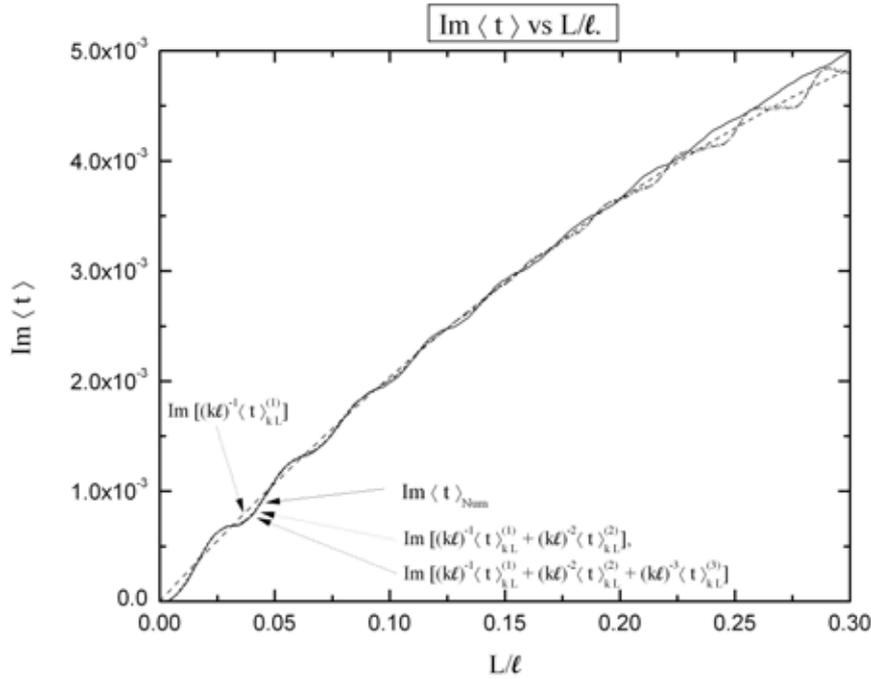


Figura 7.5:  $\text{Im} \langle t \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos),  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) e  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle t \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle t \rangle_{k,L}^{(2)} + (k\ell)^{-3} \langle t \rangle_{k,L}^{(3)} \right]$  (curva de segmentos y de puntos) muestran un muy buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

Como mostramos en la ecuación (7.32e), todas las contribuciones de orden  $(1/k\ell)^0$  de  $\langle t \rangle_{k,L}$  generan la serie del término dominante  $\langle t \rangle_L^{(0)} = e^{-L/\ell}$ , por lo que la parte imaginaria de  $\langle t \rangle_{k,L}$  no tiene contribuciones de orden  $(1/k\ell)^0$ . Lo anterior es consistente con el resultado obtenido mediante la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta, Ec (5.27), la cual predice que el valor esperado de la contribución de orden  $(1/k\ell)^0$  es puramente real; por lo tanto, la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda no puede darnos el comportamiento de la parte imaginaria de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , lo cual si pudimos hacer mediante la serie de Born obteniendo un buen acuerdo en el régimen balístico y para  $k\ell \gg 1$  grandes pero finitos.

### Discusión de la convergencia de la serie de Born de $\langle t \rangle_{k,L}$ : el límite idealizado de bajas energías: $k\ell \rightarrow 0$

Hasta el momento hemos visto que mediante la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.21), se pueden construir las contribuciones del desarrollo en potencias de  $1/k\ell$  de esta cantidad [ver ecuación (7.22)]; además, en el caso particular de este valor esperado obtuvimos

toda la serie de la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ , que resultó ser una serie convergente [ver ecuación (7.32a)]; sin embargo, no hemos estudiado las propiedades de convergencia de la serie de Born, pues no sabemos obtener de manera general la contribución de orden  $2p$  de esa serie para un valor de  $k$  arbitrario. En el límite idealizado de  $k\ell \rightarrow 0$  podemos estudiar las propiedades de convergencia de la serie de Born, ya que en este límite podremos obtener explícitamente todos los órdenes de la serie.

El límite de bajas energías se obtiene al tomar  $k\ell \rightarrow 0$  en las funciones de Green y las ondas planas de la ecuación (7.25), pero manteniendo fijo el camino libre medio  $\ell$ , es decir,

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\langle (u_r)^2 \rangle}{4k^2 d} = \frac{\langle (v_r)^2 \rangle}{d} = \frac{1}{\ell} = \text{fijo.} \quad (7.38)$$

La ecuación (7.38) quiere decir que para considerar el límite de bajas energías la distribución de los potenciales delta, Ec. (3.10), debe ser tal que el segundo momento de las cantidades  $\langle (u_r)^2 \rangle$  vaya tan rápido a cero como lo hace  $k^2$ , logrando así que el segundo momento de las cantidades  $\langle (v_r)^2 \rangle$ , Ec. (3.15), siga escalando como  $d$ . De esta manera conseguimos que en el límite denso de dispersión débil, Ec. (7.5), el camino libre medio se mantenga fijo.

Si bien en las secciones previas hemos utilizado la serie de Born como herramienta para construir las contribuciones de orden  $1/k\ell$ , debemos recordar que la manera natural de escribir la serie de Born es en potencias inversas del camino libre medio  $\ell$ , Ec. (7.21), y no en potencias de  $1/k\ell$  [compare las ecuaciones (7.21) y (7.22)]. Hacemos notar lo anterior, pues para obtener  $\langle t \rangle_{k,L}$  en el límite de bajas energías, tomaremos el siguiente límite:

$$\lim_{k\ell \rightarrow 0} \langle (t)_{2p} \rangle_{k,L} \sim \frac{1}{\ell^p}, \quad (7.39)$$

donde  $\langle (t)_{2p} \rangle_{k,L}$  representa el valor esperado de un orden par de la serie de Born: ver ecuaciones (7.19) y (7.25).

Al tomar el límite  $k\ell \rightarrow 0$  en la ecuación (7.25) obtenemos la siguiente expresión para el valor esperado de la amplitud de transmisión:

$$\lim_{k\ell \rightarrow 0} \langle t \rangle_{k,L} \rightarrow 1 + \sum_{p=1}^{\infty} (-i)^{2p} \int \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \cdots \mathcal{V}(x_{2p}) \rangle dx_1 \cdots dx_{2p}. \quad (7.40a)$$

Utilizando la ecuación (7.26) en la ecuación (7.40a) obtenemos la siguiente serie para  $\langle t \rangle_{k\ell, L/\ell}$  en el límite de bajas energías:

$$\lim_{k\ell \rightarrow 0} \langle t \rangle_{k,L} \rightarrow 1 + \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p (2p-1)!! \left( \frac{L}{\ell} \right)^p. \quad (7.40b)$$

La ecuación (7.40b) predice que en el límite de bajas energías la contribución de segundo orden en serie de Born [sustituyendo  $p=1$  en la ecuación (7.39)] toma el siguiente valor:

$$\lim_{k\ell \rightarrow 0} \langle (t)_2 \rangle_{k,L} = - \left( \frac{L}{\ell} \right), \quad (7.41)$$

que coincide con lo que obtenemos al tomar el límite  $k\ell \rightarrow 0$  en la ecuación exacta del segundo orden, Ec. (7.20a). De igual manera, la ecuación (7.40b) predice que en el límite de bajas energías la contribución de cuarto orden en serie de Born [sustituyendo  $p = 2$  en la ecuación (7.39)] toma el siguiente valor:

$$\lim_{k\ell \rightarrow 0} \langle (t)_4 \rangle_{k,L} = 3 \left( \frac{L}{\ell} \right)^2. \quad (7.42a)$$

que coincide con lo que obtenemos al tomar el límite  $k \rightarrow 0$  en la expresión exacta del cuarto orden, Ec. (7.20b), es decir:

$$\lim_{k\ell \rightarrow 0} \langle (t)_4 \rangle_{k,L} = \lim_{k\ell \rightarrow 0} \frac{1}{\ell^2} \left[ \frac{1}{2!} L^2 + \frac{1 + 2ikL - e^{2ikL}}{k^2} + \frac{1 + 4ikL - e^{4ikL}}{16k^2} \right] = 3 \left( \frac{L}{\ell} \right)^2; \quad (7.42b)$$

por lo tanto, de los órdenes de la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$  que pudimos obtener exactamente observamos que al tomarles el límite de bajas energías las expresiones coinciden con lo que la ecuación (7.40b) predice en dicho límite.

Desafortunadamente, la serie de la ecuación (7.40b) es *divergente*, ya que no cumple el criterio de convergencia. En efecto:

$$\lim_{p \rightarrow \infty} \left| \frac{(2p+1)!!}{(2p-1)!!} \frac{L}{\ell} \right| \rightarrow \infty. \quad (7.43)$$

No obstante que la serie de la ecuación (7.40b) es divergente, ésta es de utilidad, ya que representa la serie *serie asintótica* (ver Apéndice D) en potencias inversas de  $\ell/L$  de una función definida en términos de una integral. Para mostrar lo anterior, expresamos el doble factorial del número impar  $2p - 1$  de la siguiente manera:

$$(2p-1)!! = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} u^{2p} e^{-u^2/2} du, \quad p \geq 0, \quad (7.44)$$

que al sustituir en la ecuación (7.40b) nos da la siguiente expresión:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \langle t \rangle_{k\ell, L/\ell} \rightarrow \Theta \left( \frac{L}{\ell} \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} \left( -\frac{L}{\ell} u^2 \right)^p e^{-u^2/2} du, \quad (7.45a)$$

donde hemos definido la función

$$\Theta \left( \frac{L}{\ell} \right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-u^2/2}}{1 + \frac{L}{\ell} u^2} du, \quad \forall L/\ell \geq 0. \quad (7.45b)$$

que se evalúa numéricamente para cada valor de  $L/\ell$ .

La función  $\Theta \left( \frac{L}{\ell} \right)$  definida en (7.45b) como una integral, da el valor esperado de  $t$  en el límite de bajas energías como una función de  $L/\ell$  acotada para todo valor de  $L/\ell$ , que satisface la condición inicial  $\langle t \rangle_{k\ell,0} = 1$ ; entonces ¿por qué la serie de la ecuación (7.40b) es una serie divergente para todo valor de  $L/\ell$ ? Para responder esta pregunta notemos que la ecuación (7.40b) se obtiene de la ecuación (7.45b) realizando el procedimiento inverso, es decir, desarrollando el denominador del integrando que aparece en la ecuación (7.45b) e integrando los términos de dicho desarrollo, como se muestra en la ecuación

(7.45a); sin embargo, para que dicho desarrollo sea válido se necesita que  $u^2 L/\ell < 1$ , lo cual no sucede en todo el intervalo de integración, ya que  $u \in [0, \infty)$ . Realizar la integración de la ecuación (7.45a) sobre regiones del intervalo  $u \in [0, \infty)$  en los que no es válido el desarrollo del binomio  $(1 + u^2 L/\ell)^{-1}$  origina que la serie de la ecuación (7.40b) sea divergente, pero asintótica.

La integral de la ecuación (7.45b) da como resultado [43, ver ecuación 3.466]

$$\Theta\left(\frac{L}{\ell}\right) = \sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\ell}{2L}} e^{\frac{\ell}{2L}} \operatorname{Erfc}\left(\sqrt{\frac{\ell}{2L}}\right), \quad L/\ell > 0, \quad (7.45c)$$

$$\Theta\left(\frac{L}{\ell}\right) = 1, \quad L/\ell = 0. \quad (7.45d)$$

Si en la ecuación (7.45c) usamos el desarrollo asintótico de la función  $\operatorname{Erfc}(z)$  para  $z \ll 1$  o equivalentemente para  $1/z \gg 1$  [44]

$$\operatorname{Erfc}(z) \sim \frac{e^{-z^2}}{\sqrt{\pi}z} \left[ 1 + \sum_{p=1}^{\infty} (-1)^p \frac{(2p-1)!!}{(2z^2)^p} \right] \quad \text{con } z = \sqrt{\frac{\ell}{2L}}, \quad (7.46)$$

recuperamos la serie de la ecuación (7.40b).

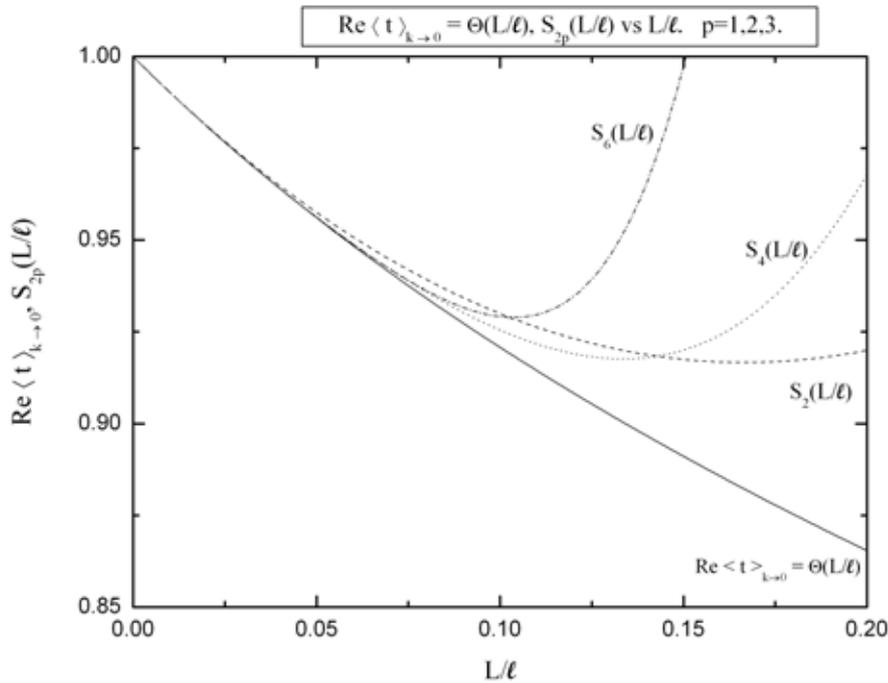


Figura 7.6: Comparación entre las sumas parciales pares  $S_2(L/\ell)$ ,  $S_4(L/\ell)$ ,  $S_6(L/\ell)$  y  $\operatorname{Re} \langle t \rangle_{k\ell \rightarrow 0} = \Theta(L/\ell)$ .

De la ecuación (7.45) observamos que, al igual que en el límite de longitud de onda corta en el que  $k\ell \rightarrow \infty$ , Ec. (7.33), en el límite de bajas energías el valor esperado de la parte imaginaria de  $\langle t \rangle_{k,L}$  es cero.

Lo que hasta el momento hemos mostrado es que, en el límite de bajas energías, la serie de Born de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.40b), da una serie divergente, pero asintótica, que podemos identificar como la serie asintótica de la función  $\Theta(L/\ell)$ , Ec. (7.45b), que a su vez es proporcional a la función de  $\text{Erfc}(\sqrt{\ell/2L})$ , Ec. (7.45c).

Discutamos el comportamiento asintótico del valor esperado  $\langle t \rangle_{k,L}$  en el límite de bajas energías  $k \rightarrow 0$ .

En general las series asintóticas son divergentes, pero son de gran utilidad para aproximar el valor de una función en una región cercana a un punto singular, fuera de la cual la aproximación es mala [45]. En nuestro caso particular la función es  $\Theta(L/\ell)$ , Ec. (7.45b), cuya serie asintótica es la ecuación (7.40b) y el punto singular es  $L/\ell = 0$ ; por lo tanto, la serie asintótica (7.40b) nos permitirá aproximar la ecuación (7.45c) en una región cercana al origen, es decir,  $L/\ell \ll 1$ .

La manera en que se utiliza una serie asintótica para aproximar el valor de una función en un punto dado, es mediante las sumas parciales de dicha serie: por ejemplo, las sumas parciales de la serie de la ecuación (7.40b) son:

$$S_0\left(\frac{L}{\ell}\right) = 1 \quad (7.47a)$$

$$S_1\left(\frac{L}{\ell}\right) = 1 - \frac{L}{\ell} \quad (7.47b)$$

$$S_2\left(\frac{L}{\ell}\right) = 1 - \frac{L}{\ell} + 3\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \quad (7.47c)$$

$$S_3\left(\frac{L}{\ell}\right) = 1 - \left(\frac{L}{\ell}\right) + 3\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 - 15\left(\frac{L}{\ell}\right)^3 \quad (7.47d)$$

⋮

En la figura 7.6 comparamos las sumas parciales  $S_2(L/\ell)$ ,  $S_4(L/\ell)$  y  $S_6(L/\ell)$  con  $\langle t \rangle_{k,L}$  en el límite de bajas energías [ver ecuación (7.45)]; análogamente, en la figura 7.7 comparamos las sumas parciales  $S_1(L/\ell)$ ,  $S_3(L/\ell)$  y  $S_5(L/\ell)$  con  $\langle t \rangle_{k,L}$  en el mismo límite. En ambas figuras vemos que mientras más términos tenga la suma parcial ésta deja de ser una buena aproximación a la curva real de  $\langle t \rangle_{k,L}$  para valores de  $L/\ell$  cada vez más pequeños, lo cual no sucede para una serie convergente, pero es característico de una serie asintótica.

Una característica de las series asintóticas es que para un punto dado existe una suma parcial que es la mejor aproximación a la función en dicho punto. Dicha suma parcial es aquella que tiene el número *óptimo* de términos [46, 47]. El número óptimo de términos  $n$  para un punto dado se obtiene cuando el cociente entre los términos  $n+1$  y  $n$  de la serie asintótica en cuestión es del orden de 1: por ejemplo, pensemos que queremos aproximar  $\langle t \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.45), en el punto  $L/\ell = 0.1$  con el menor error posible, es decir, con la suma parcial que tiene el número óptimo de términos, que determinamos de la siguiente manera [ver ecuación (7.40b)]:

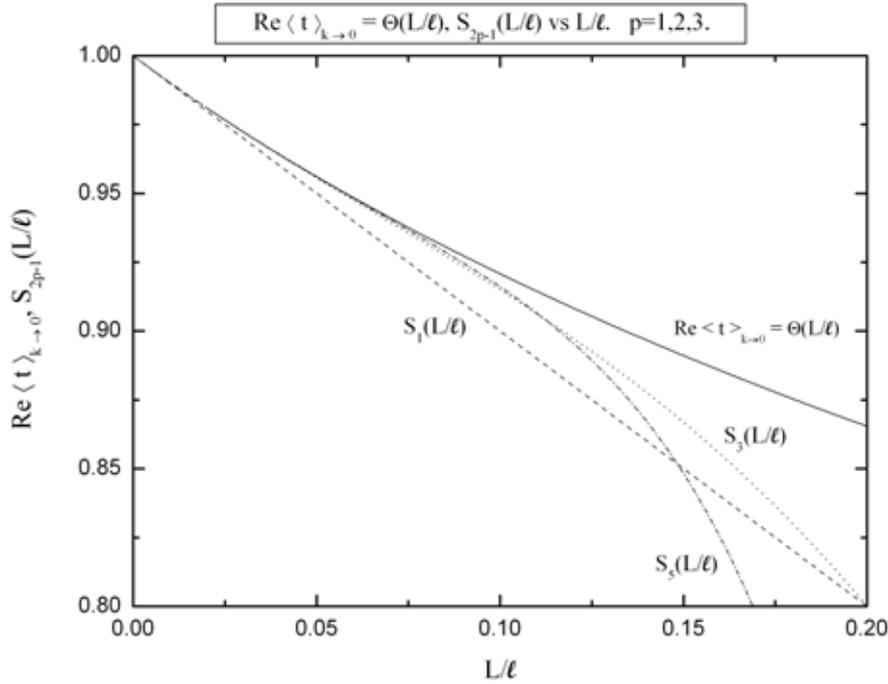


Figura 7.7: Comparación entre las sumas parciales impares  $S_1(L/\ell)$ ,  $S_3(L/\ell)$ ,  $S_5(L/\ell)$  y  $\text{Re}\langle t\rangle_{k\ell\rightarrow 0} = \Theta(L/\ell)$ .

$$\frac{(2n+1)!! \left(\frac{L}{\ell}\right)^{n+1}}{(2n-1)!! \left(\frac{L}{\ell}\right)^n} = (2n+1) \left(\frac{L}{\ell}\right) \sim 1 \quad (7.48a)$$

$$n \sim \frac{1}{2} \left( \frac{1}{L/\ell} - 1 \right); \quad (7.48b)$$

por lo tanto, al sustituir  $L/\ell = 0.1$  en la ecuación (7.48b) se obtiene que  $n \sim 4.5$ , es decir, que el número óptimo de términos es 4 o 5. En las figuras 7.6 y 7.7 observamos que, en efecto, las sumas parciales que más se parecen a la curva de (7.45) en el punto  $L/\ell = 0.1$  son  $S_4(L/\ell)$  y  $S_5(L/\ell)$ . En la figura 7.8 observamos que las sumas parciales  $S_4(L/\ell)$  y  $S_5(L/\ell)$  difieren de la curva real en  $L/\ell = 0.1$  casi por el mismo error; además, para valores de  $L/\ell \leq 0.1$  ambas sumas parciales son buenas aproximaciones de la curva real.

Para concluir la discusión de  $\langle t\rangle_{k,L}$  hagamos conexión entre los resultados obtenidos para este caso particular, es decir, entre la estructura general que obtuvimos para  $\langle t\rangle_{k,L}$  en potencias de  $1/k\ell$ , Ec. (7.30), en la aproximación de longitud de onda corta, Ec. (7.33), y el límite de bajas energías, Ec. (7.45).

Las ecuaciones (7.33) y (7.45) dan los dos comportamientos límite del valor esperado de  $\langle t\rangle_{k,L}$ , que comparamos en la figura 7.9. En dicha figura observamos que la curva de  $\langle t\rangle_{k,L}$  cuando  $k\ell \rightarrow 0$  siempre está por encima de la curva de  $\langle t\rangle_{k,L}$  cuando  $k\ell \rightarrow \infty$ . Lo

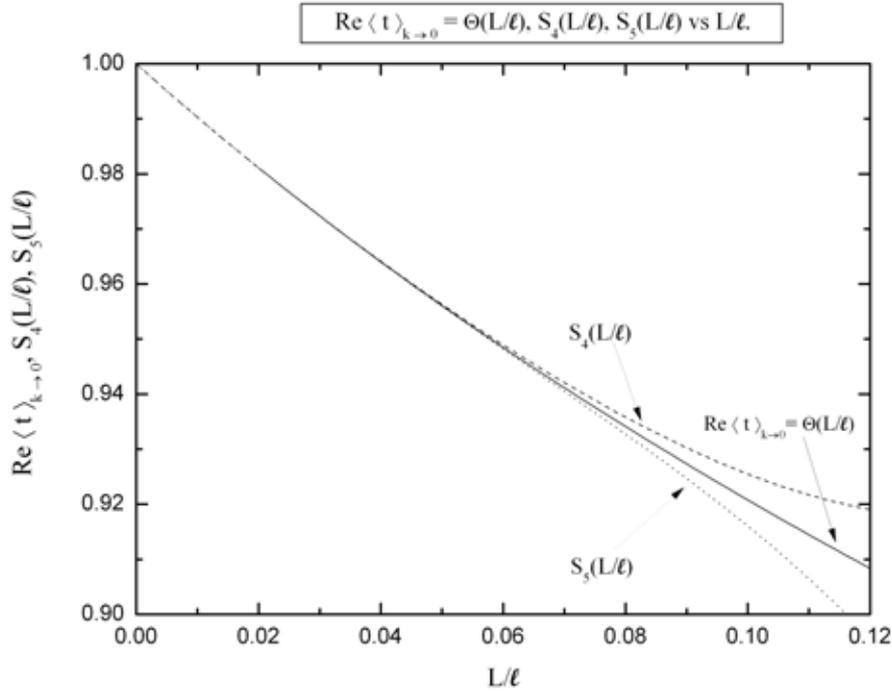


Figura 7.8: Comparación entre las sumas parciales  $S_4(L/\ell)$ ,  $S_5(L/\ell)$  y  $\text{Re}\langle t \rangle_{k \rightarrow 0} = \Theta(L/\ell)$ .

anterior puede parecer contraintuitivo, ya que es natural pensar que al aumenta el valor de  $k$  (de la energía) haya una mayor transmisión, pues de esta manera el electrón interactuaría menos con el potencial dispersor que si el valor de  $k$  disminuye. El argumento anterior sería cierto si hubiéramos considerado en ambos casos la misma distribución de los potenciales delta, es decir, el mismo valor para el segundo momento  $\langle (u_r)^2 \rangle$ ; sin embargo, recordemos que en ambos límites conservamos fijo el camino libre medio [ver ecuaciones (7.34) y (7.38)], lo cual se consiguió de la siguiente manera:

- En el caso del límite de longitud de onda corta  $k\ell \rightarrow \infty$  la distribución de potenciales delta fue tal que el segundo momento de los potenciales delta  $\langle (u_r)^2 \rangle$  creciera tan rápido como  $k^2$ , es decir, si bien el número de onda (la energía) del electrón  $k$  crece, también lo hace el potencial dispersor; por lo tanto, el electrón sí interactúa de manera importante con potencial, disminuyendo así la transmisión.
- En el caso del límite de bajas energías  $k\ell \rightarrow 0$  la distribución de potenciales delta fue tal que el segundo momento de los potenciales delta  $\langle (u_r)^2 \rangle$  decreciera tan rápido como  $k^2$ , es decir, si bien el número de onda (la energía) del electrón  $k$  decrece, también lo hace el potencial dispersor; por lo tanto, el electrón interactúa poco con el potencial, permitiendo así una mayor transmisión.

Estos dos casos límite nos permiten afirmar que para un valor de  $\ell$  fijo y un valor de  $k$  arbitrario, la parte real de  $\langle t \rangle_{k,L}$  tendrá una dependencia en  $L/\ell$  cuya curva deberá estar

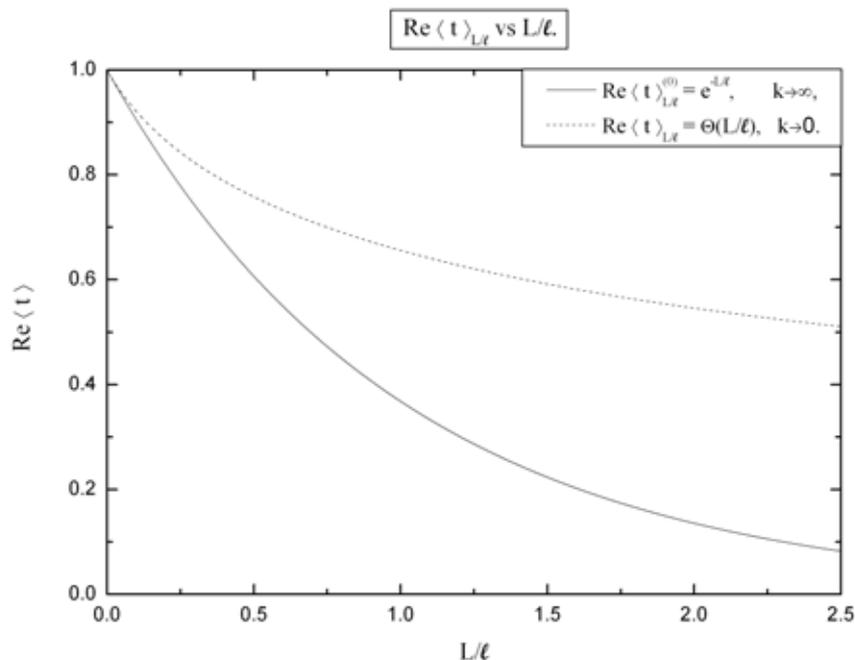


Figura 7.9: Comparación de la parte real de  $\langle t \rangle_{k,L}$  en el límite de longitud de onda corta  $k\ell \rightarrow \infty$  (línea continua) y en el límite de bajas energías  $k\ell \rightarrow 0$  (línea de segmentos).

en la región encerrada por las curvas continua y punteada de la figura 7.9. Debido a que en el límite de bajas energías mostramos que la serie de Born genera una serie divergente pero asintótica, es razonable sospechar que para un valor de  $k$  arbitrario la serie de Born que obtendremos será asintótica y que el único caso en que obtendremos una serie convergente es cuando  $k\ell \rightarrow \infty$ .

Como mostramos en la ecuación (7.30) la serie de Born nos permitió construir la estructura general en potencias de  $1/k\ell$  de  $\langle t \rangle_{k,L}$  como:

$$\langle t \rangle_{k,L} = \frac{1}{(k\ell)^0} \langle t \rangle_L^{(0)} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \langle t \rangle_{k,L}^p = e^{-L/\ell} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \langle t \rangle_{k,L}^p, \quad (7.49)$$

siendo el camino libre medio  $\ell$  y el número de onda  $k$  parámetros fijos y en principio arbitrarios. Como veremos más adelante esta estructura no es característica de  $\langle t \rangle_{k,L}$  ni del caso unidimensional, será la estructura general que generará la serie de Born para cualquier observable.

Una vez que hemos mostrado la manera que utilizamos la serie de Born para calcular  $\langle t \rangle_{k\ell, L\ell}$ , aplicaremos este método para construir la serie de otras observables y no sólo en el caso unidimensional.

### 7.3.2. Valor esperado de la amplitud de reflexión: $\langle r \rangle_{k,L}$

Utilizando el método de la serie de Born que describimos con todo detalle para  $\langle t \rangle_{k,L}$  en la sección 7.3.1, ahora obtendremos, hasta cuarto orden en serie de Born, el valor esperado de la amplitud de reflexión.

Para obtener  $\langle r \rangle_{k,L}$  hasta cuarto orden de la serie de Born utilizamos la versión unidimensional de las expresiones (2.152e)-(2.152h) junto con la versión unidimensional del modelo estadístico del potencial, Ec. (7.17); por lo tanto, las contribuciones de segundo y cuarto orden de la serie de Born de  $\langle r \rangle_{k,L}$  son las siguientes:

$$\begin{aligned} \langle (r)_2 \rangle_{k,\ell,L} &= (-i)^2 \int \varphi_+(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \varphi_+(k; x_2) \times \\ &\quad \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \rangle dx_1 dx_2, \end{aligned} \quad (7.50a)$$

$$\begin{aligned} \langle (r)_4 \rangle_{k,\ell,L} &= (-i)^4 \int \varphi_+(k; x_1) \tilde{g}_0(k; x_1 - x_2) \tilde{g}_0(k; x_2 - x_3) \tilde{g}_0(k; x_3 - x_4) \varphi_+(k; x_4) \times \\ &\quad \langle \mathcal{V}(x_1) \mathcal{V}(x_2) \mathcal{V}(x_3) \mathcal{V}(x_4) \rangle dx_1 dx_2 dx_3 dx_4; \end{aligned} \quad (7.50b)$$

Al igual que en el caso de  $\langle t \rangle_{k,L}$ , los detalles del cálculo de las expresiones de la ecuación (7.50) se muestran en el Apéndice C, de tal manera que aquí sólo escribiremos los resultados, siendo éstos:

$$\langle (r)_2 \rangle_{k,\ell,L} = \frac{1}{\ell} \left[ \frac{i}{2k} (-1 + e^{2ikL}) \right], \quad (7.51a)$$

$$\langle (r)_4 \rangle_{k,\ell,L} = \frac{1}{\ell^2} \left[ -i \frac{3L}{2k} e^{2ikL} + \frac{1}{k^2} \left( -\frac{9}{8} + \frac{3}{2} e^{2ikL} - \frac{3}{8} e^{4ikL} \right) \right]. \quad (7.51b)$$

por lo tanto, la expresión  $\langle r \rangle_{k,L}$  hasta cuarto orden en serie de Born es la siguiente:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{k,L} &= \frac{1}{\ell} \left[ \frac{i}{2k} (-1 + e^{2ikL}) \right] + \frac{1}{\ell^2} \left[ -i \frac{3L}{2k} e^{2ikL} + \frac{1}{k^2} \left( -\frac{9}{8} + \frac{3}{2} e^{2ikL} - \frac{3}{8} e^{4ikL} \right) \right] \\ &+ O\left(\frac{1}{\ell^3}\right) \end{aligned} \quad (7.52)$$

Utilizando la ecuación (7.52) podemos construir las primeras contribuciones de la serie en potencias de  $1/k\ell$  siendo ésta la siguiente:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle_{k\ell,L/\ell} &= \frac{i}{k\ell} \left[ \begin{aligned} &\left( -\frac{1}{2} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) \\ &+ \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{L}{\ell}\right) + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \right) e^{2ikL} \end{aligned} \right] \\ &+ \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ \begin{aligned} &\left( -\frac{9}{8} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) \\ &+ \left( \frac{3}{2} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) e^{2ikL} \\ &+ \left( -\frac{3}{8} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right) e^{4ikL} \end{aligned} \right] \end{aligned} \quad (7.53)$$

La ecuación (7.53) nos da las primeras correcciones al resultado de Mello y Tomsovic [18] para  $\langle r \rangle_{k,L}$ , Ec. (5.33), ya que este valor esperado no tiene contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  siendo su primera contribución de orden  $1/k\ell$ . La ecuación (7.53) será una buena aproximación en el límite de longitud de onda corta y en el régimen balístico, Ec. (7.23).

### El término dominante de $\langle r \rangle_{k,L}$

A diferencia de  $\langle t \rangle_{k,L}$  para  $\langle r \rangle_{k,L}$  no hay contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  siendo la primera contribución diferente de cero la de orden  $1/(k\ell)^1$ , por lo que, en el régimen de longitud de onda corta no idealizado, es decir,  $k\ell \gg 1$ , esta contribución será la dominante. Desafortunadamente no sabemos obtener la serie de la contribución de orden dominante de  $\langle r \rangle_{k,L}$ , ya que no hemos identificado, a cada orden en la serie de Born, las integrales cuyo resultado es proporcional a  $1/k\ell$ , a potencias de  $L/\ell$  y posiblemente a exponenciales complejas como  $e^{2ikL}$ : por ejemplo en los primeros dos renglones de la ecuación (7.53) tenemos los primeros términos de esta contribución siendo los términos

$$-\frac{i}{k\ell} \frac{1}{2}, \quad \frac{i}{k\ell} \frac{1}{2} e^{2ikL} \quad (7.54a)$$

de segundo orden en la serie de Born, mientras que el término

$$-\frac{i}{k\ell} \frac{3L}{2\ell} e^{2ikL} \quad (7.54b)$$

es de cuarto orden en la serie de Born.

Debido a que  $\langle r \rangle_{k,L}$  no tiene contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ , la estructura general en potencias de  $1/k\ell$  para  $\langle r \rangle_{k,L}$  es la siguiente:

$$\langle r \rangle_{k,L} = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \langle r \rangle_{k,L}^{(p)} \quad (7.55)$$

que es la expresión análoga a la ecuación (7.30) del  $\langle t \rangle_{k,L}$ .

### Comportamiento de $\langle r \rangle_{k,L}$ en el límite de longitud de onda corta idealizado

$k\ell \rightarrow \infty$

De la serie de Born de  $\langle r \rangle_{k,L}$  logramos construir los primeros términos de las contribuciones de orden  $1/k\ell$  y  $1/(k\ell)^2$ , Ec. (7.53). Al construir esa serie notamos que en este caso no hay contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  por lo que la ecuación (7.55) da la estructura general de  $\langle r \rangle_{k,L}$  en potencias  $1/k\ell$ . La estructura de esa ecuación la podemos conectar con la estructura que propusimos en la referencia [42] para los valores esperados en el límite de longitud de onda corta, que en el caso de  $\langle r \rangle_{k,L}$  es la siguiente:

$$\langle r \rangle_{k,L} = \langle r \rangle_L^{(0)} + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle r \rangle_{m,L/\ell}^{(p)} e^{imk\ell \frac{L}{\ell}}. \quad (7.56a)$$

donde las cantidades  $\langle r \rangle_L^{(0)}$  y  $\langle r \rangle_{m,L/\ell}^{(p)}$  dependen de  $L/\ell$ , pero no de  $k\ell$ . Al comparar las ecuaciones (7.55) y (7.56a) podemos hacer las siguientes identificaciones:

$$\langle r \rangle_L^{(0)} = 0, \quad (7.56b)$$

$$\langle r \rangle_{k,L}^{(p)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \langle r \rangle_{m,L/\ell}^{(p)} e^{imk\ell \frac{L}{\ell}}, \quad p \geq 1, \quad (7.56c)$$

Para los valores de  $p = 1$  y  $p = 2$  podemos identificar los siguientes contribuciones:

- A orden  $1/(k\ell)^1$ :

$$\langle r \rangle_{0,L/\ell}^{(1)} = i \left( -\frac{1}{2} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right), \quad (7.57a)$$

$$\langle r \rangle_{2,L/\ell}^{(1)} = i \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \left(\frac{L}{\ell}\right) + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^2 \right). \quad (7.57b)$$

- A orden  $1/(k\ell)^2$ :

$$\langle r \rangle_{0,L/\ell}^{(2)} = \left( -\frac{9}{8} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right), \quad (7.57c)$$

$$\langle r \rangle_{2,L/\ell}^{(2)} = \left( \frac{3}{2} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right), \quad \langle r \rangle_{-2,L/\ell}^{(2)} = 0, \quad (7.57d)$$

$$\langle r \rangle_{4,L/\ell}^{(2)} = \left( -\frac{3}{8} + O\left(\frac{L}{\ell}\right) \right). \quad \langle r \rangle_{-4,L/\ell}^{(2)} = 0. \quad (7.57e)$$

Al considerar el límite idealizado del límite de longitud de onda corta en la ecuación (7.56c) obtenemos:

$$\lim_{k\ell \rightarrow \infty} \langle r \rangle_{k,L} \rightarrow \langle r \rangle_L^{(0)} = 0. \quad (7.58)$$

El resultado de la ecuación (7.58) coincide con el resultado que obtuvimos al resolver la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta, Ec. (5.27), que previamente habían obtenido Mello y Tomsovic [18].

### Comparación de la serie de Born de $\langle r \rangle_{k,L}$ con la simulación numérica

Al igual que lo hicimos para  $\langle t \rangle_{k,L}$ , en esta sección compararemos  $\langle r \rangle_{k,L}$  que obtuvimos con la serie de Born con el valor esperado de una simulación numérica basada en la versión unidimensional del potencial cuasi-unidimensional definido en la ecuación (3.13). Dicha comparación la haremos para un valor finito del parámetro  $k\ell$ , pero mucho mayor que uno.

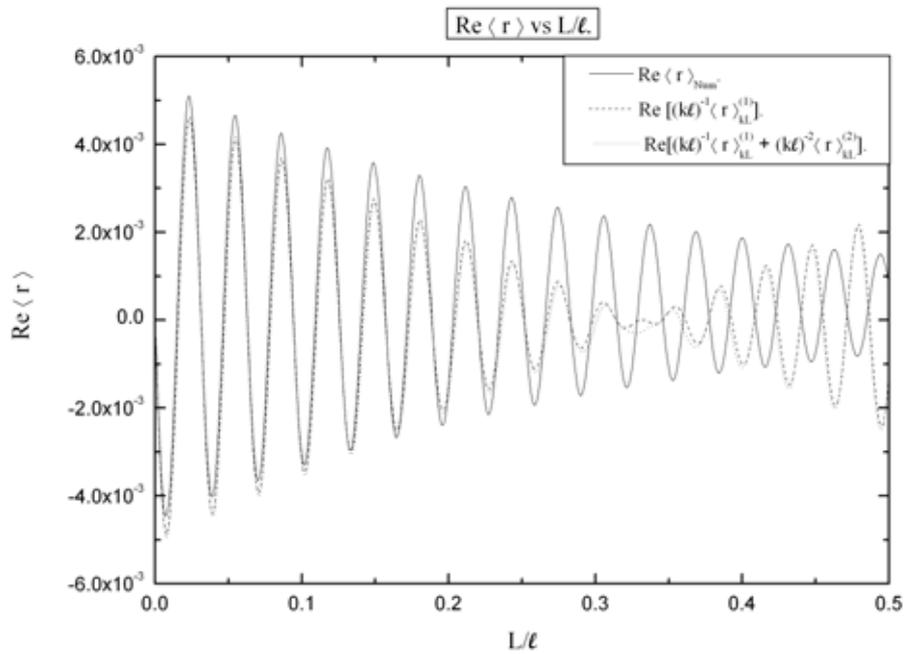


Figura 7.10:  $\text{Re} \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $\text{Re} \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos) y  $\text{Re} \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle r \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) muestran un buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

De la ecuación (7.53) obtenemos que la parte real de  $\langle r \rangle_{k,L}$  es:

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle r \rangle_{k,L} = & \frac{1}{k\ell} \left[ \left( -\frac{1}{2} + \frac{3}{2} \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \sin 2kL \right] & (7.59a) \\ & + \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ \left( -\frac{9}{8} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) + \left( \frac{3}{2} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \cos 2kL + \left( -\frac{3}{8} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \cos 4kL \right] \\ & + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^3 \end{aligned}$$

mientras que para la parte imaginaria

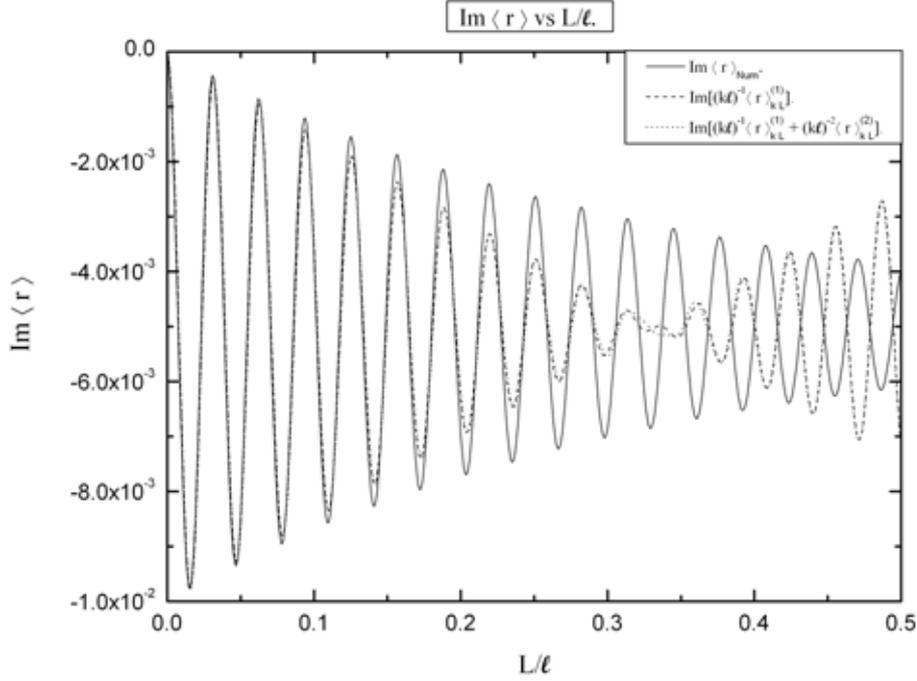


Figura 7.11:  $\text{Im} \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ . El resultado numérico (curva continua) y los resultados teóricos  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} \right]$  (curva de segmentos) y  $\text{Im} \left[ (k\ell)^{-1} \langle r \rangle_{k,L}^{(1)} + (k\ell)^{-2} \langle r \rangle_{k,L}^{(2)} \right]$  (curva de puntos) muestran un buen acuerdo al inicio de la gráfica. Los resultados corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle r \rangle_{k,L} &= \frac{1}{k\ell} \left[ -\frac{1}{2} + \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{2} \left( \frac{L}{\ell} \right) + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 \right) \cos 2kL \right] \\ &+ \frac{1}{(k\ell)^2} \left[ \left( \frac{3}{2} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \sin 2kL + \left( -\frac{3}{8} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right) \sin 4kL \right] \\ &+ O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^3 \end{aligned} \quad (7.59b)$$

En las figuras 7.10 y 7.11 comparamos la parte real e imaginaria, respectivamente, del cálculo numérico del valor esperado de  $r$  con los correspondientes resultados teóricos, Ec. (7.59). En estas figuras se observa que en el régimen balístico,  $0 \leq L/\ell \sim 0.1$ , el acuerdo entre las curvas teórica y numérica es cuantitativamente (excepto en las regiones cercanas a los máximos y mínimos de la oscilación de  $\text{Re} \langle r \rangle_{k,L}$ ) y cualitativamente bueno siendo notable el *acuerdo en la fase* de la oscilación tanto para la parte real como para la imaginaria. También podemos observar en dichas figuras que tanto para la parte real como para la imaginaria la contribución dominante en potencias de  $1/k\ell$  es la de orden

uno, ya que al considerar la contribución de orden  $1/(k\ell)^2$  la curva teórica no se modifica de manera apreciable en la región  $0 \leq L/\ell \sim 0.1$ , lo que se debe al valor de  $k\ell = 100$ .

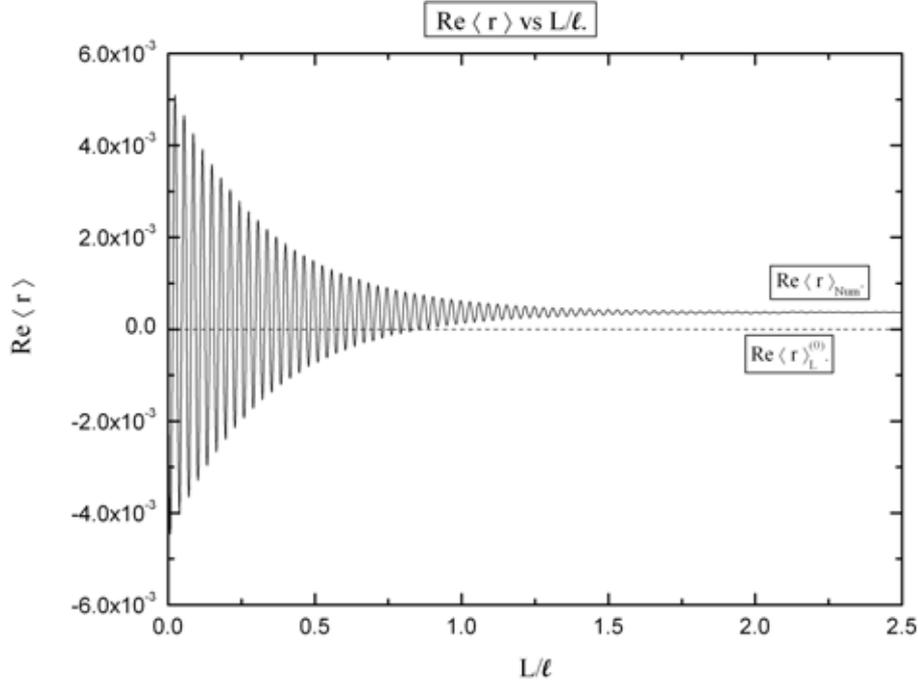


Figura 7.12:  $\text{Re}\langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ : Resultado numérico de la parte real del valor esperado de  $r$  (curva continua) más allá del régimen balístico y la solución de la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta idealizado  $k\ell \rightarrow \infty$  (curva de segmentos): ver ecuación (5.33). Los resultados numéricos corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

A diferencia del  $\langle t \rangle_{k,L}$ , para  $\langle r \rangle_{k,L}$  no pudimos obtener toda la expresión de la contribución dominante de  $\langle r \rangle_{k,L}$ ; el único resultado teórico que tenemos para  $\langle r \rangle_{k,L}$ , más allá del régimen balístico, es el que obtuvimos mediante la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta, Ec. (5.33).

En las figuras 7.12 y 7.13 observamos que los resultados numéricos de  $\text{Re}\langle r \rangle_{\text{Num}}$  y  $\text{Im}\langle r \rangle_{\text{Num}}$  muestran un comportamiento oscilatorio, pero atenuado, ya que al aumentar el valor de  $L/\ell$  la amplitud de la oscilación decrece de tal manera que, tanto la parte real como para la imaginaria, tienden a un valor constante: aproximadamente  $5 \times 10^{-4}$  para la parte real y  $5 \times 10^{-3}$  para la parte imaginaria. Por otro lado, del resultado teórico que obtuvimos para la parte real e imaginaria, Ec. (7.59), nos damos cuenta que para valores de  $k\ell \gg 1$ , tanto la parte real como la imaginaria de  $\langle r \rangle_{k,L}$  se pueden escribir como potencias de  $1/k\ell$ ; por lo tanto, mientras más grande sea el valor de  $k\ell \gg 1$  las amplitudes de las oscilaciones disminuirán hasta que ambas tiendan a cero como lo predice la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta.

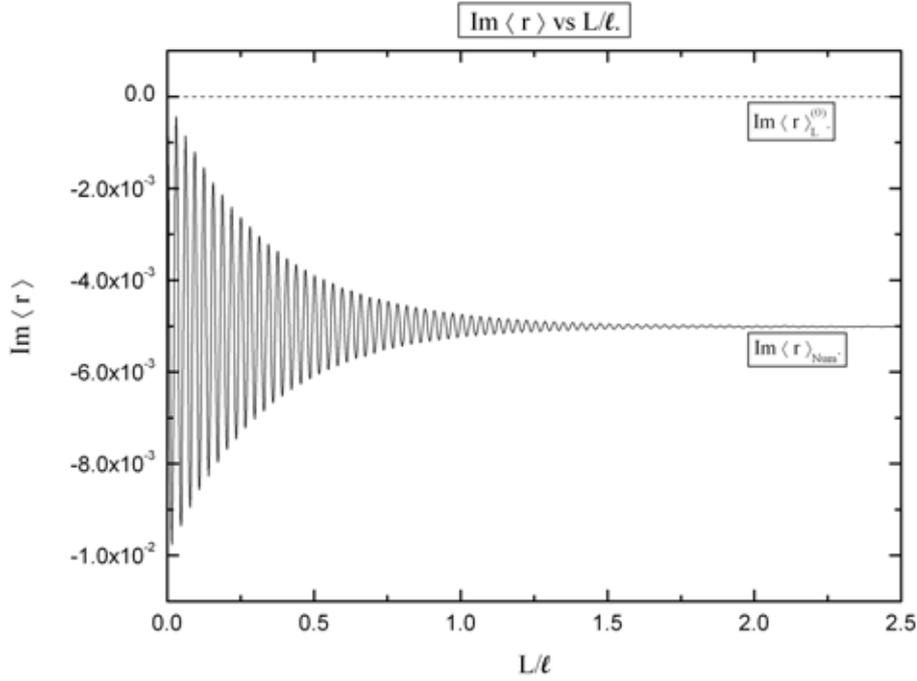


Figura 7.13:  $\text{Im} \langle r \rangle$  vs  $L/\ell$ : Resultado numérico de la parte imaginaria del valor esperado de  $r$  (curva continua) más allá del régimen balístico y la solución de la ecuación de difusión en el límite de longitud de onda corta idealizado  $k\ell \rightarrow \infty$  (curva de segmentos): ver ecuación (5.33). Los resultados numéricos corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

### 7.3.3. Valor esperado de las intensidades de transmisión $\langle T \rangle_{k,L}$ y de reflexión $\langle R \rangle_{k,L}$

#### El resultado teórico

Para obtener las cantidades  $\langle T \rangle_{k,L}$  y  $\langle R \rangle_{k,L}$  hasta cuarto orden en el potencial, se utiliza el mismo procedimiento con el que se obtuvieron las amplitudes promedio  $\langle t \rangle_{k,L}$  y  $\langle r \rangle_{k,L}$ ; es decir, al considerar la versión unidimensional de las ecuaciones (2.153), (2.155) y el modelo estadístico del potencial, Ec. (7.17), se obtienen las siguientes expresiones:

$$\langle T \rangle_{k,L} = \left[ 1 - \frac{L}{\ell} + \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right] \quad (7.60a)$$

$$+ \frac{1}{(k\ell)^2} \left\{ \left[ 1 + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 kL + \left[ \frac{1}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 2kL \right\},$$

$$\langle R \rangle_{k,L} = \left[ \frac{L}{\ell} - \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right] \quad (7.60b)$$

$$+ \frac{1}{(k\ell)^2} \left\{ \left[ -1 + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 kL + \left[ -\frac{1}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 2kL \right\},$$

En la ecuación (7.60) [al igual que lo hicimos en el caso de las amplitudes: ver ecuaciones (7.22) y (7.53)] hemos expresado los valores esperados de las intensidades como series en potencias inversas del parámetro  $k\ell$ , siendo las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^0$

$$\langle T \rangle_L^{(0)} = 1 - \frac{L}{\ell} + \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \quad (7.61a)$$

$$\langle R \rangle_L^{(0)} = \frac{L}{\ell} - \left( \frac{L}{\ell} \right)^2 + O \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \quad (7.61b)$$

las relevantes en el límite de longitud de onda corta (SWLA) y en el régimen balístico: ver ecuación (7.23).

De la ecuación (7.60) podemos observar que las intensidades promedio no tienen contribución de orden  $1/(k\ell)^1$ , es decir, la primera corrección al SWLA es de orden  $1/(k\ell)^2$ ; por lo tanto, las expresiones de (7.60) se pueden escribir en serie de potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera, respectivamente:

$$\langle T \rangle_{k,L} = \langle T \rangle_L^{(0)} + \sum_{p=2}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \langle T \rangle_{k,L}^{(p)}, \quad (7.62a)$$

$$\langle R \rangle_{k,L} = \langle R \rangle_L^{(0)} + \sum_{p=2}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \langle R \rangle_{k,L}^{(p)}, \quad (7.62b)$$

de tal manera que de la ecuación (7.60) podemos identificar los primeros términos de la contribución de orden  $1/(k\ell)^2$  siendo éstos:

$$\langle T \rangle_{k,L}^{(2)} = \left\{ \left[ 1 + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 kL + \left[ \frac{1}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 2kL \right\} \quad (7.63a)$$

$$\langle R \rangle_{k,L}^{(2)} = \left\{ \left[ -1 + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 kL + \left[ -\frac{1}{4} + O \left( \frac{L}{\ell} \right) \right] \sin^2 2kL \right\} \quad (7.63b)$$

Las expresiones de (7.62) deben ser consistentes con la propiedad de conservación de flujo, Ec. (2.66), es decir, que la suma de éstas satisfaga la expresión siguiente:

$$\langle T \rangle_L^{(0)} + \langle R \rangle_L^{(0)} + \sum_{p=2}^{\infty} \frac{1}{(k\ell)^p} \left[ \langle T \rangle_{k,L}^{(p)} + \langle R \rangle_{k,L}^{(p)} \right] = 1, \quad (7.64)$$

de la cual podemos concluir que las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^0$  (es decir, de orden 1) deben cumplir:

$$\langle T \rangle_L^{(0)} + \langle R \rangle_L^{(0)} = 1, \quad (7.65a)$$

mientras que las contribuciones de órdenes superiores deben cumplir:

$$\langle T \rangle_{k,L}^{(p)} + \langle R \rangle_{k,L}^{(p)} = 0, \quad p \geq 2 \quad (7.65b)$$

Las expresiones teóricas de las ecuaciones (7.61) y (7.63) satisfacen, hasta cuarto orden en el potencial, las condiciones anteriores.

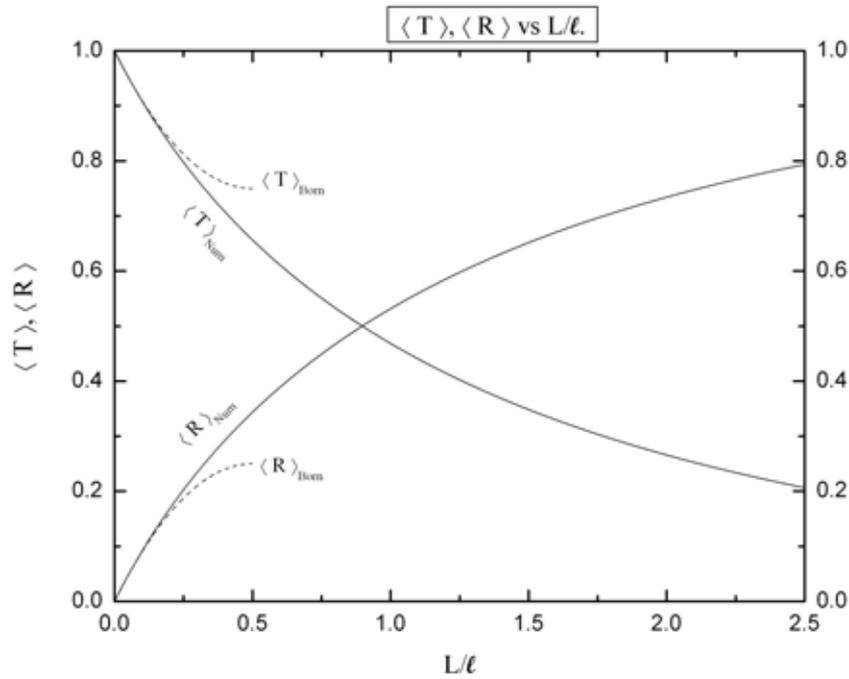


Figura 7.14:  $\langle T \rangle, \langle R \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado numérico (líneas continuas) y la serie de Born (líneas de segmentos). Los resultados numéricos corresponden al valor  $k\ell = 100$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

### Comparación con el resultado numérico

En la figura 7.14 se muestra la comparación entre la contribución dominante (en el SWLA) del resultado teórico obtenido para las intensidades promedio, Ec. (7.60), y la correspondiente simulación numérica en el límite de longitud de onda corta, Ec. (7.23). De esta figura observamos que:

- El resultado teórico, Ec. (7.61), muestra un buen acuerdo con el correspondiente resultado numérico, por lo menos en el régimen balístico.
- Las curvas numéricas, válidas más allá del régimen balístico, son consistentes con la propiedad de conservación de flujo, ya que para todo valor de  $L/\ell$  cumplen la condición:

$$\langle T \rangle_{Num} + \langle R \rangle_{Num} = 1; \quad (7.66)$$

en particular para  $L/\ell \sim 0.8$  ambas curvas valen 0.5, lo que es consistente con la ecuación (7.66).

## 7.4. Valores esperados: caso multicanal

En la presente sección utilizaremos el método de la serie de Born para estudiar los valores esperados de observables macroscópicos de un sistema balístico en el caso multicanal ( $N \geq 1$  y  $N' \neq 0$ ). Al igual que en el caso unidimensional los resultados que obtengamos en el caso multicanal únicamente serán válidos en el régimen balístico y en la aproximación de longitud de onda corta (SWLA)  $k\ell \gg 1$ : ver ecuaciones (4.37b) y (4.43), respectivamente.

Los resultados que obtengamos mediante la serie de Born se compararán con los resultados de una simulación numérica basada en el modelo microscópico del Capítulo 3 y en el modelo propuesto en la sección 6.4.1 para la dependencia transversal  $u_r(y)$  del  $r$ -ésimo dispersor, Ec. (6.13). Por supuesto, la comparación entre el resultado teórico y la simulación numérica únicamente tendrá sentido en el régimen balístico, pues la serie de Born sólo es válida en dicho régimen.

Todos los resultados que presentemos en esta sección, tanto teóricos como numéricos, se graficarán contra la cantidad  $L/\ell$ ; además, tanto los resultados teóricos como numéricos, requerirán que se especifique el valor del parámetro adimensional  $k\ell$  ( $k\ell \gg 1$ ), de tal manera que los números de onda y factores de atenuación se calcularán de las ecuaciones:

$$k_a = k \sqrt{1 - \left( \frac{a}{N + \frac{1}{2}} \right)^2}, \quad 1 \leq a \leq N \quad (7.67a)$$

$$\kappa_a = k \sqrt{\left( \frac{a}{N + \frac{1}{2}} \right)^2 - 1}, \quad a > N \quad (7.67b)$$

Aplicar la serie de Born en este caso es más complicado que en el caso unidimensional, ya que no sólo debemos tomar en cuenta la contribución de los  $N$  canales abiertos, sino que además debemos considerar las contribuciones de los canales cerrados, lo que complica las expresiones de los diferentes observables: ver ecuación (2.152); sin embargo, el procedimiento es análogo al que usamos en la sección 7.3 donde ilustramos (con el mayor detalle posible) la manera en que se utiliza la serie de Born para obtener el valor esperado de un observable en el caso unidimensional. A continuación comentaremos algunos puntos importantes del caso multicanal:

- Debido a la complejidad que representa obtener la serie de Born en el caso multicanal, únicamente calcularemos el valor esperado de un observable hasta cuarto orden en el potencial.
- Al igual que en el caso unidimensional, de las expresiones que obtengamos a partir de la serie de Born construiremos la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$  de los diferentes valores esperados. Por supuesto, en el caso multicanal habrá varios números de onda  $k_a$  ( $\propto k$ ), factores de atenuación  $\kappa_a$  ( $\propto k$ ) y caminos libres medios  $\ell_{ab}$  (tanto de canales abiertos como de cerrados); sin embargo, en el caso multicanal, diremos que un término es de “orden  $1/(k\ell)^p$ ” (con  $p \geq 0$ ) cuando el producto de números de onda  $k_a$  y/o factores de atenuación  $\kappa_a$  que aparecen en el denominador sea de orden  $p$  y el producto de caminos libres medios que aparecen en el mismo denominador sea de orden  $p$  o mayor. Para ejemplificar lo anterior consideremos el siguiente término:

$$\frac{1}{\ell_{ab_2} \sqrt{\ell_{aa} \ell_{aa_0}}} \frac{1}{k_{a_0} - k_{b_2}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{-k_a + k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L}}{k_a - k_{b_2}} \right); \quad (7.68a)$$

si en (7.68a) consideramos que  $a \neq a_0$ ,  $a \neq b_2$ ,  $a_0 \neq b_2$ , entonces diremos que (7.68a) es de orden  $1/(k\ell)^2$ . Por otro lado, si en (7.68a) consideramos que  $a = a_0$ ,  $a \neq b_2$ , entonces dicha ecuación se simplifica, obteniendo así:

$$\frac{-i}{\ell_{ab_2} (k_a - k_{b_2})} \left( \frac{L}{\ell_{aa}} \right) + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L}}{\ell_{aa} \ell_{ab_2} (k_a - k_{b_2})^2}; \quad (7.68b)$$

en este caso diremos que el primer sumando de (7.68b) es de orden  $1/k\ell$  y lineal en  $L/\ell_{aa}$ , mientras que el segundo es de orden  $1/(k\ell)^2$ . Finalmente si en (7.68b)  $a = b_2$ , esta expresión se simplifica dando como resultado el siguiente término

$$\frac{1}{2!} \left( \frac{L}{\ell_{aa}} \right)^2, \quad (7.68c)$$

del cual diremos que es de orden  $1/(k\ell)^0$  y cuadrático en  $L/\ell_{aa}$

- La razón por la que nos interesa construir la contribución a orden más bajo en potencias inversas de  $k\ell$ , es que en el SWLA ésta será la que domine el comportamiento del valor esperado, siendo las contribuciones de orden superior correcciones al orden más bajo.

- Salvo el en caso del valor esperado de la amplitud de reflexión (ver sección 7.4.2), la contribución dominante de los observables que estudiaremos será  $1/(k\ell)^0$ .
- De las expresiones que se muestran en la ecuación (2.152) para los primeros cuatro órdenes en serie de Born de las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$ , podemos anticipar que los valores esperados de estas cantidades y sus correspondientes intensidades tendrán contribuciones tanto de canales abiertos como de canales cerrados.

Las cantidades que estudiaremos mediante la serie de Born serán las amplitudes  $t_{aa_0}$  y  $r_{aa_0}$ , los de las intensidades  $T_{aa_0}$  y  $R_{aa_0}$  de canales abiertos, es decir, con  $1 \leq a, a_0 \leq N$  y las *covarianzas* de las intensidades:

$$Cov(R_{aa_0}, R_{bb_0})_{k,L} = \langle R_{aa_0} R_{bb_0} \rangle_{k,L} - \langle R_{aa_0} \rangle_{k,L} \langle R_{bb_0} \rangle_{k,L}, \quad (7.69a)$$

$$Cov(T_{aa_0}, T_{bb_0})_{k,L} = \langle T_{aa_0} T_{bb_0} \rangle_{k,L} - \langle T_{aa_0} \rangle_{k,L} \langle T_{bb_0} \rangle_{k,L}, \quad (7.69b)$$

que en el caso particular  $R_{bb_0} = R_{aa_0}$  y  $T_{bb_0} = T_{aa_0}$  se reducen a las correspondientes *varianzas*:

$$Var(R_{aa_0})_{k,L} = \langle R_{aa_0}^2 \rangle_{k,L} - \langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}^2, \quad (7.70a)$$

$$Var(T_{aa_0})_{k,L} = \langle T_{aa_0}^2 \rangle_{k,L} - \langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}^2. \quad (7.70b)$$

Por comodidad en la notación, en lo que resta del presente Capítulo usaremos los índices  $a$ ,  $a_0$ ,  $b$  y  $b_0$  para denotar exclusivamente los canales abiertos de los observables de interés, mientras que los índices  $b_1$ ,  $b_2$ ,  $b_3$ , etc., denotarán índices de suma que podrán representar tanto canales abiertos como canales cerrados.

### 7.4.1. Valor esperado de la amplitud de trasmisión: $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$

Haciendo uso de la notación compacta de la serie de Born de  $t_{aa_0}$ , Ec. (2.151a), y del modelo estadístico del potencial definido en (7.16), obtenemos que, hasta cuarto orden en el potencial, el valor esperado  $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$  toma la siguiente expresión:

$$\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L} = \delta_{aa_0} + \langle (t_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} + \dots \quad (7.71)$$

A continuación obtendremos los valores esperados  $\langle (t_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  y  $\langle (t_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$ , lo que requiere hacer uso de la dependencia explícita de las contribuciones de segundo y cuarto orden de  $t_{aa_0}$ : ver ecuaciones (2.152b) y (2.152d). Algunos detalles de la obtención de estas dos contribuciones se muestran en el Apéndice C.

#### Segundo orden $\langle (t_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$

Usando el segundo momento (7.16b) en ecuación (2.152b) y realizar la integral correspondiente se obtiene:

$$\langle (t_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} = - \sum_{b_1=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1)\Gamma(b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1}\ell_{b_1a_0}}} C(ab_1, b_1a_0) e^{-i\frac{k_a-k_{a_0}}{2}L} \frac{\sin \frac{k_a-k_{a_0}}{2}L}{\frac{k_a-k_{a_0}}{2}} \quad (7.72)$$

Como es de esperar la ecuación (7.72) se reduce a la ecuación (7.20a) en el caso unidimensional.

Si en la ecuación (7.72) consideramos  $a = a_0$  obtenemos:

$$\langle (t_{aa})_2 \rangle_{k,L} = - \left[ \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1}} - i \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \frac{1}{\ell_{ab_1}} \right] L, \quad (7.73a)$$

mientras que al considerar  $a \neq a_0$  se obtiene:

$$\langle (t_{a \neq a_0})_2 \rangle_{k,L} = - \left[ \sum_{b_1=1}^N \frac{C(ab_1, b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1}\ell_{b_1a_0}}} - i \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \frac{C(ab_1, b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1}\ell_{b_1a_0}}} \right] e^{-i\frac{k_a-k_{a_0}}{2}L} \frac{\sin \frac{k_a-k_{a_0}}{2}L}{\frac{k_a-k_{a_0}}{2}}, \quad (7.73b)$$

donde hemos utilizado las ecuaciones (2.144) para evaluar los factores gamma y la ecuación (7.3) para simplificar los coeficientes de correlación de (7.73a).

De las expresiones de (7.73) nos damos cuenta de lo siguiente:

- Tanto en el caso  $a = a_0$  como en el caso  $a \neq a_0$  la ecuación (7.73) muestra una contribución *explícita de los canales cerrados*, que, como veremos más adelante, es de gran importancia en el valor esperado de las amplitudes no sólo en el régimen balístico, sino más allá de éste.
- El valor esperado del segundo orden  $\langle (t_{aa})_2 \rangle_{k,L}$  es de orden  $1/(k\ell)^0$ , mientras que  $\langle (t_{a \neq a_0})_2 \rangle_{k,L}$  es de orden  $1/(k\ell)^1$ ; además, como resultado de las simulaciones numéricas basadas en el modelo descrito en la sección 6.4.1 sabemos que los coeficientes de correlación que aparecen en (7.73b) son mucho menores que los que aparecen en (7.73a); por estas dos razones  $\langle t_{a \neq a_0} \rangle_{k,L}$  será despreciable con respecto a  $\langle t_{aa} \rangle_{k,L}$ .

Usando las siguientes cantidades:

$$\frac{1}{\ell_{a-}} = \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1}}, \quad (7.74a)$$

$$\frac{1}{\ell'_{a-}} = \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \frac{1}{\ell_{ab_1}}, \quad (7.74b)$$

podemos escribir la ecuación (7.73a) de la siguiente manera:

$$\langle (t_{aa})_2 \rangle_{k,L} = - \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right) + i \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right) \quad (7.75)$$

La ecuación (7.74a) tiene el mismo significado que la definición hecha en (5.28), mientras que (7.74b) es la correspondiente extensión de canales cerrados.

#### Cuarto Orden $\langle (t_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$

Usando el cuarto momento (7.16d) en ecuación (2.152d) y realizar las integrales correspondientes se obtiene:

$$\begin{aligned} \langle (t_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} = & \sum_{b_1, b_2, b_3=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1b_2) \Gamma(b_2b_3) \Gamma(b_3a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1b_2} \ell_{b_2b_3} \ell_{b_3a_0}}} \times \\ & \left\{ C(ab_1, b_1b_2) C(b_2b_3, b_3a_0) \times \right. \\ & \left[ \frac{1}{k_{a_0} - k_{b_2}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{-k_a + k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L}}{k_a - k_{b_2}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{k_a + k_{b_2}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_2})L}}{k_{a_0} + k_{b_2}} \right) \right] \\ & + C(ab_1, b_2b_3) C(b_1b_2, b_3a_0) \times \\ & \left[ \frac{1}{-k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i[k_a - k_{b_1} - k_{b_2} - k_{b_3}]L}}{-k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3})L}}{k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \right] \\ & + C(ab_1, b_3a_0) C(b_1b_2, b_2b_3) \times \\ & \left[ \frac{1}{k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{b_1} + k_{b_3})L}}{k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{k_{b_1} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_3})L}}{-k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (7.76)$$

Como es de esperar la ecuación (7.76) se reduce a la ecuación (7.20b) en el caso unidimensional.

En la ecuación (7.76) hemos usado la convención definida en la sección 2.6.1, de tal manera que si  $b_1$  es un índice de canal cerrado, entonces  $k_{b_1} \rightarrow i\kappa_{b_1}$ . Al igual que la contribución de segundo orden, Ec. (7.72), la contribución de cuarto orden, Ec. (7.76), tiene contribuciones de canales cerrados, pero ahora esta contribución no sólo aparece a través de los caminos libres medios sino también a través de los factores de atenuación  $\kappa_{b_1}$ .

Es importante hacer notar los siguientes puntos con respecto a la contribución de los canales cerrados en  $\langle (t_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$  y en general a cualquier orden par  $\langle (t_{aa_0})_{2p} \rangle_{k,L}$ :

- Es fácil verificar que todas las exponenciales complejas que involucran algún índice de suma  $b_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) son de la forma  $e^{ik_{b_i}L}$ . Cuando estos índices de suma son de canales cerrados debemos reemplazar  $k_{b_i}$  por  $i\kappa_{b_i}$ , lo que tiene como consecuencia que las exponenciales complejas  $e^{ik_{b_i}L}$  se reemplacen por *exponenciales reales decrecientes*  $e^{-\kappa_{b_i}L}$ ; por lo tanto, estas contribuciones de canales cerrados decrecen exponencialmente con la longitud del sistema  $L$ .
- Además de aparecer en las exponenciales decrecientes  $e^{-\kappa_{b_i}L}$ , los factores de atenuación  $\kappa_{b_i}$  aparecen en los denominadores que divide a dichas exponenciales. Debido a que estos denominadores (que involucran factores  $\kappa_{b_i}$ ) nunca se anulan, el orden más bajo en potencias inversas de  $k\ell$  de este tipo de términos es a lo menos  $1/(k\ell)^1$ ; por lo tanto, las contribuciones de canales cerrados que involucran factores  $\kappa_{b_i}$  no sólo decrecen exponencialmente con la longitud  $L$  sino que también son de orden  $1/(k\ell)^1$  o  $1/(k\ell)^2$ .
- Por otro lado las contribuciones de canales cerrados que involucren factores  $\kappa_{b_i}$  tiene por factores coeficientes de correlación, que por evidencia numérica, sabemos que son mucho menores que uno.
- Debido a los tres puntos anteriores toda contribución de canales cerrados al cuarto orden  $\langle\langle t_{aa} \rangle\rangle_{k,L}$  que involucre factores de atenuación  $\kappa_{b_i}$  será despreciable con respecto a las contribuciones de canales cerrados que no dependan de la cantidad  $\kappa_{b_i}$ ; dicha contribución la obtendremos a continuación.

De nuestras simulaciones numéricas sabemos que todos los coeficientes de correlación que aparecen en (7.76) son muy pequeños comparados con uno, excepto cuando  $a = a_0$ , pues en este caso hay algunos que valen 1. Por estas razón pondremos nuestra atención en este caso. Por otro lado, de las discusiones hechas en el párrafo anterior sabemos que, aún en el caso  $a = a_0$ , las contribuciones de canales cerrados al cuarto orden son por lo menos de orden  $1/k\ell$ ; sin embargo, lo anterior también es cierto para la mayoría de las contribuciones de canales abiertos excepto la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ , que será la contribución dominante.

La contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  del cuarto orden  $\langle\langle t_{aa} \rangle\rangle_{k,L}$  se obtiene al considerar  $a = a_0$  en la ecuación (7.76) y de la primera suma sobre los índices  $b_1$ ,  $b_2$  y  $b_3$  extraer el término  $b_2 = a$ . Al hacer lo anterior obtenemos:

$$\begin{aligned}
\langle\langle t_{aa} \rangle\rangle_{k,L} &= \frac{1}{2!} \left[ \sum_{b_1=1}^N \sum_{b_3=1}^N \binom{L}{\ell_{ab_1}} \binom{L}{\ell_{ab_3}} + e^{-i\pi/2} \sum_{b_1=1}^N \sum_{b_3=N+1}^{\infty} \binom{L}{\ell_{ab_1}} \binom{L}{\ell_{ab_3}} \right. \\
&\quad \left. + e^{-i\pi/2} \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \sum_{b_3=1}^N \binom{L}{\ell_{ab_1}} \binom{L}{\ell_{ab_3}} - \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \sum_{b_3=N+1}^{\infty} \binom{L}{\ell_{ab_1}} \binom{L}{\ell_{ab_3}} \right] \\
&\quad + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)
\end{aligned} \tag{7.77}$$

donde hemos utilizado las ecuaciones (2.144) para evaluar los factores gamma y la ecuación (7.3) para simplificar los correspondientes coeficientes de correlación. Si en (7.77) usamos las definiciones de (7.74) obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle (t_{aa})_4 \rangle_{k,L} &= \frac{1}{2!} \left[ \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right)^2 - 2i \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right) \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right) - \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right)^2 \right] \\ &\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right) \end{aligned} \quad (7.78)$$

La ecuación (7.78) nos da la contribución dominante en potencias de  $1/k\ell$  del cuarto orden  $\langle (t_{aa})_4 \rangle_{k,L}$ . A diferencia del segundo orden, Ec. (7.75), en (7.78) hay una contribución explícita de los canales cerrado no sólo en la parte imaginaria sino también en la parte real.

### Comparación de la serie Born con la simulación numérica

Al sustituir las ecuaciones (7.72) y (7.76) en la ecuación (7.71) se obtiene la serie de Born, hasta cuarto orden en el potencial, del valor esperado de la amplitud de transmisión  $\langle t_{aa0} \rangle_L$ :

$$\begin{aligned} \langle t_{aa0} \rangle_L &= \delta_{aa0} - \left[ \sum_{b_1=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}}} C(ab_1, b_1a_0) \right] \times \\ &\quad e^{-i(k_a - k_{a_0})L/2} \frac{\sin \frac{k_a - k_{a_0}}{2} L}{\frac{k_a - k_{a_0}}{2}} + \sum_{b_1, b_2, b_3=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1b_2) \Gamma(b_2b_3) \Gamma(b_3a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1b_2} \ell_{b_2b_3} \ell_{b_3a_0}}} \times \\ &\quad \left\{ C(ab_1, b_1b_2) C(b_2b_3, b_3a_0) \left[ \frac{1}{k_{a_0} - k_{b_2}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{-k_a + k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L}}{k_a - k_{b_2}} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{k_a + k_{b_2}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_2})L}}{k_{a_0} + k_{b_2}} \right) \right] \\ &\quad + C(ab_1, b_2b_3) C(b_1b_2, b_3a_0) \times \\ &\quad \left[ \frac{1}{-k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_1} - k_{b_2} - k_{b_3})L}}{-k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3})L}}{k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \right] \\ &\quad + C(ab_1, b_3a_0) C(b_1b_2, b_2b_3) \times \\ &\quad \left[ \frac{1}{k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{b_1} + k_{b_3})L}}{k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{k_{b_1} + k_{b_3}} \left( \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_3})L}}{-k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \right] \Big\} \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (7.79)$$

Por los argumentos que expusimos anteriormente, la ecuación anterior da un resultado para  $\langle t_{a \neq a_0} \rangle_{k,L}$  cuya contribución dominante es de orden  $1/k\ell$ , mientras que la

de  $\langle t_{aa} \rangle_{k,L}$  es de orden  $1/(k\ell)^0$ ; por lo tanto, la ecuación (7.79) se puede escribirse en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\langle t_{aa0} \rangle_{k,L} = \delta_{aa0} \left\{ \left[ 1 - \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right) + \frac{1}{2!} \left[ \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right)^2 - \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right)^2 \right] + \dots \right] + i \left[ \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right) - \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right) \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right) + \dots \right] \right\} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \quad (7.80)$$

donde hemos utilizado las expresiones (7.75) y (7.78). En el último renglón de la ecuación (7.80) hemos agrupado contribuciones tanto de canales abiertos como de canales cerrados. A diferencia del caso unidimensional, Ec. (7.22), la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$  de la parte imaginaria de  $\langle t_{aa0} \rangle_{k,L}$  es de orden  $1/(k\ell)^0$ , lo que se debe a la contribución explícita de los canales cerrados.

Consideremos el caso en el que la guía admite un canal abierto  $N = 1$ . Por supuesto, el número de canales cerrados es infinito, pero con el objeto de hacer una comparación con resultados numéricos, consideremos dos canales cerrados. En la figura 7.15 comparamos la contribución dominante (en potencias inversas de  $k\ell$ ) que obtuvimos teóricamente para  $Re \langle t_{11} \rangle_{k,L}$  [primer renglón de ecuación (7.80)] con el resultado de la simulación numérica. En este caso observamos que los términos que hemos utilizado para la curva teórica son suficientes para dar un buen acuerdo con la curva numérica en el régimen balístico.

Análogamente, en la figura 7.16 comparamos el resultado teórico  $Im \langle t_{11} \rangle_{k,L}$ , [segundo renglón de ecuación (7.80)] con el resultado de la simulación numérica. En este caso observamos las dos curvas tiene un buen acuerdo cerca de  $L = 0$ , pero conforme el valor de  $L$  aumenta se empiezan a separar; esto se puede deber a dos razones:

1. Que no estemos considerando en suficiente número términos en la contribución dominante y que la primera corrección sea relevante. Recordemos que en el caso unidimensional [ver ecuaciones (7.20)-(7.22), (7.35b) y figuras 7.4-7.5] obtuvimos un buen acuerdo entre la curva teórica y la numérica hasta que incluimos el sexto orden de la serie de Born e identificamos los primeros términos en potencias de  $L/\ell$  de la contribución dominante  $1/k\ell$  y los correspondientes términos de la primera corrección de orden  $1/(k\ell)^2$ .
2. Que pueda tratarse de una manifestación del comportamiento asintótico de la serie.

### La contribución dominante en el SWLA sin canales cerrados

Al igual que el caso unidimensional, en el caso multicanal podemos obtener toda la serie de potencias en  $L$  de la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  del valor esperado  $\langle t_{aa} \rangle_{k,L}$ .

Usando el modelo estadístico (7.16) y la ecuación (2.150a), obtenemos toda la serie de  $\langle t_{aa} \rangle_{k,L}$ , siendo ésta:

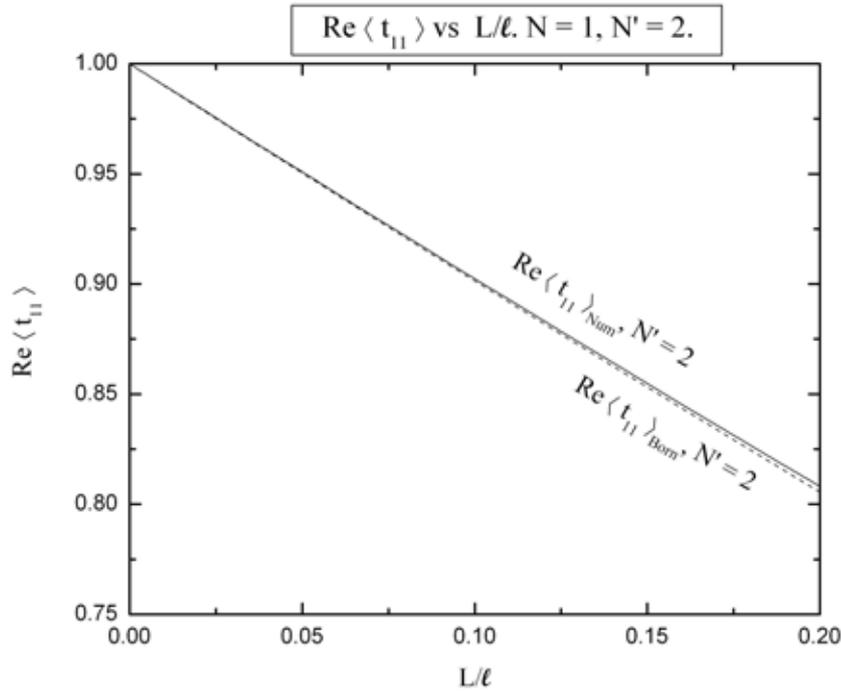


Figura 7.15:  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{\text{Born}}$  [curva punteada, primer renglón de (7.80)] y la simulación numérica  $\text{Re} \langle t_{11} \rangle_{\text{Num}}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

$$\langle t_{aa} \rangle_{k,L} = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \langle (t_{aa})_{2p} \rangle_{k,L} \quad (7.81)$$

donde hemos definido el valor esperado del término de orden  $2p$  como:

$$\begin{aligned} \langle (t_{aa})_{2p} \rangle_{k,L} &= (-1)^p \sum_{b_1, b_2, \dots, b_{2p-2}, b_{2p-1}=1}^{\infty} \int_0^L \cdots \int_0^L f_{2p; a, b_1, \dots, b_{2p-1}, a}(x_1, x_2, \dots, x_{2p-1}, x_{2p}) \times \\ &\langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1 b_2}(x_2) \cdots \tilde{\mathcal{V}}_{b_{2p-2} b_{2p-1}}(x_{2p-1}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_{2p-1} a}(x_{2p}) \rangle dx_1 \cdots dx_{2p} \end{aligned} \quad (7.82)$$

siendo  $f_{2p; a, b_1, \dots, b_{2p-1}, a}(x_1, \dots, x_{2p})$  la función de  $2p$  coordenadas definida de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} f_{2p; a, b_1, \dots, b_{2p-1}, a}(x_1, \dots, x_{2p}) &= \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{g}_0(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{g}_0(k_{b_2}; x_2 - x_3) \cdots \\ &\tilde{g}_0(k_{b_{2p-1}}; x_{2p-1} - x_{2p}) \varphi_+(k_{a_0}; x_{2p}) \end{aligned} \quad (7.83)$$

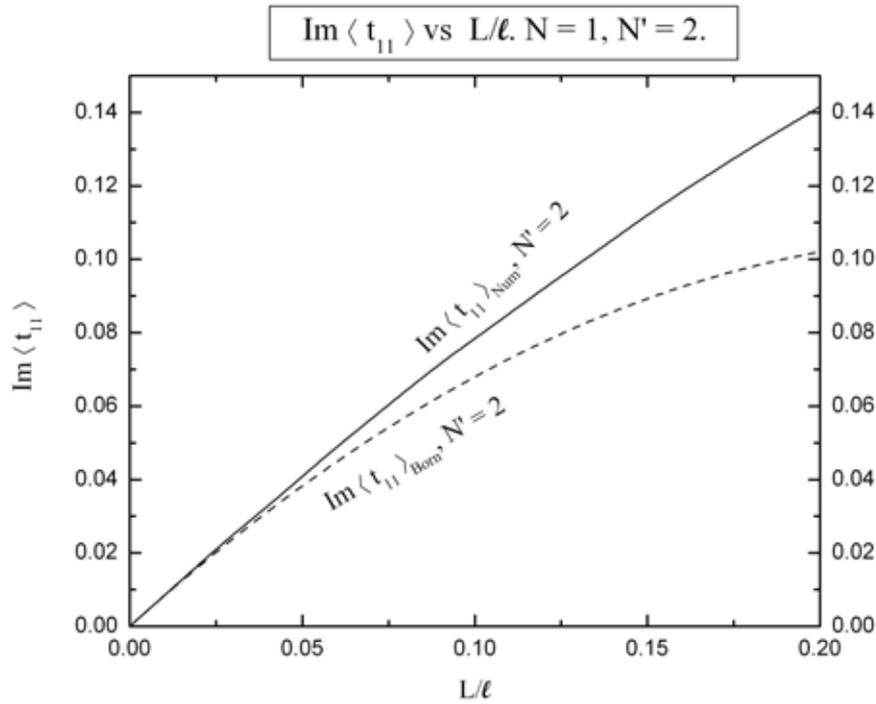


Figura 7.16:  $Im \langle t_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $Im \langle t_{11} \rangle_{Born}$  [curva punteada, segundo renglón de (7.80)] y la simulación numérica  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

Usando el modelo de estadístico del potencial obtenemos:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \tilde{\mathcal{V}}_{ab_1}(x_1) \tilde{\mathcal{V}}_{b_1 b_2}(x_2) \cdots \tilde{\mathcal{V}}_{b_{2p-2} b_{2p-1}}(x_{2p-1}) \tilde{\mathcal{V}}_{b_{2p-1} a}(x_{2p}) \right\rangle \quad (7.84) \\
 = & \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1 b_2) \Gamma(b_2 b_3) \cdots \Gamma(b_{2p-1} b_{2p-1}) \Gamma(b_{2p-1} a)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 b_2} \ell_{b_2 b_3} \cdots \ell_{b_{2p-2} b_{2p-1}} \ell_{b_{2p-1} a}}} \left\{ \right. \\
 & C(ab_1, b_1 b_2) C(b_2 b_3, b_3 b_4) \cdots C(b_{2p-2} b_{2p-1}, b_{2p-1} a) \left[ \right. \\
 & \left. \left. \delta(x_1 - x_2) \delta(x_3 - x_4) \cdots \delta(x_{2p-1} - x_{2p}) \right] + \text{todas las combinaciones} \right\}.
 \end{aligned}$$

En la ecuación (7.84) únicamente hemos escrito explícitamente la contribución que nos interesa analizar, pues será de ésta que obtendremos la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ . Los términos que hemos agrupado en la frase “todas las combinaciones”, darán lugar a contribuciones que serán de orden  $1/k\ell$  o superior. Al sustituir la expresión (7.84) en la ecuación (7.82) obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \langle (t_{aa})_{2p} \rangle_{k,L} &= (-1)^p \sum_{b_1, b_2, \dots, b_{2p-2}, b_{2p-1}}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1 b_2) \cdots \Gamma(b_{2p-2} b_{2p-1}) \Gamma(b_{2p-1} a)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 b_2} \ell_{b_2 b_3} \cdots \ell_{b_{2p-2} b_{2p-1}} \ell_{b_{2p-1} a}}} \\
 &\left\{ C(ab_1, b_1 b_2) C(b_2 b_3, b_3 b_4) \cdots C(b_{2p-2} b_{2p-1}, b_{2p-1} a) \left[ \int_0^L \cdots \int_0^L f_{2p; a, b_1, \dots, b_{2p-1}, a}(x_1, x_1 \cdots, x_p, x_p) dx_1 \cdots dx_p \right] + \cdots \right\}. \quad (7.85)
 \end{aligned}$$

Como resultado de evaluar las funciones delta, el número de variables de integración en (7.85) se reduce de  $2p$  a  $p$ , que por comodidad hemos renombrado.

Usando la definición (7.83), obtenemos que la función de  $2p$  coordenadas (ahora de  $p$  coordenadas) que hemos escrito en (7.85) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 f_{2p; a, b_1, \dots, b_{2p-1}, a}(x_1, \dots, x_p) &= \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{g}_0(k_{b_2}; x_1 - x_2) \tilde{g}_0(k_{b_4}; x_2 - x_3) \cdots \\
 &\tilde{g}_0(k_{b_{2p-2}}; x_{p-1} - x_p) \varphi_+(k_a; x_p) \quad (7.86)
 \end{aligned}$$

Notemos que en (7.86) sólo aparecen índices de suma  $b_i$  cuyos subíndices son pares, ya que al evaluar las funciones delta, los argumentos de todas las funciones de Green en las que aparecían índices de suma con subíndices impares se anularon.

Debido a que en (7.86) aparecen funciones de Green cuyos argumentos dependen de valores absolutos, la región de integración de

$$\int_0^L \cdots \int_0^L f_{2p; a, b_1, \dots, b_{2p-1}, a_0}(x_1, x_1 \cdots, x_p, x_p) dx_1 \cdots dx_p \quad (7.87)$$

se romperá en varias subregiones dependiendo de las relaciones de orden que haya entre las  $p$  variables de integración. La relación de orden que es de nuestro interés es  $x_1 > x_2 > \cdots > x_p$ , ya que está dará la contribución buscada.

Una vez discutidos los puntos anteriores, identifiquemos la contribución deseada. Lo anterior se hace al ignorar la contribución de los canales cerrados en la suma que hemos escrito explícitamente en la ecuación (7.85) (por lo que todos los factores gama son uno y los índices de suman toman valores de 1 a  $N$ ), tomar los términos en los que todos los índices de suma  $b_2, b_4, \dots, b_{2p-2} = a$  (por lo que todos los coeficientes de correlación son uno) y considerar la subregión de integración definida por la siguiente desigualdad  $x_1 > x_2 > \cdots > x_p$ . De esta manera obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \langle (t_{aa})_{2p} \rangle_{k,L} &= (-1)^p \left\{ \sum_{b_1, b_3, \dots, b_{2p-1}=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1} \ell_{ab_3} \cdots \ell_{ab_{2p-1}}} \times \right. \\
 &\left[ \int_0^L \int_0^{x_1} \cdots \int_0^{x_{p-2}} \int_0^{x_{p-1}} dx_p dx_{p-1} \cdots dx_2 dx_1 + \cdots \right] + \cdots \left. \right\} \\
 &= (-1)^p \frac{1}{\ell_a^p} \frac{L^p}{p!} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \quad (7.88)
 \end{aligned}$$

Todas las contribuciones que no hemos considerado explícitamente en (7.88) son por lo menos de orden  $1/k\ell$ , ya que al menos una exponencial compleja aparece en la correspondiente integral. Al sustituir la ecuación (7.88) en (7.85) y lo que resulte en (7.81), se obtiene:

$$\langle t_{aa} \rangle_{k,L} = e^{-L/\ell_a} + \left( \frac{1}{k\ell} \right); \quad (7.89)$$

por lo tanto, al tomar el límite  $k\ell \rightarrow \infty$  se recupera el resultado que predice la ecuación de difusión del SWLA: ver ecuación (5.27c).

Hay que aclarar que, tanto (5.27c) como (7.89) desprecian la contribución de los canales cerrados: por un lado, la ecuación (5.27c) es solución de la ecuación de difusión, la cual se construyó multiplicando matrices de transferencia reducidas o de canales abiertos, Ec. (2.49b), en vez de las extendidas, (2.96b), procedimiento que no toma en cuenta transiciones a canales cerrados: ver secciones 2.5.1 y 2.5.3, respectivamente; por otro lado, en la ecuación (7.89) hemos despreciado la contribución de los canales cerrados.

Si bien, mediante la serie de Born, hemos reproducido el resultado que obtuvimos para este valor esperado mediante la ecuación de difusión, hasta el momento hemos mostrado que los canales cerrados sí contribuyen en este observable, pues como mostramos en las ecuaciones (7.75) y (7.78), el segundo  $\langle (t_{aa})_2 \rangle_{k,L}$  y cuarto orden  $\langle (t_{aa})_4 \rangle_{k,L}$ , tiene contribuciones explícitas de los canales cerrados a orden  $1/(k\ell)^0$ ; además, como mostramos en la figura 7.15 al tomar en cuenta la contribución de canales cerrados, el acuerdo entre el resultado teórico de la serie de Born y los resultados numéricos es muy bueno. Por último, en la figura (7.17) se observa que la contribución de canales cerrados es muy importante no sólo en el régimen balístico, sino más allá de éste.

### Contribución de los canales cerrados más allá del régimen balístico

Si bien la serie de Born únicamente es válida en el régimen balístico, los resultados numéricos que obtuvimos son válidos más allá de éste, ya que son el resultado de resolver la ecuación de Schrödinger para cada realización del desorden microscópico, obteniendo así la matriz de dispersión de cada realización. Lo anterior nos permitió conocer, numéricamente, el valor esperado de cantidades relacionadas con los elementos de la matriz de dispersión.

En el caso particular de un canal abierto ( $N = 1$ ) obtuvimos, más allá del régimen balístico, el comportamiento numérico de  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  y de  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  considerando  $N' = 0$ ,  $N' = 1$  y  $N' = 2$  canales cerrados. Los resultados se muestran en las figuras 7.17 y 7.18, respectivamente.

**Valor esperado numérico  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$ .** En la figura 7.17 graficamos el valor esperado  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  considerando  $N' = 0$ , 1 y 2 canales cerrados. De dicha figura observamos los siguientes puntos:

- De la figura 7.17 nos damos cuenta que al considerar más canales cerrados la cantidad  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  decrece más rápidamente que el atenuamiento exponencial

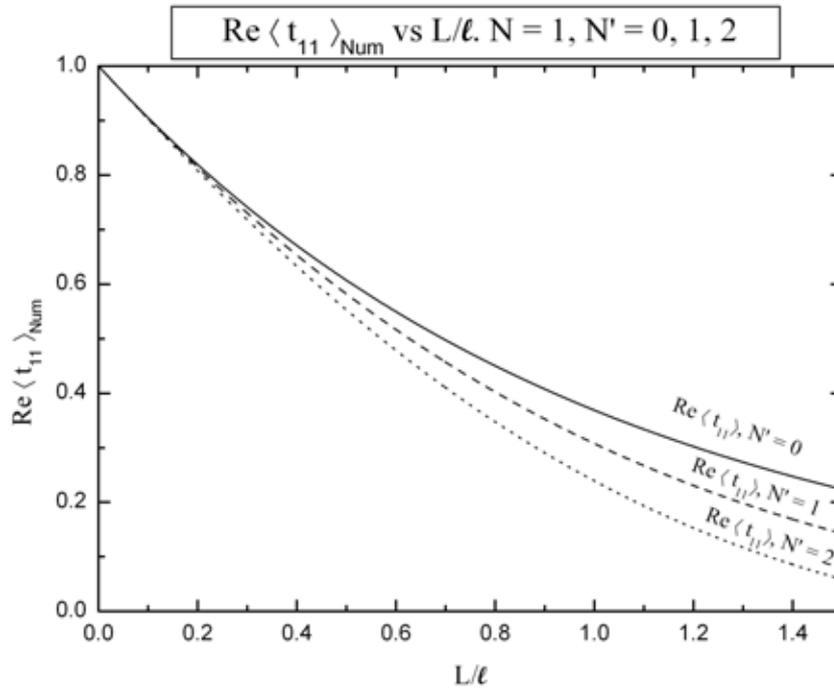


Figura 7.17:  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

que predice la ecuación de difusión, el cual corresponde a la curva continua con  $N' = 0$ .

- La curva continua no toma en cuenta los canales cerrados ( $N' = 0$ ), por lo que es la misma curva que la del caso unidimensional, Fig. 7.1. Esto es cierto, pues la simulación unidimensional se realizó usando el parámetro  $k\ell = 100$ , mientras que la simulación multicanal con  $N = 1$  “que ignora canales cerrados ( $N' = 0$ )”, se realizó con  $k_1 \ell_{11} = 100$  (en este caso  $\ell = \ell_{11} = \ell_{1-}$ ). Ambas curvas coinciden con la predicción teórica en el SWLA [ver ecuaciones (5.27c) y (7.89)], pues en ambos casos la contribución dominante es independiente de  $k$ .
- La curva de puntos de la figura 7.17 corresponde a la misma simulación que presentamos en la figura 7.15, pero en un intervalo más grande de  $L/\ell$ . En aquella figura mostramos que al tomar en cuenta el mismo número de canales cerrados ( $N' = 2$ ), tanto teóricamente como numéricamente, obtenemos un buen acuerdo entre el resultado teórico, Ec. (7.80), y la curva numérica, es decir, que la serie de Born predice correctamente la contribución de los canales cerrados, al menos en el régimen balístico. Si bien la serie de Born únicamente da predicciones en el régimen balístico, sí permite inferir que el comportamiento de  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  tam-

bién tendrá contribuciones importantes de los canales cerrados fuera del régimen balístico, lo cual es consistente con los resultados numéricos de la figura 7.17.

- De estos resultados podemos concluir que las contribución de los canales cerrados en  $Re \langle t_{11} \rangle_{Num}$  son importantes para todo valor  $L/\ell$  y *no se pueden despreciar para este observable*.

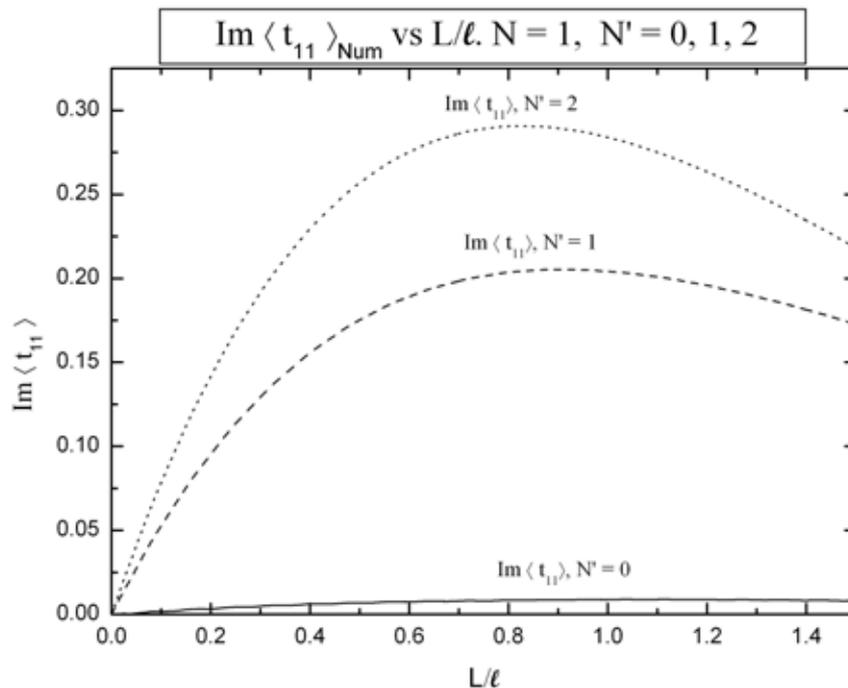


Figura 7.18:  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

**Valor esperado numérico  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$ .** En la figura 7.18 graficamos el valor esperado  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  para  $N' = 0, 1$  y  $2$  canales cerrados. De dicha figura observamos los siguientes puntos:

- De la figura 7.18 nos damos cuenta que la contribución de los canales cerrados es de *gran relevancia*, pues la curva que no considera canales cerrados (línea continua,  $N' = 0$ ) y las dos curvas que sí consideran canales cerrados (línea de segmentos,  $N' = 1$  y línea de puntos  $N' = 2$ ) difieren en un orden de magnitud. Lo anterior se entiende cualitativamente, al menos en el régimen balístico, ya que en el caso unidimensional demostramos que la contribución dominante es de orden  $1/k\ell$  [ver

ecuación (7.35b) y figuras 7.4-7.5], mientras que en el caso multicanal la contribución dominante es de orden  $1/(k\ell)^0$  y ésta se debe a la contribución de los canales cerrados [ver ecuación (7.80) y figura 7.16].

- Por las mismas razones que explicamos para la parte real, Fig 7.17, la curva continua de la figura 7.18 ( $N' = 0$ ) es la misma curva que la del caso unidimensional: ver figura 7.4.
- La curva de puntos corresponde a la misma simulación que presentamos en la figura 7.16, pero en un intervalo más grande de  $L/\ell$ . En aquella figura comparamos el resultado teórico, Ec. (7.80), y el numérico para dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). A diferencia de la parte real, la curva teórica de la parte imaginaria no muestra un acuerdo tan bueno con la correspondiente curva numérica. Lo anterior se puede deber a que no tenemos el suficiente número de términos de la contribución de  $1/(k\ell)^0$  ni las primeras correcciones de orden  $1/k\ell$ , pues en el caso multicanal sólo calculamos la serie de Born hasta cuarto orden. Recordemos que en el caso unidimensional sólo logramos un buen acuerdo entre la curva teórica y la numérica hasta que obtuvimos el sexto orden, lo que nos permitió tener los primeros términos de la contribución de orden  $1/k\ell$  y las primeras correcciones de orden  $1/(k\ell)^2$ ; aún así, la serie de Born, sí nos permite inferir que el comportamiento de  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  no sólo tendrá contribuciones importantes de los canales cerrados en el régimen balístico, lo cual es consistente con los resultados numéricos de la figura 7.18.
- En la figura 7.18 observamos que  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  crece con  $L/\ell$  hasta llegar a un valor máximo y posteriormente decrece. Mientras más canales cerrados consideremos  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  crece más rápidamente y alcanza un máximo más grande; sin embargo, al comparar el máximo de  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  con  $N' = 0$  con el de  $N' = 1$  y éste a su vez con el de  $N' = 2$ , nos damos cuenta que la diferencia entre máximos de una curva a la siguiente disminuye conforme aumenta el número de canales cerrados que se consideran. Lo anterior nos hace pensar que al aumentar el número de canales cerrados la curva numérica tenderá a una “curva ideal” en la que el número de canales cerrados es infinito.
- De los punto discutidos anteriormente podemos concluir que las contribución de los canales cerrados en  $Im \langle t_{11} \rangle_{Num}$  son importantes para todo valor  $L/\ell$  y *no se pueden despreciar para este observable*.

Como verificación realizamos la simulación numérica del caso unidimensional tomando  $k\ell = 100$  y la del caso cuasi-unidimensional tomando  $k_1\ell_{11} = 100$  obteniendo, tanto para la parte real como para la imaginaria, que los resultados de ambas simulaciones son indistinguibles.

### 7.4.2. Valor esperado de la amplitud de reflexión $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$

La manera en que se aborda el cálculo del valor esperado  $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$  es análoga a la que usamos para  $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$ , por lo que usaremos los mismos argumentos de la sección 7.4.1.

A diferencia del valor esperado de la amplitud de transmisión para  $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$  no sabemos obtener toda la serie de la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$ ; por lo tanto, para este observable sólo obtendremos el valor esperado de la serie de Born hasta cuarto orden. Usando la notación compacta (2.151b) y el modelo estadístico definido en (7.16) se obtiene:

$$\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L} = \langle (r_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} + \langle (r_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} + \dots \quad (7.90)$$

Para calcular las cantidades  $\langle (r_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  y  $\langle (r_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$  se necesitan las expresiones explícitas del segundo y cuarto orden: ver ecuaciones (2.152f) y (2.152h).

### Segundo orden $\langle (r_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$

Al usar la ecuación (7.16b) en la ecuación (2.152f), obtenemos que el valor esperado del segundo orden es:

$$\langle (r_{aa_0})_2 \rangle = - \sum_{b_1=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}}} C(ab_1, b_1a_0) i \frac{e^{i(k_a+k_{a_0})L} - 1}{k_a + k_{a_0}}. \quad (7.91)$$

Como es de esperar la ecuación (7.91) se reduce a la ecuación (7.51a) en el caso unidimensional.

Si en la ecuación (7.91) consideramos  $a = a_0$  obtenemos:

$$\langle (r_{aa})_2 \rangle = - \left( \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1}} - i \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \frac{1}{\ell_{ab_1}} \right) i \frac{e^{2ik_a L} - 1}{2k_a}, \quad (7.92a)$$

mientras que si  $a \neq a_0$  se obtiene:

$$\langle (r_{aa_0})_2 \rangle = - \left( \sum_{b_1=1}^N \frac{C(ab_1, b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}}} - i \sum_{b_1=N+1}^{\infty} \frac{C(ab_1, b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}}} \right) i \frac{e^{i(k_a+k_{a_0})L} - 1}{k_a + k_{a_0}} \quad (7.92b)$$

donde hemos utilizado las ecuaciones (2.144) para evaluar los factores gama y la ecuación (7.3) para simplificar los coeficientes de correlación de (7.92a).

De las expresiones de (7.92) nos damos cuenta de los siguientes puntos

- Tanto en el caso  $a = a_0$  como en el caso  $a \neq a_0$  la ecuación (7.92) muestra una contribución *explícita de los canales cerrados*, que, como veremos más adelante, será importante no sólo en el régimen balístico.
- Tanto en el caso  $a = a_0$  como en el caso  $a \neq a_0$  la contribución dominante es de orden  $1/k\ell$ ; sin embargo, por las mismas razones que explicamos para la amplitud de transmisión,  $\langle r_{a \neq a_0} \rangle_{k,L}$  será despreciable con respecto a  $\langle r_{aa} \rangle_{k,L}$ .

Usando las cantidades definidas en (7.74), podemos escribir (7.92a) en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \langle (r_{aa})_2 \rangle_{k,L} &= \left( \frac{1}{\ell_{a-}} - i \frac{1}{\ell'_{a-}} \right) i \frac{e^{2ik_a L} - 1}{2k_a} \\
 &= \frac{i}{k_a \ell_{a-}} \left( 1 - i \frac{\ell_{a-}}{\ell'_{a-}} \right) \frac{e^{2ik_a L} - 1}{2}
 \end{aligned} \tag{7.93}$$

La ecuación (7.93) se ha expresado como una serie en potencias inversas de  $k_a \ell_{a-}$ , que de acuerdo con la convención definida al inicio de la sección 7.4 [ver ecuación (7.68) y su correspondiente explicación], podemos decir que es de orden  $1/k\ell$ . Este será el orden dominante en potencias inversas de  $k\ell$ , pues este valor esperado no tiene contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  de este observables.

#### Cuarto orden $\langle (r_{aa0})_4 \rangle_{k,L}$

La obtención del valor esperado del cuarto orden  $\langle (r_{aa0})_4 \rangle_{k,L}$  es análoga a la de  $\langle (t_{aa0})_4 \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.76); es decir, debemos utilizar el cuarto momento del potencial (7.16d) y la ecuación (2.152h) obteniendo así:

$$\begin{aligned}
 \langle (r_{aa0})_4 \rangle_{k,L} &= \sum_{b_1, b_2, b_3=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1 b_2) \Gamma(b_2 b_3) \Gamma(b_3 a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 b_2} \ell_{b_2 b_3} \ell_{b_3 a_0}}} \left\{ \right. \\
 &C(ab_1, b_1 b_2) C(b_2 b_3, b_3 a_0) \times \left[ \right. \\
 &\frac{1}{k_{a_0} - k_{b_2}} \left( -\frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} + \frac{-1 + e^{i(k_a + k_{b_2})L}}{k_a + k_{b_2}} \right) \\
 &+ \frac{1}{k_a - k_{b_2}} \left( -\frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} + \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_2})L}}{k_{a_0} + k_{b_2}} \right) \left. \right] \\
 &+ C(ab_1, b_2 b_3) C(b_1 b_2, b_3 a_0) \times \left[ \right. \\
 &\frac{1}{-k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3})L}}{k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \\
 &+ \frac{1}{-k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3})L}}{k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \left. \right] \\
 &+ C(ab_1, b_3 a_0) C(b_1 b_2, b_2 b_3) \times \left[ \right. \\
 &\frac{1}{k_a + k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_3}} \left( -\frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} + \frac{-1 + e^{i(k_{b_1} + k_{b_3})L}}{k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \\
 &+ \frac{1}{k_{b_1} + k_{b_3}} \left( \frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3})L}}{k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \left. \right] \left. \right\}.
 \end{aligned} \tag{7.94}$$

Como es de esperar la ecuación (7.94) reduce a la ecuación (7.51b) en el caso unidimensional.

De la ecuación (7.94) nos damos cuenta de los siguientes puntos:

- Al igual que en la ecuación (7.76) en la ecuación (7.94) hemos utilizado convención definida en la sección 2.6.1, es decir, si  $b_i$  es un índice de canal cerrado, entonces  $k_{b_i} \rightarrow i\kappa_{b_i}$ , lo que tiene como consecuencia que las contribuciones de canales cerrados que involucren factores de atenuación  $\kappa_{b_i}$  sean de orden  $1/(k\ell)^2$  y/o decrezcan exponencialmente con la longitud  $L$  del sistema; por esta razón, este tipo de contribuciones de los canales cerrados serán despreciables con respecto a la contribución dominante, que en este caso es  $1/k\ell$ .
- Si en la ecuación (7.94) consideramos el caso  $a \neq a_0$  todos las contribuciones, tanto de canales abiertos como de canales cerrados, son de orden  $1/(k\ell)^2$ ; además, los coeficientes de correlación que aparecen son despreciables con respecto a uno; por estas dos razones, la cantidad  $\langle r_{a \neq a_0} \rangle_{k,L}$  será despreciable con respecto a  $\langle r_{a \neq a_0} \rangle_{k,L}$ , por lo que sólo analizaremos el caso  $a = a_0$ .

Por las razones que acabamos de explicar las que explicamos al inicio de la sección 7.4, del cuarto orden (7.94) sólo nos interesa la contribución de orden  $1/k\ell$ , la cual obtenemos de la siguiente manera:

1. En el primer paréntesis cuadrado consideramos el caso  $a = a_0$ ,  $b_2 = a$  y sumamos sobre los índices  $b_1$  y  $b_3$ , obtenemos la siguiente contribución:

$$-i \frac{L}{k_a} \left( \frac{1}{\ell_{a-}^2} - 2i \frac{1}{\ell_{a-} \ell'_{a-}} - \frac{1}{\ell_{a-}'^2} \right) e^{2ik_a L} \quad (7.95a)$$

2. En el tercer paréntesis cuadrado consideramos el caso  $a = a_0$ ,  $b_1 = b_3 = a$  y sumamos sobre el índice  $b_2$ .

$$-i \frac{L}{k_a} \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\ell_{aa} \ell_{a-}} - i \frac{1}{\ell_{aa} \ell'_{a-}} \right) e^{2ik_a L} \quad (7.95b)$$

3. Cualquier otro término es de orden  $1/(k\ell)^2$

Utilizando la ecuación (7.95) podemos escribir el cuarto orden (7.94) en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle (r_{aa})_4 \rangle_{k,L} &= -i \frac{L}{k_a} \left[ \left( \frac{1}{\ell_{a-}^2} - 2i \frac{1}{\ell_{a-} \ell'_{a-}} - \frac{1}{\ell_{a-}'^2} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\ell_{aa} \ell_{a-}} - i \frac{1}{\ell_{aa} \ell'_{a-}} \right) \right] e^{2ik_a L} \\ &\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^2 \\ &= \frac{-i}{k_a \ell_{a-}} \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{a-}}{\ell_{aa}} \right) - \left( \frac{\ell_{a-}}{\ell'_{a-}} \right)^2 - 2i \left( \frac{\ell_{a-}}{\ell'_{a-}} \right) - \frac{i}{2} \left( \frac{\ell_{a-}}{\ell_{aa}} \right) \left( \frac{\ell_{a-}}{\ell'_{a-}} \right) \right] \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right) e^{2ik_a L} \\ &\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^2 \end{aligned} \quad (7.96)$$

Como es de esperar si en la ecuación (7.96) nos restringimos al caso unidimensional se obtiene el término dominante en potencias inversas de  $k\ell$  de la ecuación (7.51b).

Al igual que en el segundo orden, Ec. (7.93), el cuarto orden, Ec. (7.96), tiene contribución de los canales cerrados de orden  $1/k\ell$ , que es el orden dominante. El resto de las contribuciones de la ecuación (7.94), tanto de canales abiertos como de canales cerrados, son de orden  $1/(k\ell)^2$ , por lo que son despreciables con respecto a la contribución de orden  $1/k\ell$  cuando  $k\ell \gg 1$

### Comparación de la serie de Born con la simulación numérica

Al sustituir las ecuaciones (7.91) y (7.94) en (7.90), obtenemos la expresión de  $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$  hasta cuarto en la serie de Born:

$$\begin{aligned}
 \langle r_{aa_0} \rangle_{k,L} = & - \sum_{b_1=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1)\Gamma(b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1}\ell_{b_1a_0}}} C(ab_1, b_1a_0) i \frac{e^{i(k_a+k_{a_0})L} - 1}{k_a + k_{a_0}} \\
 & + \sum_{b_1, b_2, b_3=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1)\Gamma(b_1b_2)\Gamma(b_2b_3)\Gamma(b_3a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1}\ell_{b_1b_2}\ell_{b_2b_3}\ell_{b_3a_0}}} \left\{ \right. \\
 & C(ab_1, b_1b_2) C(b_2b_3, b_3a_0) \times \left[ \right. \\
 & \frac{1}{k_{a_0} - k_{b_2}} \left( -\frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} + \frac{-1 + e^{i(k_a+k_{b_2})L}}{k_a + k_{b_2}} \right) \\
 & \left. + \frac{1}{k_a - k_{b_2}} \left( -\frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} + \frac{-1 + e^{i(k_{a_0}+k_{b_2})L}}{k_{a_0} + k_{b_2}} \right) \right] \\
 & + C(ab_1, b_2b_3) C(b_1b_2, b_3a_0) \times \left[ \right. \\
 & \frac{1}{-k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_a+k_{b_1}+k_{b_2}+k_{b_3})L}}{k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \\
 & \left. + \frac{1}{-k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left( \frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0}+k_{b_1}+k_{b_2}+k_{b_3})L}}{k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right) \right] \\
 & + C(ab_1, b_3a_0) C(b_1b_2, b_2b_3) \times \left[ \right. \\
 & \frac{1}{k_a + k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_3}} \left( -\frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} + \frac{-1 + e^{i(k_{b_1}+k_{b_3})L}}{k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \\
 & \left. + \frac{1}{k_{b_1} + k_{b_3}} \left( \frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0})L}}{k_a + k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_a+k_{a_0}+k_{b_1}+k_{b_3})L}}{k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \right) \right] \left. \right\} \\
 & + \dots
 \end{aligned} \tag{7.97}$$

Por las mismas razones que explicamos para  $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$ , la ecuación (7.97) da un resultado para  $\langle r_{a \neq a_0} \rangle_{k,L}$  cuya contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$  es de orden  $1/(k\ell)^2$ , mientras que la de  $\langle r_{aa} \rangle_{k,L}$  es de orden  $1/k\ell$ ; por lo tanto, la ecuación (7.97) puede escribirse en potencias de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L} &= \delta_{aa_0} \frac{i}{k_a \ell_{a_-}} \left\{ \left( 1 - i \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right) \frac{e^{2ik_a L} - 1}{2} \right. \\
&\quad - \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell_{aa}} \right) - \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right)^2 - i \left( 2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell_{aa}} \right) \right) \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right] \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right) e^{2ik_a L} + O \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right)^2 \Big\} \\
&\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^2.
\end{aligned} \tag{7.98}$$

La ecuación (7.98) es la contribución dominante de la serie en potencias inversas de  $k\ell$  cuando  $k\ell \gg 1$ . La parte real de la ecuación (7.98) es:

$$\begin{aligned}
Re \langle r_{aa_0} \rangle_{k,L} &= \frac{\delta_{aa_0}}{k_a \ell_{a_-}} \left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right) \right. \\
&\quad + \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right) \left[ \frac{1}{2} - \left( \frac{5}{2} + \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell_{aa}} \right) \right) \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right) + O \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right)^2 \right] \cos 2k_a L \\
&\quad + \left[ -\frac{1}{2} + \left( 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell_{aa}} \right) - \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right)^2 \right) \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right) + O \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right)^2 \right] \sin 2k_a L \Big\} \\
&\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^2
\end{aligned} \tag{7.99a}$$

mientras que la parte imaginaria es:

$$\begin{aligned}
Im \langle r_{aa_0} \rangle_{k,L} &= \frac{\delta_{aa_0}}{k_a \ell_{a_-}} \left\{ -\frac{1}{2} \right. \\
&\quad + \left[ \frac{1}{2} - \left( 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell_{aa}} \right) - \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right)^2 \right) \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right) + O \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right)^2 \right] \cos 2k_a L \\
&\quad + \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell'_{a_-}} \right) \left[ \frac{1}{2} - \left( \frac{5}{2} + \left( \frac{\ell_{a_-}}{\ell_{aa}} \right) \right) \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right) + O \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right)^2 \right] \sin 2k_a L \Big\} \\
&\quad + O \left( \frac{1}{k\ell} \right)^2
\end{aligned} \tag{7.99b}$$

Si nos restringimos al caso unidimensional la ecuación (7.99a) se reduce a la contribución de orden  $1/k\ell$  de la ecuación (7.59a); análogamente, (7.99b) se reduce a (7.59b).

De las expresiones de la ecuación (7.99) nos damos cuenta de lo siguiente:

- Al comparar las expresiones de (7.99) con las correspondientes expresiones de (7.59), se observa que la contribución de los canales cerrados no sólo modifica la amplitud de la oscilación, sino también la fase; por ejemplo, el orden  $1/k\ell$  de la parte real del caso unidimensional, Ec. (7.59a), sólo tiene una función seno, mientras que en el caso multicanal, Ec. (7.99a), la parte real depende de la función  $\sin 2k_a L$ , pero también de la función  $\cos 2k_a L$ .

- En el caso unidimensional, Ec. (7.59a), el término independiente de la parte real es cero, mientras que en el caso multicanal, Ec. (7.99a), hay un término independiente

$$-\frac{1}{2} \frac{\delta_{aa_0} \ell_{a_-}}{k_a \ell_{a_-} \ell'_{a_-}}. \quad (7.100)$$

Este término se debe a contribución de los canales cerrados; por otro lado, tanto en el caso unidimensional como en el multicanal, el término independiente de la parte imaginaria únicamente tiene contribuciones de los canales abiertos, siendo para el caso unidimensional

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{k\ell}, \quad (7.101a)$$

mientras que para el caso multicanal es:

$$-\frac{1}{2} \frac{\delta_{aa_0}}{k_a \ell_{a_-}}, \quad (7.101b)$$

Con el objeto de comparar el resultado numérico que se obtiene para  $\langle r_{aa} \rangle$  con el resultado teórico que predice la serie de Born, consideraremos, en el SWLA no idealizado ( $k\ell \gg 1$ ), el caso en que la guía admite un canal abierto  $N = 1$  y tomaremos en cuenta dos canales cerrados ( $N' = 2$ ); por supuesto la comparación sólo tiene sentido en el régimen balístico ( $L/\ell \ll 1$ ). Debido a que la comparación se hará en el SWLA no idealizado, únicamente consideraremos la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$  del resultado teórico, es decir, la pareja de ecuaciones (7.99).

En las figuras 7.19 y 7.20 se comparan, respectivamente, las curvas teóricas (líneas de segmentos) para  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.99a), y  $Im \langle r_{11} \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.99a), con las correspondientes curvas numéricas (líneas continuas). De estas figuras se observa los siguientes puntos:

- Tanto cuantitativamente como cualitativamente el acuerdo entre las curvas teóricas y las numéricas es aceptablemente bueno.
- En las figuras del caso unidimensional 7.10 y 7.11, observamos que conforme el valor de  $L$  aumenta la amplitud de la curva teórica difiere cada vez más de la numérica, pero la fase de la oscilación sigue no se altera. Esto se debe a que la contribución de orden  $1/k\ell$  de  $Re \langle r \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.59a), es una serie de potencias en  $L/\ell$  que multiplica a la función  $\sin 2kL$ , mientras que la de  $Im \langle r \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.59b), es una serie de potencias en  $L/\ell$  que multiplica a la función  $\cos 2kL$ . Lo anterior tiene como consecuencia que los siguientes términos de las respectivas series de potencias en  $L/\ell$  sólo afecten a la amplitud de la oscilación; sin embargo, en el caso multicanal ( $N = 1, N' = 2$ ), Figs. 7.19 y 7.20, nos damos cuenta que al aumentar el valor de  $L$  no sólo la amplitud de la curva teórica difiere de la numérica, también la fase de la oscilación. Esto se debe a que tanto  $Re \langle r_{aa} \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.99a), como  $Im \langle r_{aa} \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.99b), dependen de las dos funciones trigonométricas  $\cos 2k_a L$  y  $\sin 2k_a L$  y que cada una de estas funciones está multiplicada por una serie de

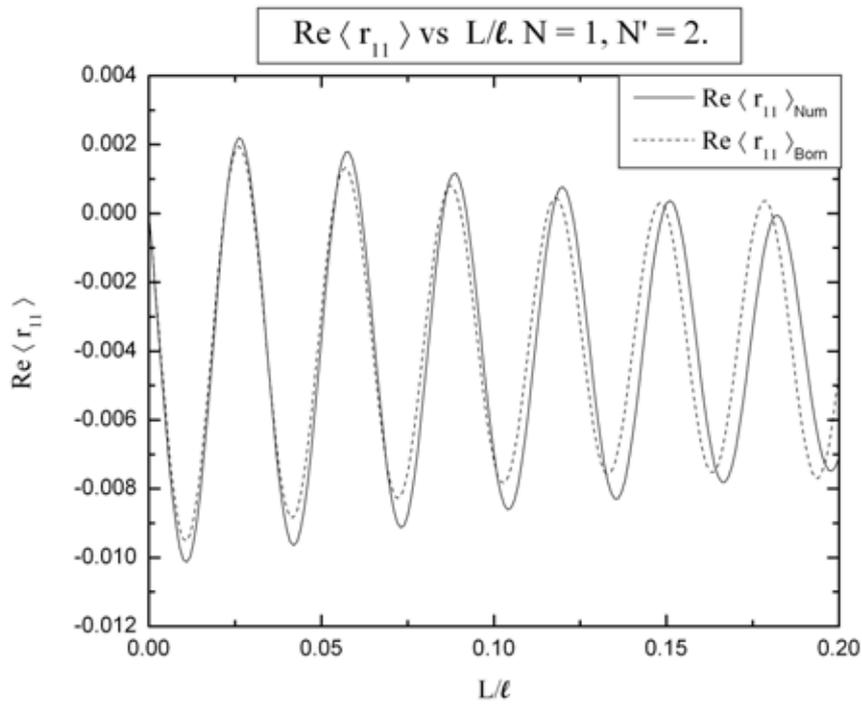


Figura 7.19:  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $Re \langle r_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.99a)] y la simulación numérica  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

potencias de  $L/\ell_a$ ; por lo tanto, la fase de las oscilaciones es sensible a dichas series de potencias.

- Al comparar las figuras 7.10 y 7.19 nos damos cuenta que la oscilación de la parte real se ha desplazado en la dirección negativa del eje de las ordenadas, lo que se debe al término independiente (7.100), es decir, a la contribución de los canales cerrados. Por otro lado al comparar las figuras 7.11 y 7.20, nos damos cuenta que la oscilación de la parte imaginaria no se ha desplazado en el eje de las ordenadas, lo que es consistente con los términos independientes de la ecuación (7.101).

### Contribución de los canales cerrados más allá del régimen balístico

Las simulaciones numéricas que realizamos para contrastar con las predicciones de la serie Born nos permitieron obtener numéricamente el comportamiento de los valores esperados de observables de interés más allá del régimen balístico donde la serie de Born no da una buena descripción. Con el objeto de comparar con la serie de Born, dichas simulaciones también las realizamos en el SWLA no idealizado, por lo que se usó un valor de  $k\ell \gg 1$ .

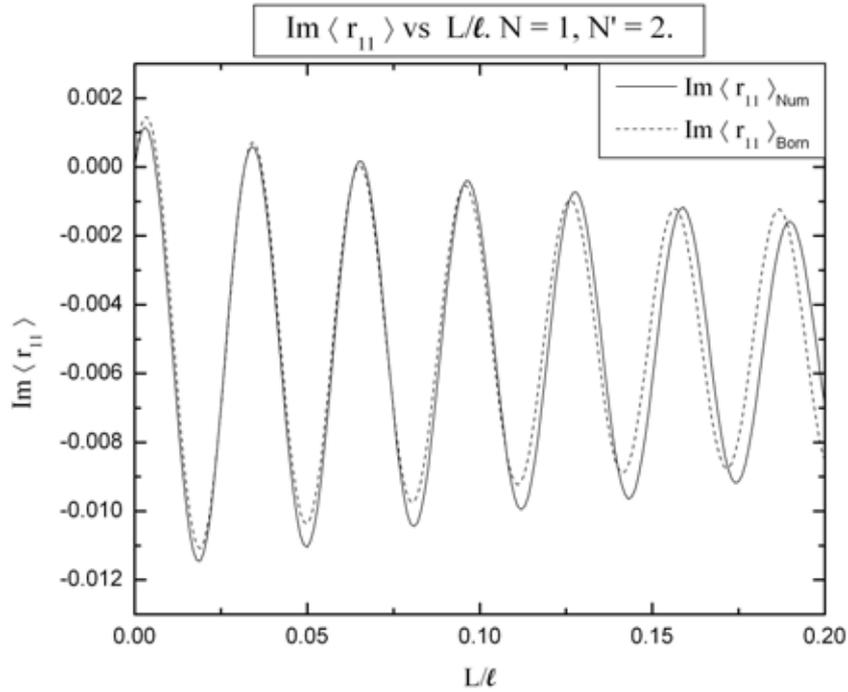


Figura 7.20:  $Im \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre el resultado teórico  $Im \langle r_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.99a)] y la simulación numérica  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua), en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y considerando dos canales cerrados ( $N' = 2$ ). Los resultados corresponden al valor  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

En el caso particular de un canal abierto ( $N = 1$ ) obtuvimos resultados numéricos más allá del régimen balístico para  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  e  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$  considerando  $N' = 0$ ,  $N' = 1$  y  $N' = 2$  canales cerrados. Los resultados se muestran en las figuras 7.21 y 7.22, respectivamente.

**Valor esperado numérico de  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$ .** En la figura 7.21 graficamos el valor esperado  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  considerando  $N' = 0$ ,  $N' = 1$  y  $N' = 2$  canales cerrados. De dicha figura observamos los siguientes puntos:

- La curva continua no toma en cuenta la contribución de canales cerrados, por lo que es la misma curva que la del caso unidimensional, ya que la curva continua de la figura 7.12 se obtuvo fijando el parámetro  $k\ell = 100$ , mientras que la curva continua de 7.21 se obtuvo con  $k_1 \ell_{11} = 100$ .
- La curva de puntos de la figura 7.21 representa la misma simulación numérica que la curva continua de la figura 7.19, pero en un intervalo más grande de  $L/\ell$ . En aquella curva se observa que hay un buen acuerdo entre el resultado teórico de la serie de Born, Ec. (7.99a), y la simulación numérica; es decir, la serie Born predice

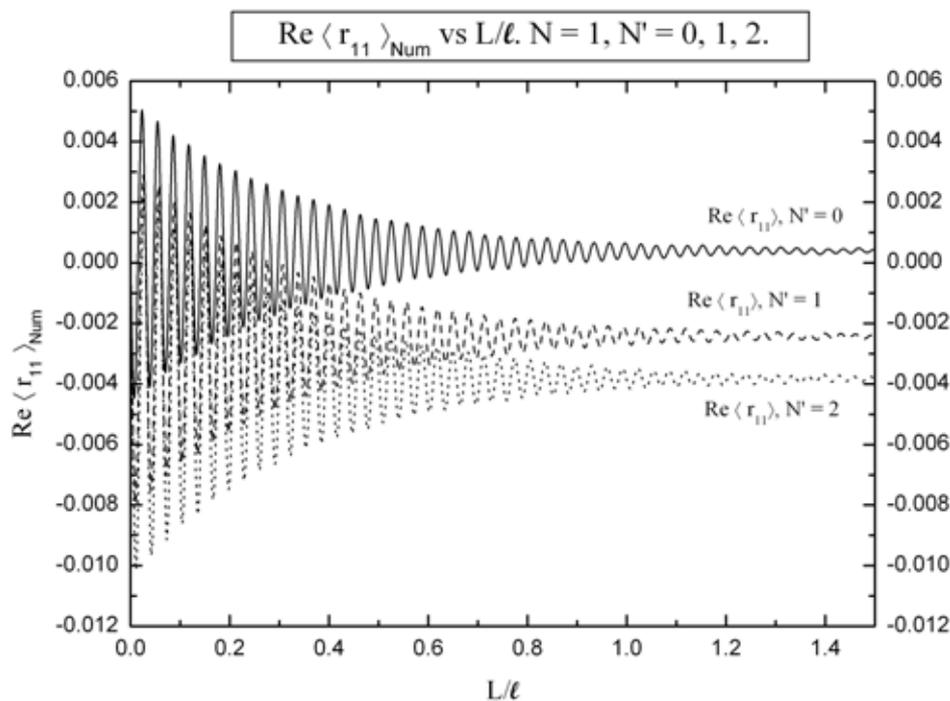


Figura 7.21:  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

correctamente la contribución de los canales cerrados, al menos en el régimen balístico. A pesar de la serie de Born sólo es válida en el régimen balístico, ésta nos permite inferir que la contribución de los canales cerrados es importante en este observable.

- Cualitativamente se observa que las tres curvas tienen un comportamiento semejante; es decir, todas muestran un comportamiento oscilatorio con una envolvente que atenúa la amplitud de la oscilación conforme el valor de  $L/\ell$  aumenta hasta tender a un valor constante.
- Cuantitativamente se observa que las curvas difieren notoriamente, ya que al aumentar el número de canales cerrados la oscilación se desplaza en la dirección negativa de las ordenadas. Esto se puede entender si ponemos nuestra atención en la contribución dominante en potencias de  $1/k\ell$  que obtuvimos en la ecuación (7.99a); por su puesto, dicha expresión es válida en el régimen balístico, pues aún si conociéramos las series de potencias en  $L/\ell_a$  que aparecen en dicha ecuación, es muy probable que se trate de series asintóticas (ver Apéndice D); sin embargo, de la ecuación (7.99a) podemos inferir que  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  se puede escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \operatorname{Re} \langle r_{11} \rangle_{k,L} &= \frac{1}{k_1 \ell_{1-}} \left\{ -\frac{1}{2} \left( \frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} \right) + P_{k\ell}^{(1)}(L) \cos 2k_1 L + Q_{k\ell}^{(1)}(L) \sin 2k_1 L \right\} \\
 &+ O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2
 \end{aligned} \tag{7.102}$$

donde hemos definido las series de potencias

$$P_{k\ell}^{(1)}(L) = \left( \frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} \right) \left[ \frac{1}{2} - \frac{7}{2} \left( \frac{L}{\ell_{1-}} \right) + O\left(\frac{L}{\ell_{1-}}\right)^2 \right], \tag{7.103a}$$

$$Q_{k\ell}^{(1)}(L) = \left[ -\frac{1}{2} + \left( \frac{3}{2} - \left( \frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} \right)^2 \right) \left( \frac{L}{\ell_{1-}} \right) + O\left(\frac{L}{\ell_{1-}}\right)^2 \right] \tag{7.103b}$$

y hemos tomado en cuenta que en este caso particular ( $N = 1$ ):

$$\ell_{11} = \ell_{1-} = \ell \tag{7.104}$$

Debido al comportamiento que observamos en la figura (7.21) las series de potencias de (7.103) tienen el carácter de envolventes que atenúan las oscilaciones de las funciones  $\cos 2k_1 L$  y  $\sin 2k_1 L$ , respectivamente, de tal manera que al considerar valores de  $L/\ell \gg 1$  las oscilaciones son despreciables; por lo tanto:

$$\operatorname{Re} \langle r_{11} \rangle_{k,L} \rightarrow -\frac{1}{2k_1 \ell_{1-}} \left( \frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} \right) + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2 \tag{7.105}$$

En las simulaciones numéricas usamos el valor  $k_1 \ell_{11} = 100$  y obtuvimos que cuando el número de canales cerrados es diferente de cero ( $N' \neq 0$ ), el cociente  $\ell_{1-}/\ell'_{1-}$  vale:

$$\frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} \simeq 5,63 \times 10^{-1} \quad N' = 1, \tag{7.106a}$$

$$\frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} \simeq 8,50 \times 10^{-1} \quad N' = 2. \tag{7.106b}$$

Por otro lado, cuando el número de canales cerrados es cero ( $N' = 0$ ) se tiene:

$$\frac{\ell_{1-}}{\ell'_{1-}} = 0 \quad N' = 0. \tag{7.106c}$$

Usando la ecuación (7.106), obtenemos que la serie de Born predice que, para valores de  $L/\ell \gg 1$ :

$$Re \langle r_{11} \rangle_{k,L} \rightarrow O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2, \quad N' = 0 \quad (7.107a)$$

$$Re \langle r_{11} \rangle_{k,L} \rightarrow -2,8 \times 10^{-3} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2, \quad N' = 1 \quad (7.107b)$$

$$Re \langle r_{11} \rangle_{k,L} \rightarrow -4,2 \times 10^{-3} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2, \quad N' = 2 \quad (7.107c)$$

que es consistente con lo que observamos en la figura 7.21, pues como vemos en ésta al aumentar el número de canales cerrados el desplazamiento aumenta.

- De la figura también observamos que con forme aumentamos el número de canales cerrados el desplazamiento de la curva en la dirección negativa de las ordenadas aumenta; sin embargo, la diferencia entre el desplazamiento de una curva con  $N' = 1$  y la curva con  $N' = 2$  es menor que el correspondiente desplazamiento entre la curva con  $N' = 0$  y la curva con  $N' = 1$ , es decir, la diferencia de desplazamientos entre un curva y la anterior disminuye al aumentar el número de canales cerrados que se consideran en el cálculo. Lo anterior nos hace pensar que al considerar un número suficientemente grande de canales cerrados, la curva de  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  convergerá a una curva ideal; es decir, una en la que se considera que el número de canales cerrados es infinito.
- Además del desplazamiento de la oscilación también notamos que al aumentar el número de canales cerrados la amplitud máxima de la oscilación aumenta. Lo anterior se puede explicar a la luz de la ecuación (7.99a), pues en está vemos que los canales contribuyen en la amplitud de la oscilación.
- De los puntos discutidos anteriormente podemos concluir que las contribuciones de los canales cerrados en  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  son importantes y no se pueden despreciar para este observable.

**Valor esperado numérico de  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$ .** En la figura 7.22 graficamos el valor esperado  $Re \langle r_{11} \rangle_{Num}$  considerando  $N' = 0$ ,  $N' = 1$  y  $N' = 2$  canales cerrados. De dicha figura observamos los siguientes puntos:

- La curva continua no toma en cuenta la contribución de canales cerrados, por lo que es la misma curva que la del caso unidimensional, ya que la curva continua de la figura 7.13 se obtuvo fijando el parámetro  $k\ell = 100$  mientras que la curva continua de 7.22 se obtuvo con  $k_1\ell_{11} = 100$ .
- La curva de puntos de la figura 7.22 representa la misma simulación numérica que la curva continua de la figura 7.20, pero en un intervalo más grande de  $L/\ell$ . En aquella curva se observa que hay un buen acuerdo entre el resultado teórico de la serie de Born, Ec. (7.99a), y la simulación numérica; es decir, la serie Born predice correctamente la contribución de los canales cerrados, al menos en el régimen balístico.

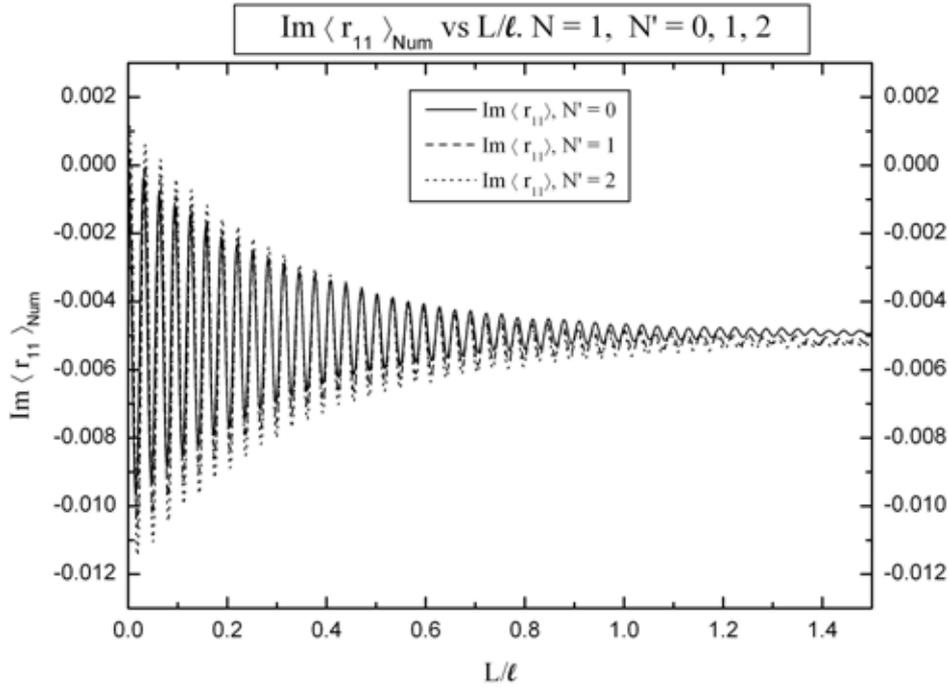


Figura 7.22:  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre  $Im \langle r_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos) y con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos). Los cálculos se realizaron con un canal abierto ( $N = 1$ ),  $k_1 \ell_{11} = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^7$  realizaciones del desorden microscópico.

- Cualitativamente se observa que las tres curvas tienen un comportamiento semejante; es decir, todas muestran un comportamiento oscilatorio con una envolvente que atenúa la amplitud de la oscilación conforme el valor de  $L/\ell$  aumenta hasta tender a un valor constante. A diferencia del valor esperado de la parte real, Fig. 7.21, en la figura 7.22 observamos que al aumentar el número de canales cerrados las oscilaciones no se desplazan, sino que las tres curvas oscilan y posteriormente tienden a un mismo valor. Esto se puede entender si ponemos nuestra atención en la contribución dominante en potencias de  $1/k\ell$  que obtuvimos en la ecuación (7.99b), pues de ésta podemos inferir que  $Im \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  se puede escribir de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 Im \langle r_{11} \rangle_{k,L} &= \frac{1}{k_1 \ell_{1-}} \left\{ -\frac{1}{2} - Q_{k\ell}^{(1)}(L) \cos 2k_1 L + P_{k\ell}^{(1)}(L) \sin 2k_1 L \right\} \\
 &+ O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2
 \end{aligned} \tag{7.108}$$

donde hemos usado las series de potencias  $P_{k\ell}^{(1)}(L)$  y  $Q_{k\ell}^{(1)}(L)$  definidas en (7.103),

que representan las envolventes que atenúan las oscilaciones de las funciones  $\cos 2k_1L$  y  $\sin 2k_1L$ ; por lo tanto, al considerar valores de  $L/\ell \gg 1$  las tres curvas de la figura 7.22 tienden al mismo valor, es decir:

$$Im \langle r_{11} \rangle_{k,L} \rightarrow -\frac{1}{2k_1\ell_{1-}} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2, \quad N' = 0, 1, 2 \quad (7.109)$$

Tomando en cuenta que las simulaciones se realizaron con un valor de  $k_1\ell_{11} = 100$ , entonces el valor constante al que deben tender las tres curvas es  $5 \times 10^{-3}$ , que es consistente con lo que observamos en la figura 7.22.

- Al igual que  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  si aumentamos el número de canales cerrados la amplitud máxima de la oscilación aumenta muy lentamente, lo que nos hace pensar que al tomar un número de canales cerrados suficientemente grande la curva de  $Im \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  convergerá a una “curva ideal” en la que el número de canales cerrados es infinito.
- De los puntos discutidos anteriormente podemos concluir que las contribuciones de los canales cerrados en  $Re \langle r_{11} \rangle_{k,L}$  son importantes y no se pueden despreciar para este observable.

Antes de concluir la discusión del valor esperado  $\langle r_{aa_0} \rangle_{k,L}$ , notemos lo siguiente. De la predicción que obtuvimos mediante la serie de Born (válida en el régimen balístico), Ecs. (7.98)-(7.99), la evidencia numérica, Figs. 7.22-7.22, y siguiendo la ideas que dieron a las ecuaciones (7.102) y (7.108), podemos inferir que este valor esperado se expresará en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle r_{aa_0} \rangle_{k,L} &= -\frac{1}{2} \frac{\delta_{aa_0}}{k_a \ell_{a-}} \left[ \frac{\ell_{a-}}{\ell'_{a-}} + i \right] + \frac{\delta_{aa_0}}{k_a \ell_{a-}} \left[ P_{k\ell}^{(1)}(L) - iQ_{k\ell}^{(1)}(L) \right] e^{2ik_a L} \quad (7.110) \\ &+ O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2 \end{aligned}$$

donde las cantidades  $P_{k\ell}^{(1)}(L)$  y  $Q_{k\ell}^{(1)}(L)$  “*juegan el papel*” de envolventes que atenúan las oscilaciones de la exponencial compleja  $e^{2ik_a L}$ , cuyo desarrollo en potencias de  $L$  sospechamos que es una *serie asintótica*.

### 7.4.3. Valor esperado de la intensidad de transmisión: $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$

Para obtener el valor esperado de las intensidades se sigue el mismo procedimiento que presentamos para las amplitudes. Comencemos con el cálculo del valor esperado de la intensidad de transmisión  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$ , que de igual manera lo haremos hasta cuarto orden en el potencial. Usando la notación compacta de  $T_{aa_0}$ , Ec. (2.153), y el modelo estadístico definido en (7.16) obtenemos:

$$\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L} = \delta_{aa_0} + \langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} + \langle (T_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} + \dots; \quad (7.111)$$

por lo tanto, tenemos que obtener las contribuciones de segundo  $\langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  y cuarto orden en el potencial  $\langle (T_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$

**Segundo orden**  $\langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$ 

Utilizando el segundo momento (7.16b) y la ecuación (2.153c) obtenemos que el segundo orden  $\langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  se puede escribir en términos de valores esperados de productos de amplitudes, es decir:

$$\langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} = \delta_{aa_0} \left[ \langle (t_{aa})_2 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa}^*)_2 \rangle_{k,L} \right] + \langle (t_{aa_0})_1 (t_{aa_0})_1^* \rangle_{k,L} \quad (7.112)$$

La contribución de los primeros dos términos la podemos obtener de la ecuación (7.75) obteniendo así:

$$\delta_{aa_0} \left[ \langle (t_{aa})_2 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa}^*)_2 \rangle_{k,L} \right] = -2\delta_{aa_0} \frac{L}{\ell_{a_-}}. \quad (7.113a)$$

Debido a la manera en que los canales cerrados contribuyen en la ecuación (7.75), la expresión (7.113a) *no tiene contribución de los canales cerrados*. El tercer término se obtiene usando la expresión (2.152a), su compleja conjugada y el segundo momento (7.16b), obteniendo así:

$$\langle (t_{aa_0})_1 (t_{aa_0})_1^* \rangle_{k,L} = \frac{L}{\ell_{aa_0}} \quad (7.113b)$$

Al introducir las expresiones de (7.113) en la ecuación (7.111) tenemos que el segundo orden es:

$$\langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} = -2\delta_{aa_0} \frac{L}{\ell_{a_-}} + \frac{L}{\ell_{aa_0}} \quad (7.114)$$

Debemos notar que en la obtención de la ecuación (7.114) no se despreció ningún término, es decir, la ecuación (7.114) es exacta y *no tiene contribución de los canales cerrados*; además, los dos términos de  $\langle (T_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  son de orden  $1/(k\ell)^0$ , por lo que serán parte de la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$ .

**Cuarto orden**  $\langle (T_{aa_0})_4 \rangle$ 

Para obtener la cantidad  $\langle (T_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$  se usa el cuarto momento del modelo estadístico (7.16d) y la ecuación (2.153e), de esta manera obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle (T_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} = & \delta_{aa_0} \left[ \langle (t_{aa})_4 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa}^*)_4 \rangle_{k,L} \right] + \langle (t_{aa_0})_2 (t_{aa_0})_2^* \rangle_{k,L} \\ & + \left[ \langle (t_{aa_0})_3 (t_{aa_0})_1^* \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa_0})_1 (t_{aa_0})_3^* \rangle_{k,L} \right] \end{aligned} \quad (7.115)$$

Los diferentes términos que aparecen en la ecuación (7.115) tendrán expresiones con una estructura semejante a la del cuarto orden  $\langle (t_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.76), que es muy complicada; sin embargo, al igual que en ese caso, sólo nos interesan los términos de la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$ , que en este caso es  $1/(k\ell)^0$ ; por lo tanto, a continuación obtendremos las contribuciones de orden  $1/(k\ell)^0$  de los términos que aparecen en la ecuación (7.115).

**Contribución dominante de  $\delta_{aa_0}$**   $\left[ \langle (t_{aa})_4 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa}^*)_4 \rangle_{k,L} \right]$ . La expresión en potencias inversas de  $k\ell$  de estos términos se puede obtener de la ecuación (7.78), siendo está:

$$\delta_{aa_0} \left[ \langle (t_{aa})_4 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa}^*)_4 \rangle_{k,L} \right] = \delta_{aa_0} \left[ \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right)^2 - \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right)^2 \right] + O \left( \frac{1}{k\ell} \right). \quad (7.116)$$

Notemos que la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  de (7.116) sí tiene contribuciones de los canales cerrados.

**Contribución dominante de  $\langle (t_{aa_0})_2 (t_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L}$** . Para obtener las contribuciones dominantes del tercer término de (7.115) hay que hacer un procedimiento análogo al que se hizo para obtener la ecuación (7.76), de lo cual obtenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \langle (t_{aa_0})_2 (t_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L} = & \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1 a_0) \Gamma^*(ab_2) \Gamma^*(b_2 a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 a_0} \ell_{ab_2} \ell_{b_2 a_0}}} \left\{ \quad (7.117) \right. \\ & C(ab_1, b_1 a_0) C(ab_2, b_2 a_0) \left[ \frac{\sin \frac{k_a - k_{a_0} L}{2}}{\frac{k_a - k_{a_0}}{2}} \right]^2 \\ & + C(ab_1, ab_2) C(b_1 a_0, b_2 a_0) \times \left[ 2 \frac{1 - e^{i(k_{b_1} - k_{b_2}^*)L} + i(k_{b_1} - k_{b_2}^*)L}{(k_{b_1} - k_{b_2}^*)^2} \right] \\ & + C(ab_1, b_2 a_0) C(b_1 a_0, ab_2) \times \left[ \right. \\ & \frac{1 - e^{i(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} - k_{b_2}^*)L} + i(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} - k_{b_2}^*)L}{(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} - k_{b_2}^*)^2} \\ & \left. - \frac{-1 + e^{-i(k_a + k_{a_0} - k_{b_1} + k_{b_2}^*)L} + i(k_a + k_{a_0} - k_{b_1} + k_{b_2}^*)L}{(k_a + k_{a_0} - k_{b_1} + k_{b_2}^*)^2} \right] \left. \right\} \end{aligned}$$

donde hemos usado la misma convención que en la ecuación (7.76), es decir, si  $b_1$  y  $b_2$  son índices de canales cerrados, entonces  $k_{b_1} \rightarrow i\kappa_{b_1}$  y  $k_{b_2}^* \rightarrow -i\kappa_{b_2}$ . Los términos de orden  $1/(k\ell)^0$  de la ecuación (7.117) se obtienen de la siguiente manera:

- Del primer paréntesis cuadrado se considera el caso  $a = a_0$  y se suman los índices  $b_1$  y  $b_2$  sobre todos los canales, de esta manera se obtiene:

$$\delta_{aa_0} \left[ \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right)^2 + \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right)^2 \right] \quad (7.118a)$$

- Del segundo paréntesis cuadrado se considera que  $b_1 = b_2$  y se hace la suma sobre los canales abiertos, obteniendo así:

$$\sum_{b_1=1}^N \frac{L^2}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}} \quad (7.118b)$$

Utilizando las expresiones de la ecuación (7.118), podemos expresar la ecuación (7.117) en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\langle (t_{aa_0})_2 (t_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L} = \delta_{aa_0} \left[ \left( \frac{L}{\ell_{a-}} \right)^2 + \left( \frac{L}{\ell'_{a-}} \right)^2 \right] + \sum_{b_1=1}^N \frac{L^2}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \quad (7.119)$$

Notemos que el término de orden  $1/(k\ell)^0$  de (7.119) tiene contribución de los canales cerrados.

**Contribución dominante de**  $\left[ \langle (t_{aa_0})_3 (t_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa_0})_1 (t_{aa_0}^*)_3 \rangle_{k,L} \right]$ . Los últimos dos sumandos de (7.115) son uno el conjugado del otro, por lo que es suficiente que calculemos uno de éstos. Usando el mismo procedimiento que en el párrafo anterior obtenemos que:

$$\begin{aligned} \langle (t_{aa_0})_3 (t_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} = & - \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1b_2) \Gamma(b_2a_0) \Gamma^*(aa_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1b_2} \ell_{b_2a_0} \ell_{aa_0}}} \left\{ \quad (7.120) \right. \\ & C(ab_1, b_1b_2) C(b_2a_0, aa_0) \times \left[ \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L} - i(k_a - k_{b_2})L}{(k_a - k_{b_2})^2} + \frac{1 - e^{i(k_a + k_{b_2})L} + i(k_a + k_{b_2})L}{(k_a + k_{b_2})^2} \right] \\ & + C(ab_1, b_2a_0) C(b_1b_2, aa_0) \times \left[ \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{i(k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})L} + i(k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})L}{(k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})^2} + \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_2})L} + i(-k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})L}{(-k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})^2} \right] \\ & + C(ab_1, aa_0) C(b_1b_2, b_2a_0) \times \left[ \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{-i(k_{a_0} - k_{b_1})L} - i(k_{a_0} - k_{b_1})L}{(k_{a_0} - k_{b_1})^2} + \frac{1 - e^{i(k_{a_0} + k_{b_1})L} + i(k_{a_0} + k_{b_1})L}{(k_{a_0} + k_{b_1})^2} \right] \left. \right\} \end{aligned}$$

Los términos de orden  $1/(k\ell)^0$  de la ecuación (7.117) se obtienen de la siguiente manera:

- Del primer paréntesis cuadrado consideramos el caso  $b_2 = a$  y sumamos sobre el índice  $b_1$ , de esta manera obtenemos:

$$-\frac{1}{\ell_{aa_0}} \left[ \frac{1}{\ell_{a_-}} - i \frac{1}{\ell'_{a_-}} \right] \left( \frac{L^2}{2} \right) \quad (7.121a)$$

- Análogamente, si del tercer paréntesis cuadrado consideramos el caso  $b_1 = a_0$  y sumamos sobre el índice  $b_2$ , obteniendo así:

$$-\frac{1}{\ell_{aa_0}} \left[ \frac{1}{\ell_{a_0-}} - i \frac{1}{\ell'_{a_0-}} \right] \left( \frac{L^2}{2} \right) \quad (7.121b)$$

Con ayuda de la ecuación (7.121) podemos escribir la suma de los dos últimos términos de (7.115) en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\left[ \langle (t_{aa_0})_3 (t_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} + \langle (t_{aa_0})_1 (t_{aa_0}^*)_3 \rangle_{k,L} \right] = -\frac{1}{\ell_{aa_0}} \left( \frac{1}{\ell_{a_-}} + \frac{1}{\ell_{a_0-}} \right) L^2 + O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \quad (7.122)$$

Una vez que hemos expresado los diferentes términos de la ecuación (7.115) como serie de potencias inversas de  $k\ell$ , podemos expresar el cuarto orden  $\langle (T_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle (T_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} &= 2\delta_{aa_0} \left( \frac{L}{\ell_{a_-}} \right)^2 + \sum_{b_1=1}^N \frac{L^2}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}} - \frac{1}{\ell_{aa_0}} \left( \frac{1}{\ell_{a_-}} + \frac{1}{\ell_{a_0-}} \right) L^2 \\ &+ O\left(\frac{1}{k\ell}\right). \end{aligned} \quad (7.123)$$

Notemos que al igual que el segundo orden, Ec. (7.114), la contribución dominante del cuarto orden, Ec. (7.123), *tampoco tiene contribución de los canales cerrados*.

### Contribución dominante de $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$

Para este observable no sabemos calcular toda la serie de la contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$  y aunque pudiésemos hacerlo, es muy probable que la serie sea asintótica. Lo que sí pudimos fue obtener la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  del segundo y cuarto orden, Ecs. (7.114) y (7.123), que al introducirlas en la ecuación (7.111) obtenemos el siguiente desarrollo en potencias inversas de  $k\ell$ :

$$\begin{aligned} \langle T_{aa_0} \rangle_{k,L} &= \delta_{aa_0} \left[ 1 - 2\frac{L}{\ell_{a_-}} + 2\left(\frac{L}{\ell_{a_-}}\right)^2 + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^3 \right] \\ &+ \left[ \frac{L}{\ell_{aa_0}} + \sum_{b_1=1}^N \frac{L^2}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}} - \frac{1}{\ell_{aa_0}} \left( \frac{1}{\ell_{a_-}} + \frac{1}{\ell_{a_0-}} \right) L^2 + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^3 \right] \\ &+ O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \end{aligned} \quad (7.124)$$

La ecuación (7.124) predice, al menos hasta cuarto orden, que la contribución dominante del valor esperado  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$  *no tiene contribución de los canales cerrados*, pues la primera contribución de éstos es, por lo menos, de orden  $1/k\ell$ ; además, por las mismas razones que explicamos para  $\langle t_{aa_0} \rangle_{k,L}$  [ver explicación abajo de la ecuación (7.76)], algunas contribuciones de los canales cerrados además de ser de orden  $1/k\ell$  decrecen exponencialmente con la longitud  $L$ .

Si bien la ecuación (7.124) la construimos mediante la serie de Born y como consecuencia su validez se restringe al régimen balístico, esta expresión nos permite inferir que, en el régimen balístico,  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$  es poco sensible a la contribución de los canales cerrados; sin embargo, como veremos más adelante, la evidencia numérica muestra que lo anterior es cierto incluso más allá del régimen balístico.

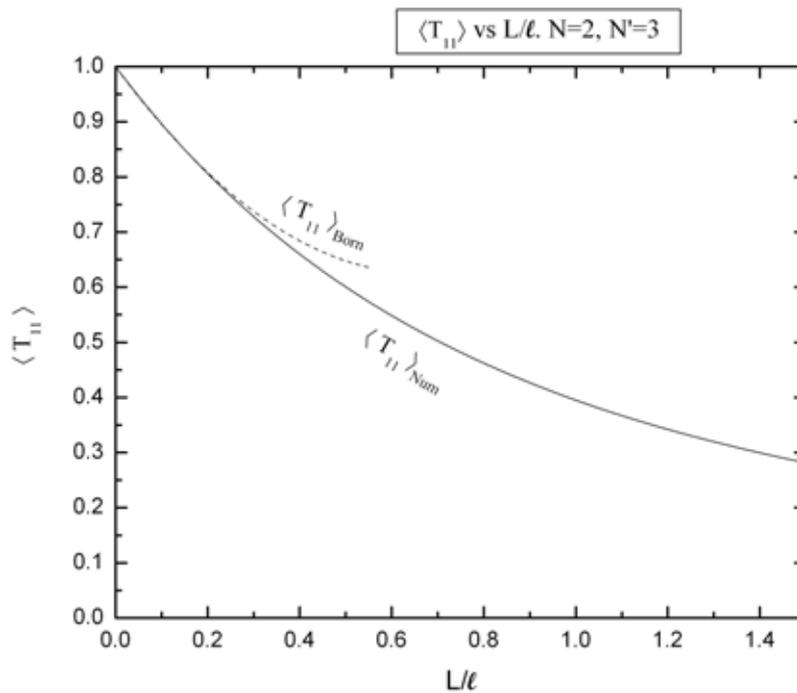


Figura 7.23:  $\langle T_{11} \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle T_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.124)] y el resultado numérico  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

### Comparación de la serie de Born con la simulación numérica

La ecuación (7.124) *predice los canales cerrados son irrelevantes* en la contribución dominante de  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$ . Para averiguar si esta predicción es correcta compararemos (en el SWLA,  $k\ell \gg 1$ ) el resultado teórico de (7.124) con una simulación numérica, en la

que consideramos dos canales abiertos ( $N = 2$ ) y tres canales cerrados ( $N' = 3$ ). En este caso tendremos dos números de onda  $k_1$  y  $k_2$ , y tres caminos libres medios de canales abiertos  $\ell_{11}$ ,  $\ell_{12} = \ell_{21}$ ,  $\ell_{22}$ ; por lo tanto, para realizar la simulación numérica deberemos fijar el parámetro  $k\ell$ , donde  $k$  es el número de onda total de la ecuación de Schrödinger, Ec. (2.16), y  $\ell$  es el camino libre medio de transporte definido en (4.26), que en este caso particular vale:

$$\frac{1}{\ell} = \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^2 \frac{1}{\ell_{ab}} \quad (7.125)$$

Al considerar dos canales abiertos tendremos cuatro intensidades:  $T_{11}$ ,  $T_{12}$ ,  $T_{21}$  y  $T_{22}$ . Sabemos que para cada realización del desorden microscópico las intensidades  $T_{12}$  y  $T_{21}$  no son iguales, sin embargo, tanto teóricamente, Ec. (7.124), como numéricamente hemos encontrado que los promedios sí lo son, es decir,  $\langle T_{12} \rangle_{k,L} = \langle T_{21} \rangle_{k,L}$ ; por lo tanto, únicamente presentaremos los resultados para  $\langle T_{12} \rangle_{k,L}$ .

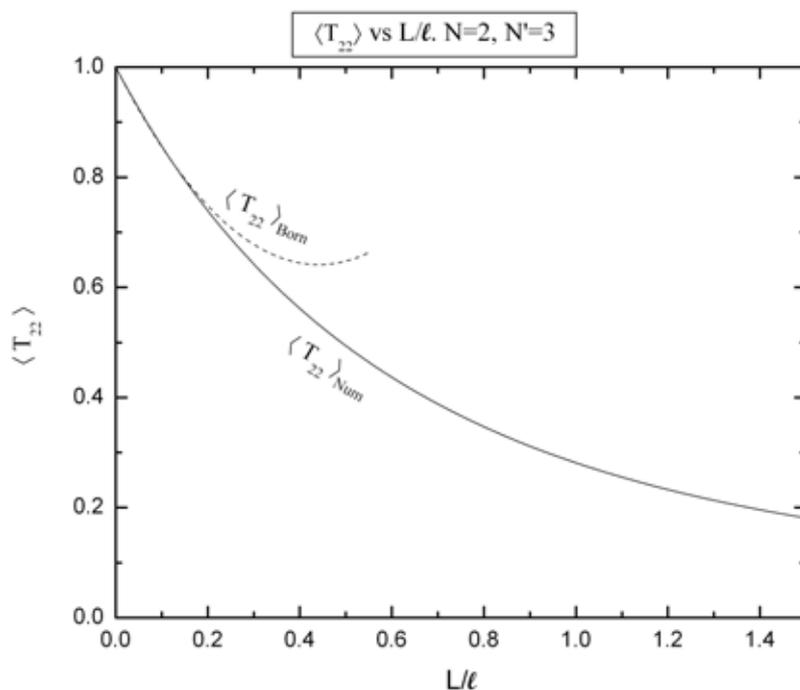


Figura 7.24:  $\langle T_{22} \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle T_{22} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.124)] y el resultado numérico  $\langle T_{22} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

La comparación entre las curvas teóricas y las simulaciones numéricas se muestran en las 7.23, 7.24 y 7.25, de las que podemos obtener las siguientes conclusiones:

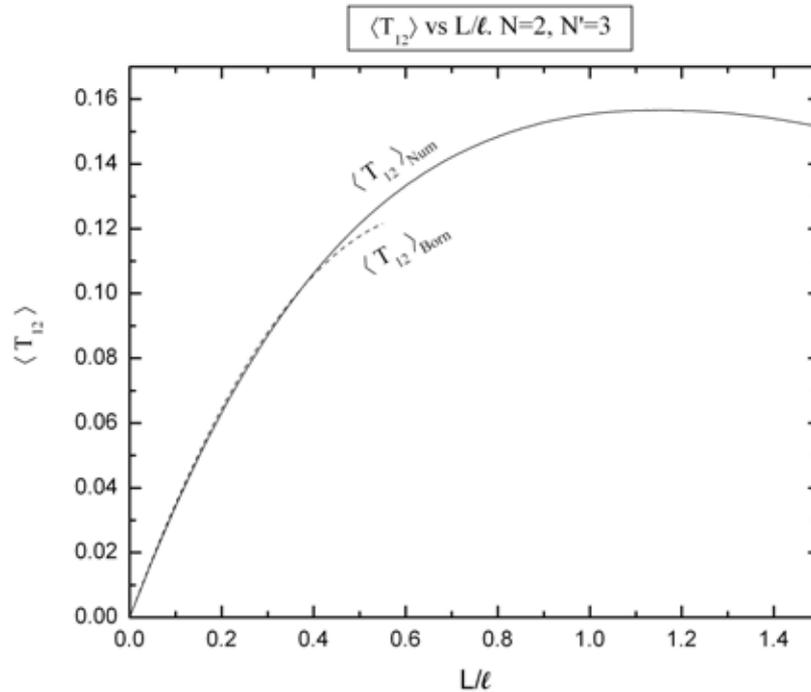


Figura 7.25:  $\langle T_{12} \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle T_{12} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.124)] y el resultado numérico  $\langle T_{12} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

- De las tres figuras nos damos cuenta que en el régimen balístico la predicción teórica y los resultados de la simulación numérica tienen un excelente acuerdo, siendo notable en el caso de  $\langle T_{12} \rangle$ , Fig. 7.25, ya que la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) muestran un buen acuerdo incluso para valores de  $L/\ell \sim 0.5$ , mientras que las correspondientes curvas teóricas de  $\langle T_{11} \rangle$  y  $\langle T_{22} \rangle$ , Figs. 7.23-7.24, sólo muestran un buen acuerdo hasta valores de  $L/\ell \sim 0.3$  y  $L/\ell \sim 0.2$ , respectivamente.
- Eventualmente la curva teórica difiere importantemente de la curva numérica, lo que se puede deber a dos cosas:
  - Que es necesario considerar los términos de orden superior en potencias de  $L$  de la contribución de orden  $1/(kl)^0$ , en particular la contribución de sexto orden de la serie de Born que daría lugar al término  $L^3$ .
  - También podría tratarse de una manifestación del *comportamiento asintótico que sospechamos* tienen estas series de potencias: ver Apéndice D.
- Debido a que las curvas teóricas que mostramos en las figuras 7.23-7.25 sólo tienen contribuciones de canales abiertos y que éstas tienen un buen acuerdo con las

correspondientes curvas numéricas, podemos concluir que las contribuciones de los canales cerrados (al igual que muchas otras de canales abiertos) son despreciables, al menos a este orden.

### Contribución de los canales cerrados más allá del régimen balístico

Como ya hemos mencionado el resultado teórico, (7.124), predice que en el régimen balístico la contribución dominante de los valores esperados de las intensidades de transmisión no tiene contribución de los canales cerrados. En el caso de dos canales abiertos ( $N = 2$ ), comparamos dicha predicción con una simulación numérica en la que consideremos tres ( $N' = 3$ ) canales cerrados (ver figuras 7.23, 7.24 y 7.25) encontrando un buen acuerdo; por esta razón sospechamos que más allá del régimen balístico los canales cerrados no contribuyen de manera importante más allá del régimen balístico. Para saber si esto es verdad en las figuras 7.26 y 7.27 comparamos los resultados numéricos obtenidos para  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$ ,  $\langle T_{22} \rangle_{Num}$  y  $\langle T_{12} \rangle_{Num}$  tomando en cuenta  $N' = 0, 1, 2, 3$  canales cerrados. De esas figuras nos damos cuenta que las curvas numéricas que toman en cuenta canales cerrados ( $N' = 1, 2, 3$ ), son indistinguibles de la curva que no los considera ( $N = 0$ ). Lo anterior es cierto para valores de  $L/\ell$  más allá del régimen balístico; por lo tanto, de la evidencia teórica y numérica que hemos mostrado, se puede concluir que los canales cerrados no contribuyen de manera importante en el comportamiento de  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$ .

Los resultados que muestran las figuras 7.26 y 7.27 son consistentes con la evidencia numérica que obtuvimos en el Capítulo 6, donde nos dimos cuenta que los resultados numéricos del caminante aleatorio en el espacio de matrices de transferencia, método que no considera de manera adecuada la contribución de los canales cerrados, coinciden (para las intensidades) con los cálculos microscópicos en los que se consideraron  $N' = 0$  y  $N' = 3$  canales cerrados (ver figuras 6.2 y 6.7).

#### 7.4.4. Valor esperado de la intensidad de reflexión: $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$

Para obtener el valor esperado de la intensidad de reflexión  $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$  se usa la notación compacta de la ecuación (2.155a) y el modelo estadístico definido en (7.16), de esta manera obtenemos

$$\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L} = \langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} + \langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} + \dots ; \quad (7.126)$$

por lo tanto, para obtener  $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$  hasta cuarto orden en el potencial, debemos calcular las contribuciones de segundo  $\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  y cuarto orden  $\langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$ .

#### Segundo orden $\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$

Utilizando el segundo momento (7.16b) y la ecuación (2.155b) obtenemos que el segundo orden  $\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  se puede escribir en términos de valores esperados de productos de amplitudes, es decir:

$$\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} = \langle (r_{aa_0})_1 (r_{aa_0})_1^* \rangle_{k,L}. \quad (7.127)$$

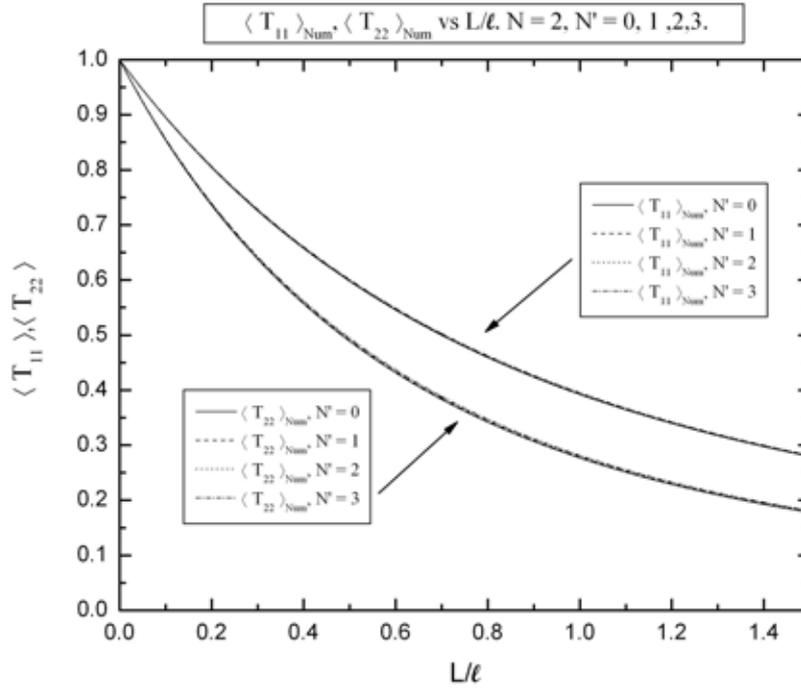


Figura 7.26:  $\langle T_{11} \rangle_{Num}, \langle T_{22} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . La curva superior muestra la comparación entre  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos), con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos) y con tres canales cerrados ( $N' = 3$ , línea de segmentos y puntos). La curva inferior muestra la comparación entre  $\langle T_{22} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos), con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos) y con tres canales cerrados ( $N' = 3$ , línea de segmentos y puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

Este valor esperado se obtiene al usar la expresión (2.152e), su compleja conjugada y el segundo momento (7.16b), obteniendo así:

$$\langle (r_{aa0})_1 (r_{aa0}^*)_1 \rangle_{k,L} = \frac{L}{\ell_{aa0}}; \quad (7.128)$$

por lo tanto, el segundo orden toma la siguiente expresión:

$$\langle (R_{aa0})_2 \rangle_{k,L} = \frac{L}{\ell_{aa0}}. \quad (7.129)$$

Notemos que la ecuación (7.129) es de orden  $1/(k\ell)^0$  y *no tiene contribución de los canales cerrados*.

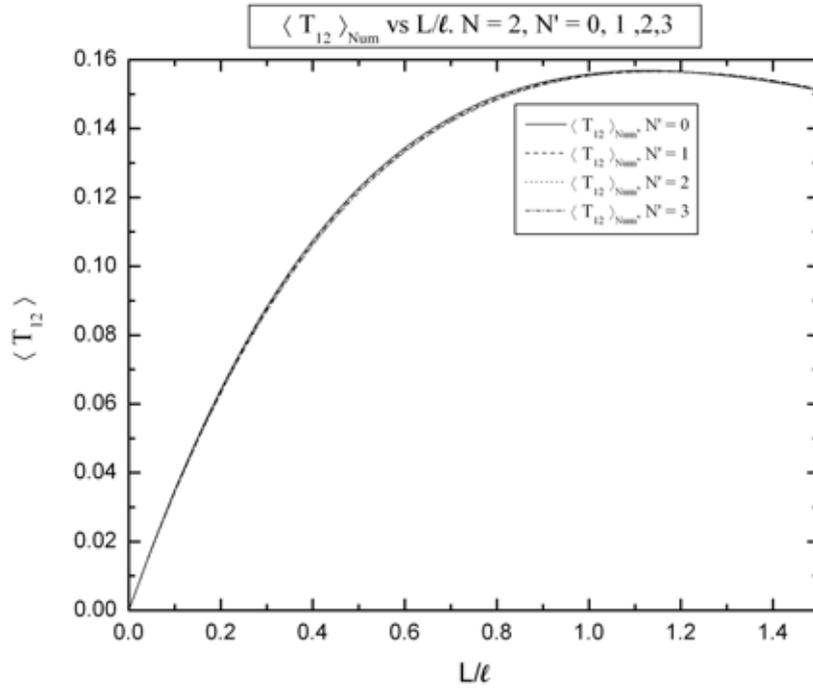


Figura 7.27:  $\langle T_{12} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . La curva muestra la comparación entre  $\langle T_{12} \rangle_{Num}$  sin canales cerrados ( $N' = 0$ , línea continua), con un canal cerrado ( $N' = 1$ , línea de segmentos), con dos canales cerrados ( $N' = 2$ , línea de puntos) y con tres canales cerrados ( $N' = 3$ , línea de segmentos y puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

#### Cuarto orden $\langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$

Para obtener la cantidad  $\langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$  se usa el cuarto momento del modelo estadístico (7.16d) y la ecuación (2.155d), de esta manera obtenemos:

$$\begin{aligned} \langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} &= \langle (r_{aa_0})_2 (r_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L} \\ &\quad \left[ \langle (r_{aa_0})_3 (r_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} + \langle (r_{aa_0})_1 (r_{aa_0}^*)_3 \rangle_{k,L} \right] \end{aligned} \quad (7.130)$$

Al igual que el cuarto orden  $\langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L}$ , Ec. (7.115), sólo nos interesa las contribuciones dominantes en potencias inversas de  $k\ell$  de la ecuación (7.130), que en este caso será  $1/(k\ell)^0$ .

**Contribución dominante de  $\langle (r_{aa_0})_2 (r_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L}$ .** Haciendo un procedimiento análogo con el que obtuvimos la ecuación (7.117), obtenemos la siguiente expresión para el primer término de la ecuación (7.130):

$$\begin{aligned}
 \langle (r_{aa_0})_2 (r_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L} = & \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1 a_0) \Gamma^*(ab_2) \Gamma^*(b_2 a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 a_0} \ell_{ab_2} \ell_{b_2 a_0}}} \left\{ \right. & (7.131) \\
 & C(ab_1, b_1 a_0) C(ab_2, b_2 a_0) \left[ -\frac{2(-1 + \cos(k_a + k_{a_0})L)}{(k_a + k_{a_0})^2} \right] \\
 & + C(ab_1, ab_2) C(b_1 a_0, b_2 a_0) \times \left[ 2 \frac{1 - e^{i(k_{b_1} - k_{b_2}^*)L} + i(k_{b_1} - k_{b_2}^*)L}{(k_{b_1} - k_{b_2}^*)^2} \right] \\
 & + C(ab_1, b_2 a_0) C(b_1 a_0, ab_2) \times \left[ \frac{1 - e^{i(k_a - k_{a_0} + k_{b_1} - k_{b_2}^*)L} + i(k_a - k_{a_0} + k_{b_1} - k_{b_2}^*)L}{(k_a - k_{a_0} + k_{b_1} - k_{b_2}^*)^2} \right. \\
 & \left. + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0} - k_{b_1} + k_{b_2}^*)L} - i(k_a - k_{a_0} - k_{b_1} + k_{b_2}^*)L}{(k_a - k_{a_0} - k_{b_1} + k_{b_2}^*)^2} \right] \left. \right\}
 \end{aligned}$$

donde hemos usado la misma convención que en la ecuación (7.117), es decir, si  $b_1$  y  $b_2$  son índices de canales cerrados, entonces  $k_{b_1} \rightarrow i\kappa_{b_1}$  y  $k_{b_2}^* \rightarrow -i\kappa_{b_2}$ . Los términos de orden  $1/(k\ell)^0$  de la ecuación (7.131) se obtienen de la siguiente manera:

- Del segundo paréntesis cuadrado se considera el caso  $b_1 = b_2$  y ambos índices de canales abiertos; por lo tanto, la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$  del segundo paréntesis cuadrado es:

$$\sum_{b_1=1}^N \frac{L^2}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 a_0}}. \quad (7.132a)$$

- Si en el tercer paréntesis cuadrado se considera el caso  $a = a_0$  y los índices de  $b_1 = b_2$  y ambos índices de canal abierto se obtiene la siguiente contribución:

$$\delta_{aa_0} \sum_{b_1=1}^N \left( \frac{L}{\ell_{ab_1}} \right)^2. \quad (7.132b)$$

- Por último, si en el tercer paréntesis cuadrado consideramos los casos; i)  $b_2 = a$ ,  $b_1 = a_0$  e ii)  $b_1 = a$ ,  $b_2 = a_0$ , se obtiene la siguiente contribución:

$$\frac{C(aa, a_0 a_0)}{\ell_{aa_0} \sqrt{\ell_{aa} \ell_{a_0 a_0}}} L^2. \quad (7.132c)$$

Usando las expresiones de (7.132) podemos expresar la ecuación (7.131) en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\langle (r_{aa_0})_2 (r_{aa_0}^*)_2 \rangle_{k,L} = \sum_{b_1=1}^N \frac{L^2}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 a_0}} + \delta_{aa_0} \sum_{b_1=1}^N \left( \frac{L}{\ell_{ab_1}} \right)^2 + \frac{C(aa, a_0 a_0)}{\ell_{aa_0} \sqrt{\ell_{aa} \ell_{a_0 a_0}}} L^2 + O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \quad (7.133)$$

De la ecuación (7.133) debemos notar dos cosas:

- La contribución dominante en potencias inversas de  $k\ell$  no tiene contribuciones de canales cerrados.
- En la contribución dominante de (7.133) aparece el coeficiente de correlación  $C(aa, a_0a_0)$ : ver ecuación (7.3). Este coeficiente de correlación vale uno si  $a = a_0$ , pero es diferente de uno cuando  $a \neq a_0$ ; en el último caso sabemos, por evidencia numérica, que el valor del coeficiente de correlación es de orden uno, por lo que no es despreciable.

**Contribución dominante de**  $\left[ \langle (r_{aa_0})_3 (r_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} + \langle (r_{aa_0})_1 (r_{aa_0}^*)_3 \rangle_{k,L} \right]$ . Los últimos dos sumandos de (7.130) son uno el conjugado del otro, por lo que es suficiente que calculemos uno de éstos. Usando el mismo procedimiento que en el párrafo anterior obtenemos que:

$$\begin{aligned} \langle (r_{aa_0})_3 (r_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} = & - \sum_{b_1, b_2=1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1b_2) \Gamma(b_2a_0) \Gamma^*(aa_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1b_2} \ell_{b_2a_0} \ell_{aa_0}}} \left\{ \right. & (7.134) \\ & C(ab_1, b_1b_2) C(b_2a_0, aa_0) \times \left[ \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L} - i(k_a - k_{b_2})L}{(k_a - k_{b_2})^2} + \frac{1 - e^{i(k_a + k_{b_2})L} + i(k_a + k_{b_2})L}{(k_a + k_{b_2})^2} \right] \\ & + C(ab_1, b_2a_0) C(b_1b_2, aa_0) \times \left[ \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{-i(k_a + k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_2})L} - i(k_a + k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_2})L}{(k_a + k_{a_0} - k_{b_1} - k_{b_2})^2} \right. \\ & \left. + \frac{1 - e^{i(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})L} + i(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})L}{(k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2})^2} \right] \\ & + C(ab_1, aa_0) C(b_1b_2, b_2a_0) \times \left[ \right. \\ & \left. \frac{1 - e^{-i(k_{a_0} - k_{b_1})L} - i(k_{a_0} - k_{b_1})L}{(k_{a_0} - k_{b_1})^2} + \frac{1 - e^{i(k_{a_0} + k_{b_1})L} + i(k_{a_0} + k_{b_1})L}{(k_{a_0} + k_{b_1})^2} \right] \left. \right\} \end{aligned}$$

Los términos de orden  $1/(k\ell)^0$  de la ecuación (7.134) se obtienen de la siguiente manera:

- Del primer paréntesis cuadrado consideramos el caso  $b_2 = a$  y sumamos sobre el índice  $b_1$ , de esta manera obtenemos:

$$-\frac{1}{\ell_{aa_0}} \left[ \frac{1}{\ell_{a_-}} - i \frac{1}{\ell'_{a_-}} \right] \left( \frac{L^2}{2} \right) \quad (7.135a)$$

- Si en el segundo paréntesis cuadrado consideramos los casos; i)  $b_2 = a$ ,  $b_1 = a_0$  e ii)  $b_1 = a$ ,  $b_2 = a_0$ , se obtiene la siguiente contribución:

$$\left( \frac{C(aa, a_0 a_0)}{\ell_{aa_0} \sqrt{\ell_{aa} \ell_{a_0 a_0}}} + \frac{1}{\ell_{aa_0}^2} \right) \frac{L^2}{2}. \quad (7.135b)$$

- por último, si del tercer paréntesis cuadrado consideramos el caso  $b_1 = a_0$  y sumamos sobre el índice  $b_2$ , se obtiene:

$$-\frac{1}{\ell_{aa_0}} \left[ \frac{1}{\ell_{a_0-}} - i \frac{1}{\ell'_{a_0-}} \right] \left( \frac{L^2}{2} \right) \quad (7.135c)$$

Con las expresiones de la ecuación (7.135), podemos escribir la suma de los dos últimos términos de (7.130) en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \left[ \langle (r_{aa_0})_3 (r_{aa_0}^*)_1 \rangle_{k,L} + \langle (r_{aa_0})_1 (r_{aa_0}^*)_3 \rangle_{k,L} \right] = - \left[ \frac{1}{\ell_{aa_0}} \left( \frac{1}{\ell_{a_0-}} + \frac{1}{\ell_{a_0-}} \right) + \frac{1}{\ell_{aa_0}^2} \right. \\ & \left. + \frac{C(aa, a_0 a_0)}{\ell_{aa_0} \sqrt{\ell_{aa} \ell_{a_0 a_0}}} \right] L^2 + O\left(\frac{1}{k\ell}\right) \end{aligned} \quad (7.136)$$

Al igual que la ecuación (7.133), la ecuación (7.136) tampoco tiene contribuciones de los canales cerrados y depende del coeficiente de correlación  $C(aa, a_0 a_0)$ . Sustituyen las ecuaciones (7.133) y (7.136) en el cuarto orden, Ec. (7.130), obtenemos que éste se escribe en potencias inversas de  $k\ell$  como:

$$\begin{aligned} \langle (R_{aa_0})_4 \rangle_{k,L} &= \left[ \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 a_0}} + \delta_{aa_0} \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1}^2} - \frac{1}{\ell_{aa_0}} \left( \frac{1}{\ell_{a_0-}} + \frac{1}{\ell_{aa_0}} + \frac{1}{\ell_{a_0-}} \right) \right] L^2 \\ &+ O\left(\frac{1}{k\ell}\right). \end{aligned} \quad (7.137)$$

### Contribución dominante de $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$

Una vez que tenemos las contribuciones dominantes del segundo y cuarto orden, Ecs. (7.129) y (7.137), podemos expresar la ecuación (7.126) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle R_{aa_0} \rangle_{k,L} &= \left\{ \frac{L}{\ell_{aa_0}} + \left[ \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1} \ell_{b_1 a_0}} + \delta_{aa_0} \sum_{b_1=1}^N \frac{1}{\ell_{ab_1}^2} - \frac{1}{\ell_{aa_0}} \left( \frac{1}{\ell_{a_0-}} + \frac{1}{\ell_{aa_0}} + \frac{1}{\ell_{a_0-}} \right) \right] L^2 \right. \\ & \left. + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^3 \right\} + O\left(\frac{1}{k\ell}\right). \end{aligned} \quad (7.138)$$

La ecuación (7.138) predice, al menos hasta cuarto orden, que en la contribución dominante de  $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$  los canales cerrados no contribuyen, ya que la primera contribución de éstos es de orden  $1/k\ell$ . Si bien la ecuación (7.138) únicamente es válida en el régimen balístico ( $L/\ell \ll 1$ ), ésta nos hace sospechar que la contribución dominante de  $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$  no dependerá de manera importante de los canales cerrados, lo que confirmaremos con la evidencia numérica que presentaremos más adelante.

### Comparación de la serie de Born con la simulación numérica

La predicción de la ecuación (7.138) es un resultado importante que requiere ser comparada con una simulación numérica. Al igual que para  $\langle T_{aa_0} \rangle_{k,L}$  (sección 7.4.3), consideraremos el caso de dos canales abiertos ( $N = 2$ ) y tres cerrados ( $N' = 3$ ).

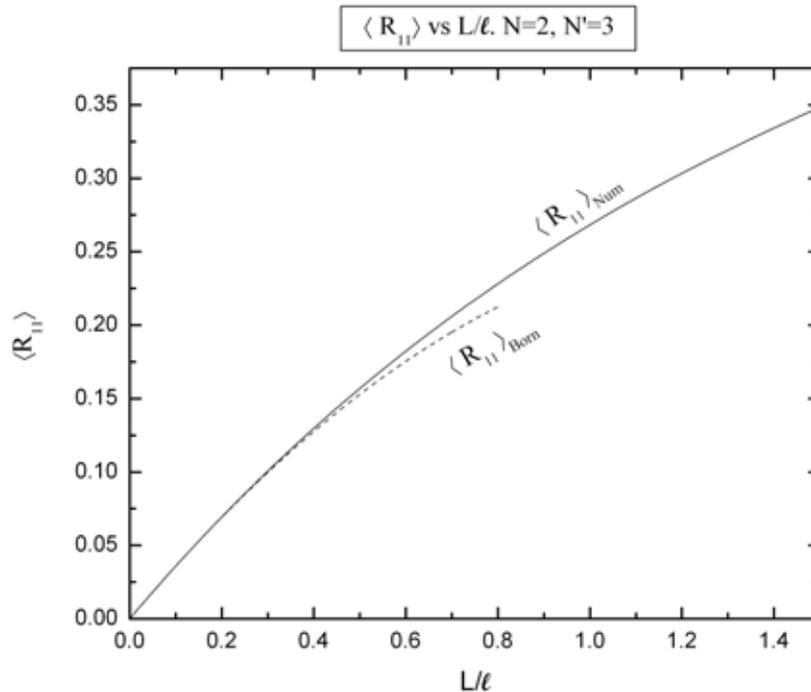


Figura 7.28:  $\langle R_{11} \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle R_{11} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.138)] y el resultado numérico  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

En este caso de dos canales abiertos debemos considerar los valores esperados de las cuatro intensidades de reflexión  $R_{11}$ ,  $R_{12}$ ,  $R_{21}$  y  $R_{22}$ ; sin embargo, debido a que nuestro potencial es invariante ante inversiones temporales (TRI) [ver ecuación (2.78)], se debe cumplir que  $R_{12} = R_{21}$ . Al realizar nuestras simulaciones numéricas, verificamos que esta propiedad se cumpliera para cada realización del desorden microscópico; además, tanto teóricamente, Ec. (7.138), como numéricamente obtuvimos que los valores esperados  $\langle R_{aa_0} \rangle_{k,L}$  son consistentes con la propiedad de TRI.

La comparación entre la contribución dominante de la predicción teórica, Ec. (7.138), y los resultados numéricos se muestran en las figuras 7.28, 7.29 y 7.30, de las cuales podemos observar lo siguiente:

- El acuerdo entre la curva teórica y la numérica es muy buena en el régimen balístico, destacando el caso del valor esperado  $\langle R_{11} \rangle_{k,L}$ , el cual muestra un buen acuerdo

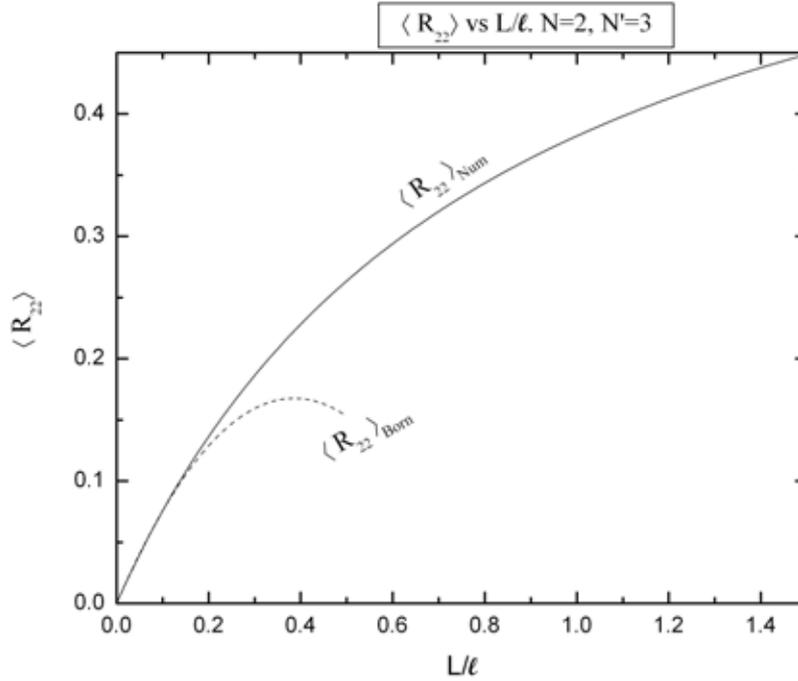


Figura 7.29:  $\langle R_{22} \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle R_{22} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.138)] y el resultado numérico  $\langle R_{22} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

con el resultado numérico hasta valores de  $L/\ell \sim 0.4$ , mientras que las cantidades  $\langle R_{12} \rangle_{k,L}$  y  $\langle R_{22} \rangle_{k,L}$  tiene un buen acuerdo con la simulación numérica hasta  $L/\ell \sim 0.2$ .

- Eventualmente la curva teórica difiere importantemente de la curva numérica, lo que se puede deber a dos cosas:
  - Que es necesario considerar los términos de orden superior en potencias de  $L$  de la contribución de orden  $1/(k\ell)^0$ , en particular la contribución de sexto orden de la serie de Born que daría lugar al término  $L^3$ .
  - También podría tratarse de una manifestación del *comportamiento asintótico que “sospechamos”* que estas series de potencias tienen, ya que, como discutimos en el caso unidimensional, el valor numérico de los coeficientes de las potencias de  $L$  aumentan con el orden de la potencia, lo que hace pensar que las series no sean convergentes; sin embargo, a pesar de que estas series pudiesen ser divergentes, a lo largo de este Capítulo hemos visto que estas series tiene un buen acuerdo con las correspondientes curvas numéricas al menos en un pequeño intervalo de  $L/\ell$ . Estos dos hechos son característicos

de las series asintóticas: ver Apéndice D

- Debido a que las curvas teóricas que mostramos en las figuras 7.28-7.30 sólo tienen contribuciones de canales abiertos y que éstas tienen un buen acuerdo con las correspondientes curvas numéricas, podemos concluir que las contribuciones de los canales cerrados (al igual que muchas otras de canales abiertos) son despreciables, al menos a este orden.

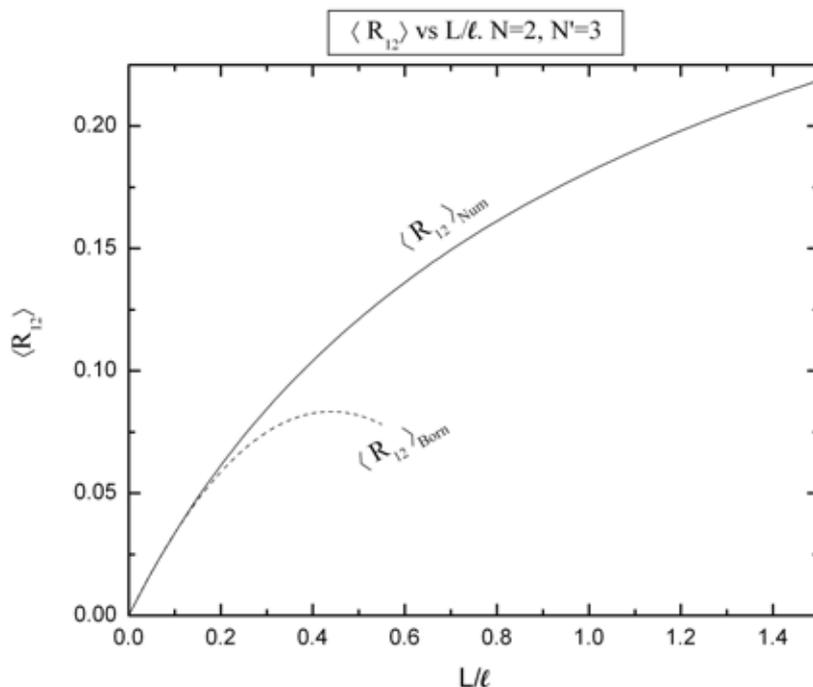


Figura 7.30:  $\langle R_{12} \rangle$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la contribución dominante del resultado teórico para  $\langle R_{12} \rangle_{Born}$  [curva de segmentos, ecuación (7.138)] y el resultado numérico  $\langle R_{12} \rangle_{Num}$  (curva continua). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), tres canales cerrados ( $N' = 3$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

### Contribución de los canales cerrados más allá del régimen balístico

Como ya hemos mencionado el resultado teórico, Ec. (7.138), predice que en el régimen balístico la contribución dominante de los valores esperados de las intensidades de reflexión sólo dependen de los canales abiertos. Las comparaciones que hicimos en el régimen balístico entre la predicción teórica, Ec. (7.138), y la simulación numérica (ver figuras 7.28, 7.29 y 7.30) muestran un buen acuerdo, sospechamos que más allá del régimen balístico los canales cerrados no contribuyen de manera importante en la contribución dominante de estas cantidades. Para saber si lo anterior es cierto, en la figura 7.31

compararemos los resultados numéricos obtenidos para  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{22} \rangle_{Num}$  y  $\langle R_{12} \rangle_{Num}$  tomando en cuenta  $N' = 0, 1, 2, 3$  canales cerrados. De esa figura nos damos cuenta que las curvas numéricas que toman en cuenta canales cerrados ( $N' = 1, 2, 3$ ), son indistinguibles de la curva que no los considera ( $N = 0$ ). Lo anterior es cierto para valores de  $L/\ell$  más allá del régimen balístico; por lo tanto, de la evidencia teórica y numérica que hemos mostrado, se puede concluir que los canales cerrados no contribuyen de manera importante en el comportamiento de  $\langle R_{aa0} \rangle_{k,L}$ .

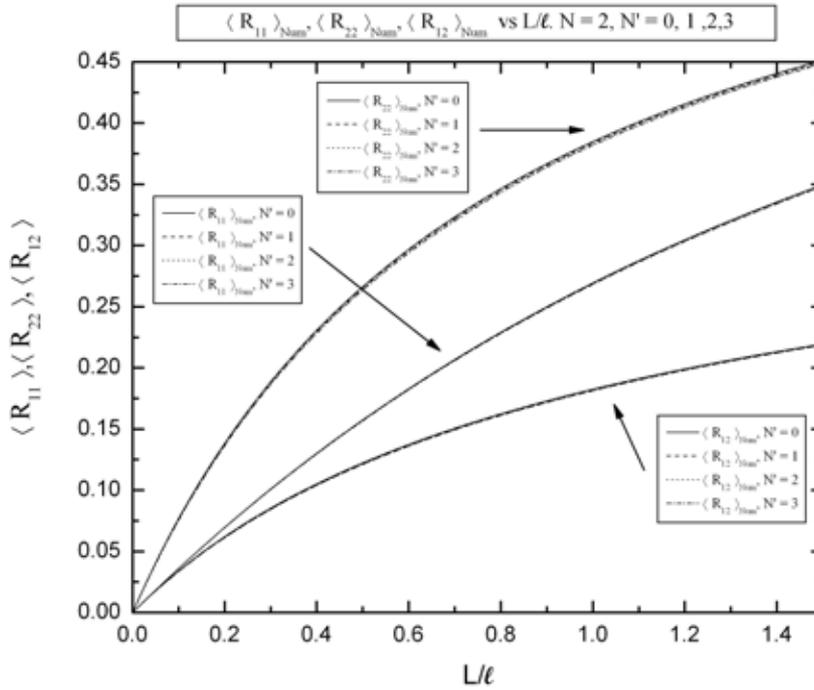


Figura 7.31:  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{22} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{12} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Las curvas  $\langle R_{22} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$  y  $\langle R_{12} \rangle_{Num}$  que no consideran canales cerrados ( $N' = 0$ ) son indistinguibles de las correspondientes curvas que sí consideran canales cerrados ( $N' = 1, 2, 3$ ). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ),  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

#### 7.4.5. La conservación de flujo: $\langle T_{-a0} \rangle_{k,L} + \langle R_{-a0} \rangle_{k,L} = 1$

Hasta el momento hemos encontrado un buen acuerdo entre el tratamiento teórico y numérico entre los valores esperados que hemos calculado, lo que nos hace pensar que los resultados de ambos tratamientos son correctos; sin embargo, en el periodo de tiempo en el que se obtuvieron los resultados, se realizaron diversas verificaciones, tanto teóricas como numéricas, que nos permitieran saber la confiabilidad de los resultados. Una de estas verificaciones consistió en mostrar que los resultados fuesen consistentes con la conservación de flujo: ver ecuación (2.66).

### Verificación numérica

En las figuras 7.32 y 7.33 se muestra, respectivamente, las curvas numéricas de  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$  y  $\langle T_{22} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{22} \rangle_{Num}$ , junto sus correspondientes relaciones de Conservación de Flujo; en dichos cálculo consideramos dos canales abiertos cero cerrados. En esas figuras nos damos cuenta que las simulaciones numéricas son consistentes con la conservación de Flujo, *como debe ser*.

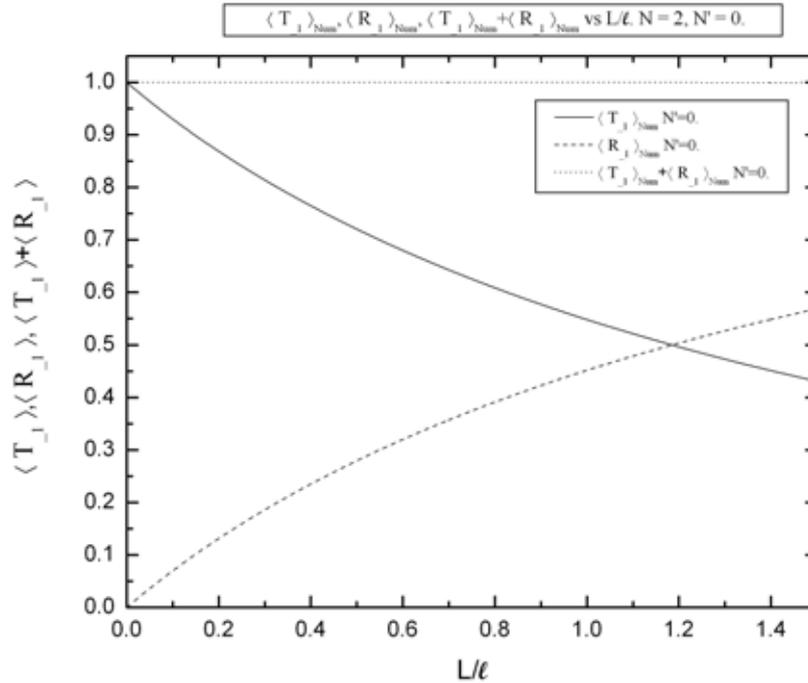


Figura 7.32:  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$ ,  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$ ,  $\langle T_{11} \rangle_{Num} + \langle R_{11} \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Verificación numérica de la conservación de Flujo para  $\langle T_{11} \rangle_{Num}$  (curva continua),  $\langle R_{11} \rangle_{Num}$  (curva de segmentos) y  $\langle T_{11} \rangle_{Num} + \langle R_{11} \rangle_{Num}$  (curva de puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), cero canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

### Verificación teórica

Para cada realización del desorden microscópico la matriz de dispersión debe satisfacer la propiedad de Conservación de Flujo, Ec. (2.66), que en términos de las intensidades  $T_{aa_0}$  y  $R_{aa_0}$  se escribe de la siguiente manera:

$$\sum_{a=1}^N (T_{aa_0} + R_{aa_0}) = T_{a_0} + R_{a_0} = 1. \quad (7.139)$$

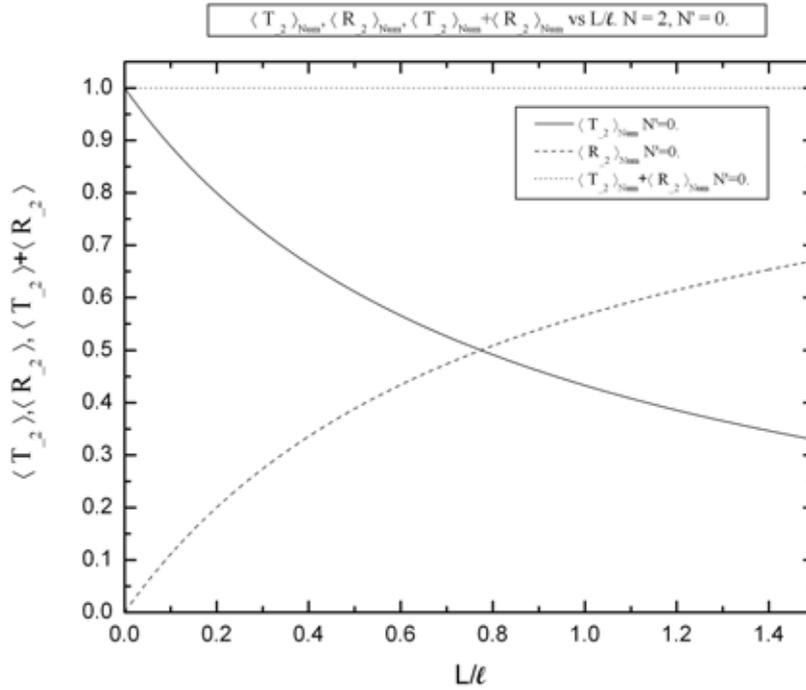


Figura 7.33:  $\langle T_2 \rangle_{Num}, \langle R_2 \rangle_{Num}, \langle T_2 \rangle_{Num} + \langle R_2 \rangle_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Verificación numérica de la conservación de Flujo para  $\langle T_1 \rangle_{Num}$  (curva continua),  $\langle R_1 \rangle_{Num}$  (curva de segmentos) y  $\langle T_1 \rangle_{Num} + \langle R_1 \rangle_{Num}$  (curva de puntos). Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos ( $N = 2$ ), cero canales cerrados ( $N' = 0$ ),  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

Si cada realización satisface la conservación de flujo (7.139), entonces en promedio también debe cumplirse, es decir:

$$\langle T_{a0} \rangle_{k,L} + \langle R_{a0} \rangle_{k,L} = 1. \quad (7.140)$$

De las contribuciones dominantes (7.124) y (7.138) es fácil mostrar que:

$$\langle T_{a0} \rangle_{k,L} = \left[ 1 - \left( \frac{L}{\ell_{a0-}} \right) + \left( \frac{L}{\ell_{a0-}} \right)^2 + \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right] + O\left( \frac{1}{k\ell} \right), \quad (7.141a)$$

$$\langle R_{a0} \rangle_{k,L} = \left[ \left( \frac{L}{\ell_{a0-}} \right) - \left( \frac{L}{\ell_{a0-}} \right)^2 + \left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right] + O\left( \frac{1}{k\ell} \right); \quad (7.141b)$$

por lo tanto, al sumar las expresiones de (7.141) obtenemos:

$$\langle T_{a0} \rangle_{k,L} + \langle R_{a0} \rangle_{k,L} = \left[ 1 + O\left( \frac{L}{\ell} \right)^3 \right] + O\left( \frac{1}{k\ell} \right), \quad (7.142)$$

es decir, que los términos de las contribuciones dominantes, Ecs. (7.124) y (7.138), son consistentes con la conservación de flujo, en el régimen balístico.

#### 7.4.6. Covarianzas: caso multicanal

Para concluir este Capítulo aplicaremos el método de la serie de Born para calcular, al orden más bajo, las Varianzas y Covarianzas de las Intensidades de Reflexión en el régimen balístico. Las definiciones de varianza y covarianza las introdujimos en las ecuaciones (7.69) y (7.70), que en el caso de las intensidades de reflexión reescribimos a continuación:

$$Cov(R_{aa_0}, R_{bb_0})_{k,L} = \langle R_{aa_0} R_{bb_0} \rangle_{k,L} - \langle R_{aa_0} \rangle_{k,L} \langle R_{bb_0} \rangle_{k,L}. \quad (7.143)$$

En el caso particular  $R_{aa_0} = R_{bb_0}$ , la ecuación (7.143) se reduce a la varianza. Al usar la notación compacta de las ecuaciones (2.155)-(2.156), podemos expresar la covarianza (7.143) al orden más bajo en el potencial de la siguiente manera:

$$Cov(R_{aa_0}, R_{bb_0})_{k,L} = \langle (R_{aa_0})_2 (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L} - \langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} \langle (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L} + \dots \quad (7.144)$$

##### Cuarto orden $\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} \langle (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L}$

Las cantidades  $\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L}$  y  $\langle (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L}$  de la ecuación (7.144) las podemos obtener de la ecuación (7.129); por lo tanto:

$$\langle (R_{aa_0})_2 \rangle_{k,L} \langle (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L} = \frac{L^2}{\ell_{aa_0} \ell_{bb_0}} \quad (7.145)$$

##### Cuarto orden $\langle (R_{aa_0})_2 (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L}$

Para calcular el cuarto orden  $\langle (R_{aa_0})_2 (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L}$  se utiliza la notación compacta (2.155), lo que no permite expresar la cantidad deseada como:

$$\langle (R_{aa_0})_2 (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L} = \langle |(r_{aa_0})_1|^2 |(r_{bb_0})_1|^2 \rangle_{k,L} \quad (7.146)$$

El valor esperado que aparece del lado derecho de la ecuación (7.146) se obtiene utilizando la expresión (2.152e) y el cuarto momento del potencial, Ec. (7.16d), de esta manera se obtiene:

$$\begin{aligned} \langle (R_{aa_0})_2 (R_{bb_0})_2 \rangle_{k,L} &= \frac{1}{\ell_{aa_0} \ell_{bb_0}} \left[ L^2 + C^2 (aa_0, bb_0) \left( \frac{\sin \left( \frac{k_a + k_{a_0} + k_b + k_{b_0}}{2} L \right)}{\frac{k_a + k_{a_0} + k_b + k_{b_0}}{2}} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + C^2 (aa_0, bb_0) \left( \frac{\sin \left( \frac{k_a + k_{a_0} - k_b - k_{b_0}}{2} L \right)}{\frac{k_a + k_{a_0} - k_b - k_{b_0}}{2}} \right)^2 \right] \quad (7.147) \end{aligned}$$

**Contribución dominante de la covarianza  $Cov(R_{aa_0}, R_{bb_0})$** 

Al sustituir las expresiones (7.145) y (7.147) en (7.144) obtenemos que, a orden más bajo en el potencial, la covarianza toma la siguiente dependencia:

$$Cov(R_{aa_0}, R_{bb_0}) = \frac{C^2(aa_0, bb_0)}{\ell_{aa_0}\ell_{bb_0}} \left[ \left( \frac{\sin\left(\frac{k_a+k_{a_0}+k_b+k_{b_0}}{2}L\right)}{\frac{k_a+k_{a_0}+k_b+k_{b_0}}{2}} \right)^2 + \left( \frac{\sin\left(\frac{k_a+k_{a_0}-k_b-k_{b_0}}{2}L\right)}{\frac{k_a+k_{a_0}-k_b-k_{b_0}}{2}} \right)^2 \right] + \dots \quad (7.148)$$

Notemos que al igual que las contribuciones dominantes de las intensidades, Ecs. (7.124) y (7.138), la contribución dominante de la covarianza, Ec. (7.148), tampoco depende de los canales cerrados, al menos a este orden en la serie de Born y que el orden dominante en potencias inversas de  $k\ell$  depende de las posibles combinaciones de los índices.

- Si  $a = b$  y  $a_0 = b_0$ , o equivalentemente si  $a = b_0$  y  $a_0 = b$ , entonces la ecuación (7.148) toma la siguiente forma:

$$Cov(R_{aa_0}, R_{aa_0}) = Cov(R_{aa_0}, R_{a_0a}) = Var(R_{aa_0}) \quad (7.149a)$$

$$= (\delta_{ab}\delta_{a_0b_0} + \delta_{ab_0}\delta_{a_0b} - \delta_{aa_0}\delta_{a_0b_0}\delta_{b_0b}) \left[ \left( \frac{L}{\ell_{aa_0}} \right)^2 + \left( \frac{\sin[(k_a+k_{a_0})L]}{(k_a+k_{a_0})\ell_{aa_0}} \right)^2 + \dots \right].$$

- Si  $a = a_0 \neq b = b_0$ , entonces la ecuación (7.148) toma la siguiente forma

$$Cov(R_{aa}, R_{bb}) = \frac{C^2(aa, bb)}{\ell_{aa}\ell_{bb}} \left[ \left( \frac{\sin[(k_a+k_b)L]}{(k_a+k_b)} \right)^2 + \left( \frac{\sin[(k_a-k_b)L]}{(k_a-k_b)} \right)^2 \right] + \dots, \quad a \neq b. \quad (7.149b)$$

Los coeficientes de correlación de la ecuación (7.149b) no son uno, pero por evidencia numérica sabemos que no son despreciables con respecto a la unidad.

- Cualquier otra combinación de índices diferente a las dos anteriores generará coeficientes de correlación que, por evidencia numérica, sabemos que son despreciables. Cuando comparemos el resultado teórico, Ec. (7.148), con las simulaciones numéricas, veremos que en efecto las covarianzas que no sean las de la ecuación (7.149), serán despreciables al orden más bajo en la serie de Born.

De las ecuaciones (7.148) y (7.149) se observa que hay dos posibles comportamiento en potencias inversas de  $k\ell$ :

- En el caso de la ecuación (7.149a), la contribución dominante, al menos cerca  $L = 0$ , es de orden  $1/(k\ell)^0$ ; sin embargo, cuando comparemos con los resultados numéricos veremos que el término de orden  $1/(k\ell)^2$  es importante para valores de  $L \simeq 0$ , ya que para estos valores de  $L$  el seno cuadrado que aparece en (7.149a) es de orden  $L^2$ .
- En cualquier otro caso diferente a (7.149a), incluso (7.149b), las covarianzas serán de orden  $1/(k\ell)^2$ .

### Varianza de la conductancia

La conductancia adimensional  $g$  se escribe en términos de las intensidades de transmisión como:

$$g = T = \sum_{a,a_0=1}^N T_{aa_0} = \sum_{a_0=1}^N T_{\cdot a_0}; \quad (7.150)$$

sin embargo, debido a la propiedad de conservación de flujo, Ec. (7.139), podemos expresar la conductancia de la siguiente manera:

$$g = T = N - R \quad (7.151)$$

siendo

$$R = \sum_{a,a_0=1}^N R_{aa_0} = \sum_{a_0=1}^N R_{\cdot a_0}, \quad (7.152)$$

y  $N$  es el número de canales abiertos. Usando lo anterior se puede expresar el cuadrado del primer momento de la conductancia y el segundo momento de la misma de la siguiente manera:

$$\langle g \rangle_{k,L}^2 = \langle T \rangle_{k,L}^2 = N^2 - 2N \langle R \rangle_{k,L} + \langle R \rangle_{k,L}^2, \quad (7.153)$$

$$\langle g^2 \rangle_{k,L} = \langle T^2 \rangle_{k,L} = N^2 - 2N \langle R \rangle_{k,L} + \langle R^2 \rangle_{k,L}; \quad (7.154)$$

por lo tanto, se satisface la siguiente relación:

$$Var(g) = Var(T) = Var(R), \quad (7.155)$$

La varianza de la intensidad de reflexión total  $Var(R)$  se calcula de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(R)_{k,L} &= \left\langle \sum_{a,a_0=1}^N R_{aa_0} \sum_{b,b_0=1}^N R_{bb_0} \right\rangle_{k,L} - \left\langle \sum_{a,a_0=1}^N R_{aa_0} \right\rangle_{k,L} \left\langle \sum_{b,b_0=1}^N R_{bb_0} \right\rangle_{k,L} \\
 &= \sum_{a,a_0=1}^N \sum_{b,b_0=1}^N \left[ \langle R_{aa_0} R_{bb_0} \rangle_{k,L} - \langle R_{aa_0} \rangle_{k,L} \langle R_{bb_0} \rangle_{k,L} \right] \\
 &= \sum_{a,a_0=1}^N \sum_{b,b_0=1}^N \text{Cov}(R_{aa_0}, R_{bb_0})_{k,L}. \tag{7.156}
 \end{aligned}$$

Las ecuaciones (7.155) y (7.156) nos permiten expresar la varianza de la conductancia como la suma de las covarianzas de las intensidades de reflexión, es decir:

$$\text{Var}(g)_{k,L} = \sum_{a,a_0=1}^N \sum_{b,b_0=1}^N \text{Cov}(R_{aa_0}, R_{bb_0})_{k,L} \tag{7.157}$$

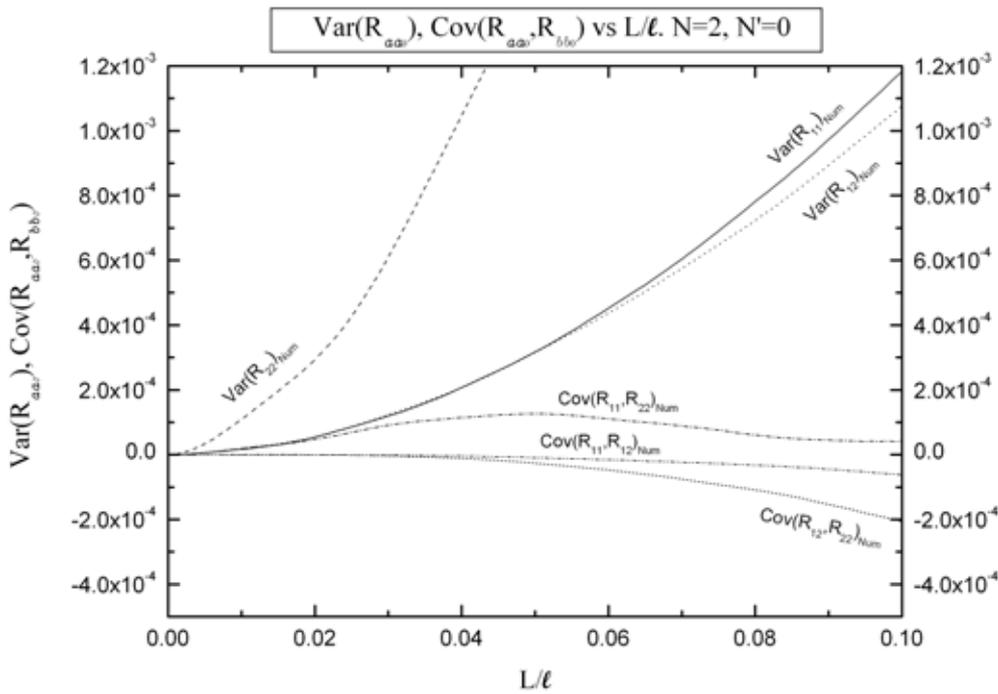


Figura 7.34:  $\text{Cov}(R_{ab}, R_{cd})_{\text{Num}}$  y  $\text{Var}(R_{ab})_{\text{Num}}$  vs  $L/\ell$ . Curvas numéricas de las Varianzas y Covarianzas en el régimen balístico. Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

Utilizando las ecuaciones (7.148), (7.149) y (7.157), podemos escribir la varianza de la conductancia en potencias inversas de  $k\ell$  de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{Var}(g)_{k,L} = & \left[ \left( 2 \sum_{a,a_0=1}^N \frac{1}{\ell_{aa_0}^2} - \sum_{a=1}^N \frac{1}{\ell_{aa}^2} \right) L^2 + O\left(\frac{L}{\ell}\right)^3 \right] \\ & + O\left(\frac{1}{k\ell}\right)^2 \end{aligned} \quad (7.158)$$

El resultado teórico (7.158), únicamente es válido en el régimen balístico.

### Comparación con la simulación numérica

Para comparar el resultado teórico de las covarianzas en el régimen balístico, Ecs. (7.148)-(7.149), con los resultados numéricos, consideraremos nuevamente el caso de dos canales abiertos ( $N = 2$ ), cero canales cerrados ( $N' = 0$ ), y tomaremos el parámetro  $k\ell = 100$

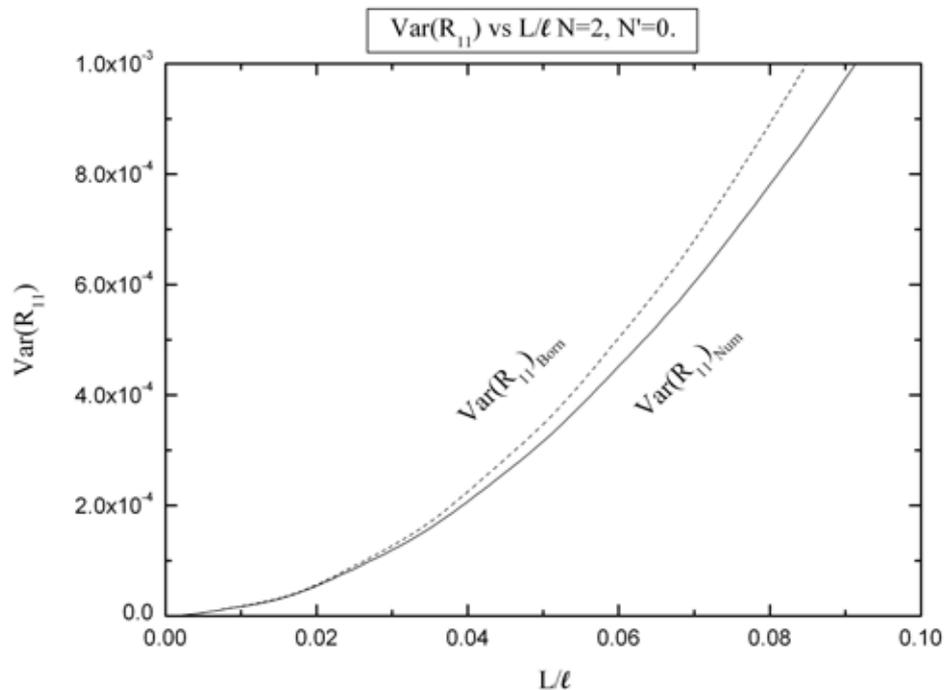


Figura 7.35:  $\text{Var}(R_{11})$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $\text{Var}(R_{11})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

En la figura 7.34 mostramos las curvas numéricas en el régimen balístico de todas las covarianzas que se obtienen al considerar el caso de dos canales abiertos. De dicha figura observamos las siguientes características:

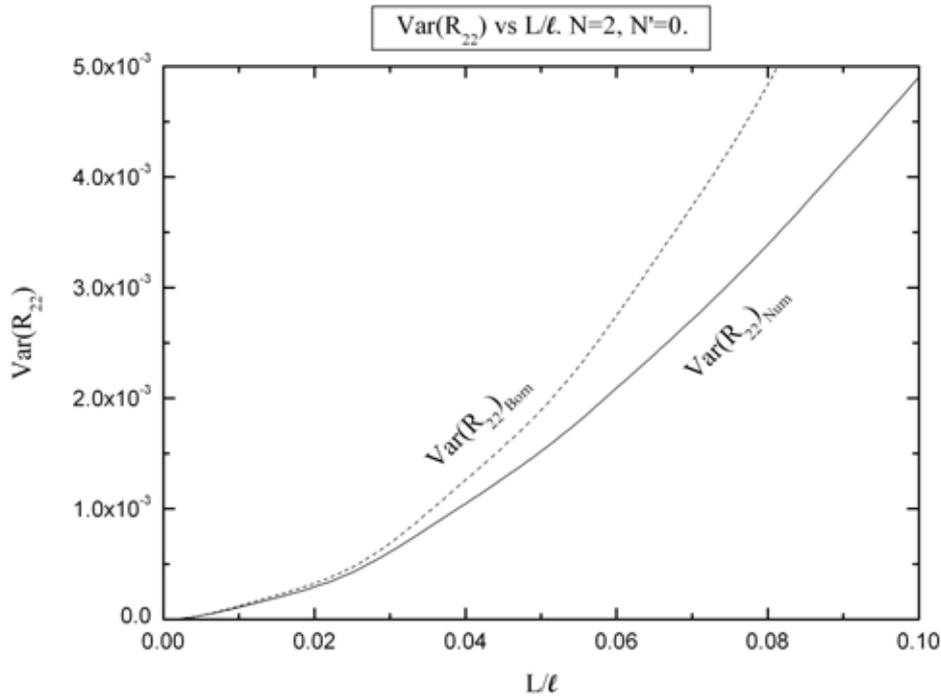


Figura 7.36:  $Var(R_{22})$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(R_{22})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $kl = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

- Todas las varianzas crecen rápidamente con  $L$ , siendo notable el crecimiento de  $Var(R_{22})$
- La única covarianza relevante en este régimen es  $Cov(R_{11}, R_{22})$ , pues las covarianzas  $Cov(R_{11}, R_{12})$  y  $Cov(R_{12}, R_{22})$  comienzan a alejarse del cero para valores de  $L/\ell \sim 0.1$ , región en la que ya no podremos comparar nuestro resultado teórico, Ec. (7.148), con el numérico. El hecho de que las covarianzas  $Cov(R_{11}, R_{12})$  y  $Cov(R_{12}, R_{22})$  sean despreciables en este régimen se puede entender al combinar el resultado teórico y la evidencia numérica; el resultado teórico, Ecs. (7.148)-(7.149), predice que al orden más bajo en la serie de Born estas covarianzas son proporcionales, respectivamente, al cuadrado de los coeficientes de correlación  $C(11, 12)$  y  $C(12, 22)$ . De las simulaciones numéricas sabemos que estos dos coeficientes de correlación son muy pequeños comparados con el coeficiente de correlación  $C(11, 22) = 0.66685$ , que es el factor de la covarianza  $Cov(R_{11}, R_{22})$ ; por lo tanto, el primer término relevante de las covarianzas  $C(11, 12)$  y  $C(12, 22)$  se obtendrá del sexto orden de la serie de Born.
- Las varianzas  $Var(R_{11})$  y  $Var(R_{12})$  muy parecidas en gran parte del intervalo;

análogamente, esto se puede entender al combinar el resultado teórico y la evidencia numérica, pues la ecuación (7.149a) nos damos cuenta que las dos curvas tiene la misma estructura y de las simulaciones numéricas sabemos que  $\ell_{11}/\ell_{12} \sim 0.98$

En las figuras 7.35-7.38 comparamos, en el régimen balístico, las curvas numéricas relevantes de la figura 7.34 con las correspondientes curvas teóricas, las cuales obtendremos de la ecuación (7.149). De estas figuras observamos lo siguiente:

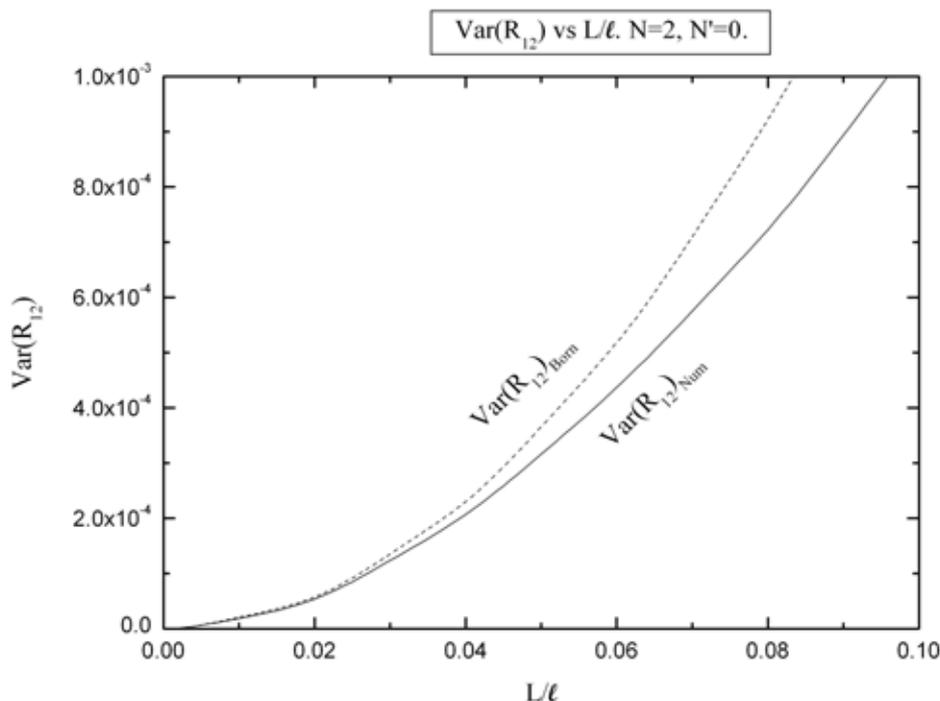


Figura 7.37:  $Var(R_{12})$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(R_{12})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

- En el caso de las varianzas, Figs. 7.35-7.37, el acuerdo entre el resultado teórico y el numérico es cuantitativamente bueno para valores muy pequeños de  $L/\ell$ , siendo bueno hasta  $L/\ell \sim 0.04$  para  $Var(R_{11})$ ,  $L/\ell \sim 0.02$  para  $Var(R_{22})$  y  $0.03$  para  $Var(R_{12})$ . Para valores de  $L/\ell$  superiores a los anteriores se observa que las contribuciones de orden superior en la serie de Born son importantes, sin embargo, el comportamiento cualitativo sigue siendo bueno hasta este orden, pues la contribución de orden  $L^2$  sigue siendo importante.
- En el caso de la covarianza, Fig 7.38, el comportamiento cuantitativo sólo es bueno para valores de  $L/\ell \sim 0.025$ , lo que se debe a que sólo tenemos los primeros

términos de la serie; sin embargo, el comportamiento cualitativo es muy bueno, ya que la “joroba” que logramos apreciar para esta curva se logra reproducir, por una parte con la combinación de las dos funciones seno que predice la ecuación la ecuación (7.149b) y por otra con el *adecuado coeficiente de correlación*  $C$  (11, 22), que obtuvimos de nuestro model microscópico. Esta curva teórica no la hubieramos podido obtener con el modelo de Mello y Tomsovic [18], pues en ese modelo el coeficiente de correlación  $C$  (11, 22) es cero [ver ecuación (7.149b)].

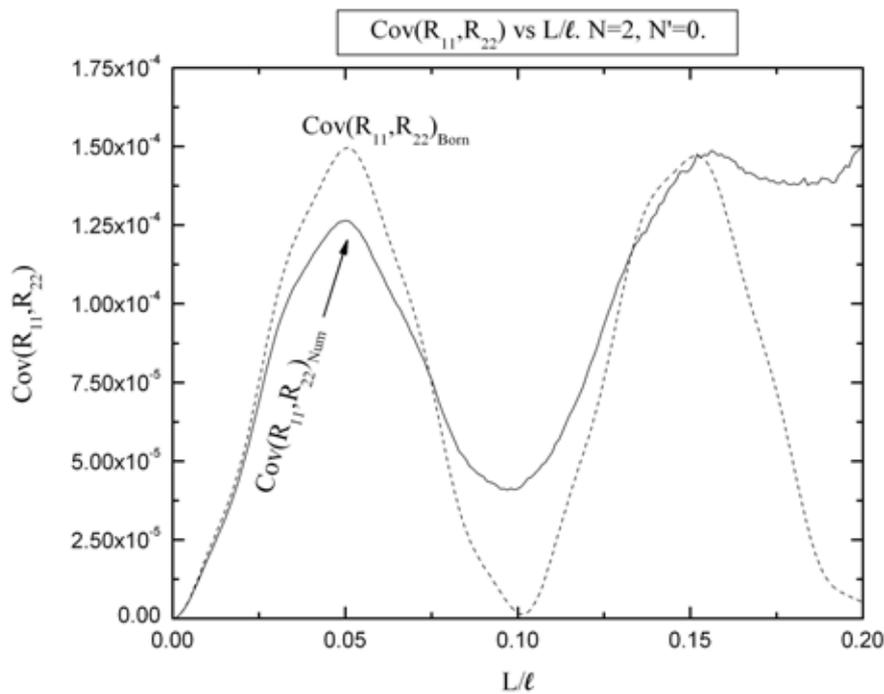


Figura 7.38:  $Cov(R_{11}, R_{22})$  vs  $L/l$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la covarianza  $Cov(R_{11}, R_{22})$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $kl = 100$ ,  $d/l = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

Por último, en la figura 7.39 comparamos el resultado teórico para el valor esperado de la conductancia, Ec. (7.158) [incluyendo las primeras correcciones de orden  $1/(kl)^2$ ], con el correspondiente resultado numérico. Al igual que en el caso de las varianzas y covarianzas de las intensidades individuales el acuerdo entre la curva teórica y numérica sólo se da hasta valores de  $L/l \sim 0.02$ ; sin embargo, el acuerdo cualitativo es aceptablemente bueno.

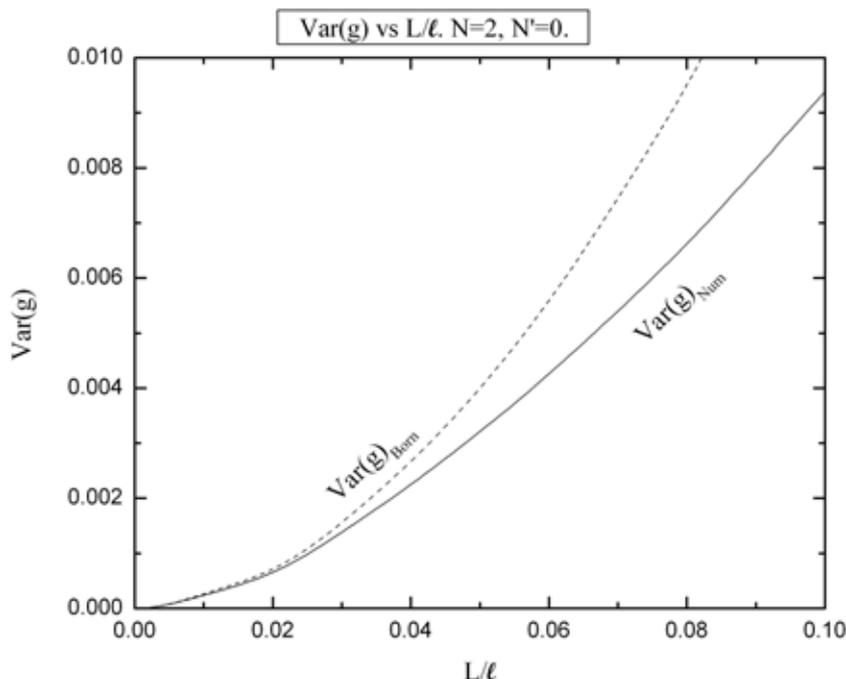


Figura 7.39:  $Var(g)$  vs  $L/\ell$ . Comparación entre la curva teórica (línea de segmentos) y la numérica (línea continua) de la varianza  $Var(g)$ . Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

### Las varianzas y covarianzas más allá del régimen balístico

La simulación numérica nos permite obtener resultados más allá del régimen balístico, ya que ésta resuelve el problema de la dispersión de manera exacta mediante el método de la matriz de dispersión: ver sección 2.5. Desafortunadamente más allá del régimen balístico no tenemos un resultado teórico con el que podamos comparar.

En la figura 7.40 mostramos las curvas numéricas de las varianzas  $Var(R_{ab})$  y las covarianzas  $Cov(R_{ab}, R_{cd})$  en el intervalo  $L/\ell \in [0, 8]$ , es decir, más allá del régimen balístico. Los cálculos se realizaron considerando dos canales abiertos ( $N = 2$ ) y cero canales cerrados  $N' = 0$ .

De la figura 7.40 observamos las siguientes características:

- En el caso de las varianzas observamos al aumentar el valor de  $L/\ell$  éstas tienden a un valor constante, siendo aproximadamente 0.09 para  $Var(R_{11})$  y  $Var(R_{22})$ , mientras que  $Var(R_{12})$  tiende aproximadamente a 0.085. Por otro lado, las covarianzas  $Cov(R_{11}, R_{12})$  y  $Cov(R_{12}, R_{22})$  son negativas para todo valor de  $L/\ell$ , mientras que la covarianza  $Cov(R_{11}, R_{22})$  es positiva para todo valor  $L/\ell$ . Al igual que las varianzas, las covarianzas también tienden a un valor constante siendo

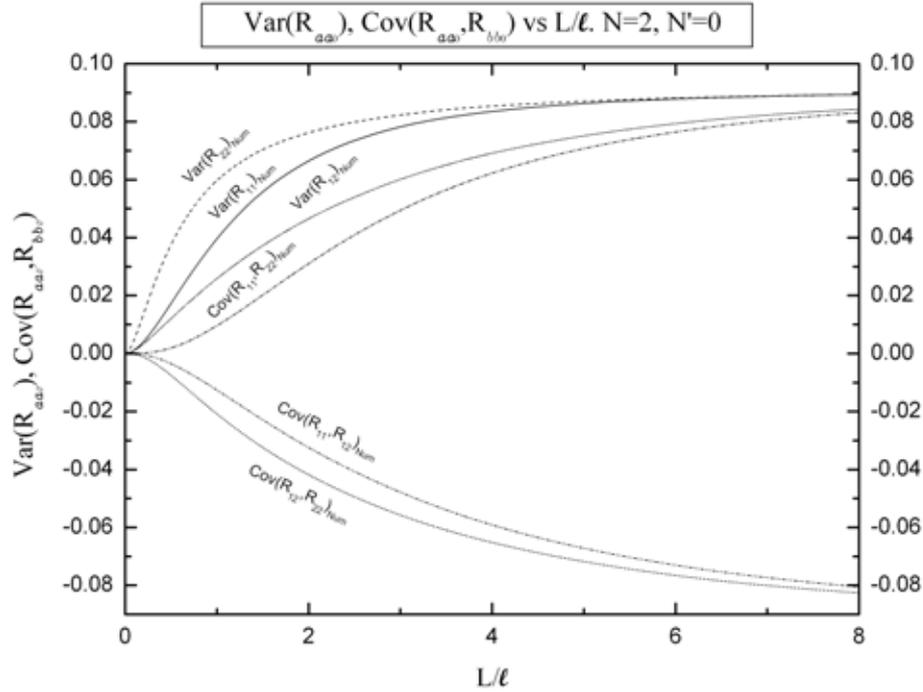


Figura 7.40:  $Cov(R_{aa0}, R_{bb0})_{Num}$  y  $Var(R_{aa0})_{Num}$  vs  $L/\ell$ . Covarianzas y varianzas numéricas de las intensidades de reflexión más allá del régimen balístico. Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

aproximadamente  $-0.08$  para  $Cov(R_{11}, R_{12})$ ,  $-0.082$  para  $Cov(R_{12}, R_{22})$  y  $0.085$  para  $Cov(R_{11}, R_{22})$ .

- En la figura 7.34 observamos que las varianzas  $Var(R_{11})$  y  $Var(R_{12})$  son muy parecidas en el régimen balístico, pero en la figura 7.40 nos damos cuenta que al alejarnos de este régimen las curvas comienzan a separarse.
- En la figura 7.34 ya habíamos observado, en el régimen balístico, que la curva de  $Var(R_{22})$  crece muy rápidamente comparado con las otras varianzas y covarianzas. En la 7.38 se observa que ese crecimiento se sigue dando fuera del régimen balístico hasta que la curva tiende aun valor fijo.
- De las figuras 7.34 y 7.38 observamos que la covarianza  $Cov(R_{11}, R_{22})$  tiene un comportamiento oscilatorio en el régimen balístico; sin embargo, de la figura 7.34 nos damos cuenta que al considerar valores de  $L/\ell$  fuera de dicho régimen el comportamiento oscilatorio deja de ser relevante, dando lugar a una curva suave que crece hasta un valor asintótico.

Una vez que tenemos los resultados numéricos para todas las varianzas y covarianzas de las intensidades de reflexión, mediante la ecuación (7.157) se obtiene la curva de

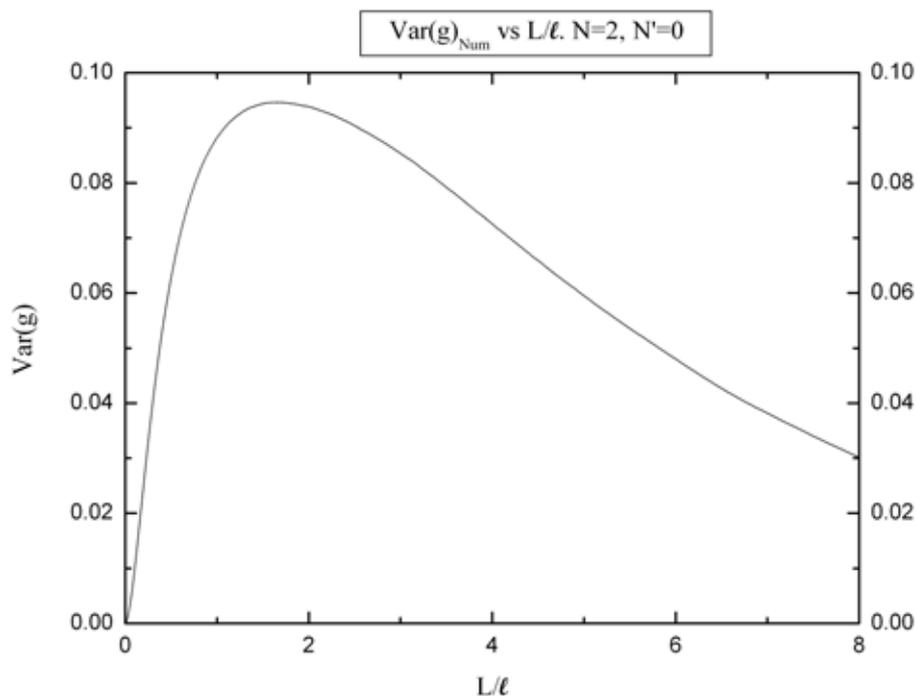


Figura 7.41: Varianza de la conductancia más allá del régimen balístico. Los cálculos se realizaron con dos canales abiertos,  $N = 2$ , cero canales cerrados  $N' = 0$ ,  $k\ell = 100$ ,  $d/\ell = 10^{-3}$  y  $10^6$  realizaciones del desorden microscópico.

la varianza de la conductancia, la cual se muestra en la figura 7.41. En esta figura observamos que  $Var(g)$  tiene diferentes comportamientos dependiendo del régimen en el que estemos. En la región que separa el régimen balístico,  $L/\ell \ll 1$ , del régimen aislante,  $L/\ell \gg N$ , la derivada de la varianza  $Var(g)$  cambia de signo, dando lugar a una pequeña región en la que la pendiente de la curva no difiere mucho de cero. Cuando el número de canales abiertos aumenta esa pequeña región se hace cada vez más grande dando lugar a la región difusiva.

Durante los años ochentas se observó que en sistemas conductores a muy bajas temperaturas, con una longitud grande comparada con el camino libre medio ( $L \gg \ell$ ) y para un número de canales muy grandes ( $N \gg 1$ ), tenía lugar el fenómeno conocido con el nombre *fluctuaciones universales de la conductancia* (UFC por sus siglas en inglés). Este fenómeno se observó en la región difusiva, es decir, para sistemas que cumplieran la siguiente condición:

$$1 \ll \frac{L}{\ell} \ll N. \quad (7.159)$$

En este fenómeno se observa que la varianza de la conductancia no depende del número de canales, ni del tamaño del sistema ni del valor promedio de la conductancia y el valor numérico de ésta es  $2/15$ . En la referencia [25] Pier Mello obtiene teóricamente el

término dominante de la varianza de la conductancia siendo este  $2/15$ . Por su puesto, la figura 7.41 no exhibe el fenómeno de las *fluctuaciones universales de la conductancia*, pero sí observamos en ésta que el máximo no está muy lejos del valor  $2/15 \sim 0.13$ . Lo que esperamos es que al aumentar el número de canales abiertos en las simulaciones, el máximo de esta curva se aproxime a  $2/15$  y que la región difusiva aumente.



# Conclusiones

El resultado principal del presente trabajo es la ecuación de difusión, Ec. (4.41). Esta ecuación describe la evolución con la longitud (del sistema desordenado) de un observable macroscópico que podemos expresar como función de la matriz de transferencia del sistema desordenado. El punto de partida es un potencial constituido por una secuencia de unidades dispersoras colocadas en la dirección longitudinal de la guía. Cada unidad dispersora se idealizó como un potencial delta en la dirección longitudinal de la guía, pero su dependencia transversal se supuso *arbitraria*: ver ecuación (3.12). Como vimos en la sección 4.3.1, la matriz de transferencia (reducida o de canales abiertos) del Bloque Constitutivo (BB) se construyó multiplicando las correspondientes matrices de los dispersores individuales, Ec. (4.10), las cuales se expresan en términos del potencial efectivo [ver sección 3.3.2 ecuaciones (3.42)-(3.46)]; por esta razón, el modelo estadístico se definió en términos del potencial efectivo [ver ecuaciones (3.43), (3.49) y (4.16)]; en dicho modelo consideramos que los dispersores son estadísticamente independiente, Ec. (4.16f), por lo que únicamente trabajamos con *desorden descorrelacionado*. Utilizando este modelo estadístico del potencial y el *límite denso de dispersión débil* (DWSL) [en el que cada potencial delta representa un dispersor débil y la densidad lineal de los dispersores individuales es muy grande, de tal manera que los caminos libres medios  $\ell_{ab}$  fijos, ver ecuación Ec. (4.32)], *derivamos* las propiedades estadísticas del bloque constitutivo (BB) de longitud  $\delta L$ . Una vez obtenidas las propiedades estadísticas del bloque constitutivo añadimos éste a un sistema de longitud  $L$  y utilizando la regla de combinación de las matrices de transferencia, Ec. (4.4), y que ambos sistemas son estadísticamente independientes, obtuvimos la ecuación de difusión (4.41). Mediante un procedimiento análogo, se obtuvo la ecuación de difusión en la aproximación de longitud de onda corta (SWLA), Ec. (4.56), que representa un modelo simplificado que permitió hacer conexión con algunos trabajos previos, en los que la energía no aparecía explícitamente en el análisis.

En el DWSL, las propiedades estadísticas del BB y del sistema completo, únicamente dependen de los caminos libres medios  $\ell_{ab}$  que a su vez sólo dependen del segundo momento del potencial efectivo, Ec. (4.22); por lo tanto, los momentos del potencial efectivo superiores al segundo son irrelevantes en el DWSL; esto sugiere la existencia de un *Teorema de Límite Central Generalizado*, ya que al especificar los caminos libres medios la ecuación de difusión es *universal*, es decir, independiente de otros detalles de la estadística microscópica. Una característica importante del presente análisis, comparado con trabajos previos, es que la energía se toma en cuenta en la descripción, pues la ecuación depende de ésta a través de los coeficientes de difusión generalizados, Ec. (4.39b), los cuales dependen explícitamente de los números de onda longitudinales, Ec.

(4.34c), y de la longitud  $L$  del sistema.

Desafortunadamente no hemos podido resolver la ecuación de difusión para observables de interés físico (por ejemplo las intensidades de transmisión y de reflexión) ni siquiera en el régimen simplificado SWLA (ver sección 5.3.2). La razón por la que no hemos podido resolver la ecuación de difusión se debe a que los sistemas de ecuaciones que ésta genera no cierran, es decir, obtenemos menos ecuaciones diferenciales que cantidades por resolver [ver ecuaciones (5.35a) y (5.37a) y la discusión al final de la sección 5.3.2]; por lo tanto, ni analítica ni numéricamente hemos podido abordar el problema; solamente en el caso de un canal abierto ( $N = 1$ ) y para un observable en particular, pudimos resolver la ecuación de difusión, ya que es en ese caso el sistema de ecuaciones sí cerró.

Debido a que no hemos podido tratar la ecuación de difusión, se desarrolló un método numérico alternativo a la ecuación de difusión: el “Random Walk in the Transfer Matrix Space” (ver Capítulo 6). Los resultados obtenidos con este método muestran un acuerdo excelente con los correspondientes cálculos microscópicos: ambas simulaciones numéricas se realizaron en el SWLA. Este método se utilizó para obtener los valores esperados de las intensidades de transmisión, y de reflexión, Figs 6.2-6.3, así como la función de distribución de la conductancia, Figs. 6.4-6.5.

En el contexto de la ecuación de DMPK [16] se desarrolló, para  $N \gg 1$  (siendo  $N$  el número de canales abiertos que admite la guía), un procedimiento iterativo que permitió obtener el valor esperado de la conductancia como un desarrollo en potencias inversas de  $N$ . En la referencia [18] se demostró que al considerar el modelo de canales equivalentes (en el que todos los caminos libres  $\ell_{ab}$  medios son iguales) la ecuación de difusión de Mello y Tomsovic se reduce a la ecuación de DMPK. Tomando en cuenta lo anterior se intentó hacer, en el SWLA, un *tratamiento perturbativo* de la ecuación de difusión *alrededor del modelo de canales equivalentes*; desafortunadamente no pudimos justificar algunas de las suposiciones que este tratamiento requiere, por lo que no incluimos ese material en el presente trabajo.

En el material presentado hasta el Capítulo 6, los canales cerrados o modos evanescentes, Ec. (2.21), sólo se tomaron en cuenta a través del potencial efectivo  $(\hat{u}_r)_{ab}$ , Ec. (3.49), pues como vimos en la sección 4.3.1 la matriz de transferencia reducida del BB se construyó multiplicando las matrices reducidas de los dispersores individuales, las cuales se expresan en términos del potencial efectivo. De igual manera, cuando añadimos el BB al sistema de longitud  $L$ , calculamos la matriz de transferencia del sistema de longitud  $L + \delta L$  aplicando la propiedad multiplicativa (4.4); sin embargo, esto representa una aproximación que no considera de manera apropiada las transiciones a canales cerrados, pues la propiedad multiplicativa es válida para la matriz de transferencia extendida y no para la reducida: ver sección 2.5.4, ecuación (2.141b); no obstante lo anterior, los resultados obtenidos mediante el método del caminante aleatorio, que no considera de manera apropiada los canales cerrados, muestran un excelente acuerdo con la solución numérica de la ecuación de Schrödinger que sí considera transiciones a canales cerrados. Este acuerdo sugiere que las contribuciones de los canales cerrados a los promedios estadísticos de los observables mencionados no son apreciables; sin embargo, interesados en profundizar el estudio de las propiedades estadísticas del bloque constitutivo, en el capítulo 7 desarrollamos un método perturbativo basado en la serie de Born, sólo es válido en el régimen balístico y en la aproximación de longitud de onda corta. Este

método permitió tomar en cuenta la contribución de los canales cerrados en los promedios estadísticos. Los resultados teóricos basados en este método demostraron que, en el régimen balístico, los valores esperados de las amplitudes tienen *contribuciones explícitas de los canales cerrados* que no son despreciables; además, mediante simulaciones numéricas se exhibe que las contribuciones de los canales cerrados son relevantes para estas cantidades incluso más allá del régimen balístico (ver figuras 7.17, 7.18, 7.21 y 7.22). Por otro lado, los resultados teóricos obtenidos para las intensidades promedio mostraron que, en el régimen balístico, estas cantidades *sí tiene contribuciones de los canales cerrados*, pero que son *despreciables* con respecto a la contribución dominante de canales abiertos; además, las simulaciones numéricas exhiben que lo anterior es cierto más allá del régimen balístico (ver figuras 7.26, 7.27 y 7.31), lo cual es consistente con los resultados obtenidos mediante el método del caminante aleatorio del Capítulo 6.

La razón por la que nos interesa profundizar en el estudio de las propiedades estadísticas del bloque constitutivo es que este sistema es de interés en sí mismo, pues su estudio puede motivar la realización de experimentos en laboratorio, no sólo en sistemas electrónico sino también en sistemas de ondas clásicas como en guías de ondas electromagnéticas o sistemas elásticos.

Con el objeto de comparar los resultados teóricos obtenidos en el régimen balístico (capítulo 7) se realizaron simulaciones numéricas con las que pudiésemos comparar esos resultados. Como ya mencionamos, el acuerdo entre el resultado teórico y las simulaciones fue bueno. Los resultados que obtenemos mediante las simulaciones numéricas son válidos fuera del régimen balístico, ya que el programa resuelve de manera exacta el problema; por lo tanto, este programa puede utilizarse para justificar, mediante evidencia numérica, aproximaciones a nivel de la ecuación de difusión, que permitan obtener un sistema de ecuaciones que *sí cierre* y que se preste a un tratamiento analítico, pues dada la dificultad que en repetidas ocasiones hemos mencionado, esta ecuación no se ha podido resolver.



# Apéndice A

## Las matriz de dispersión de un potencial delta: $N = 2$ , $N' = 0$ y $E \rightarrow \mathcal{E}_2^+$

### A.1. La matriz de dispersión

Consideremos que en la guía de ondas sólo hay un potencial delta [ver ecuación Ec. (3.10)]. Mediante el procedimiento que se expuso en la sección 3.3.2 se obtiene que las amplitudes de reflexión se expresan de la siguiente manera:

$$r_{11} = r'_{11} = \frac{1}{\Delta} \left[ \frac{u_{11}}{2ik_1} \left( 1 - \frac{u_{22}}{2ik_2} \right) - \frac{|u_{12}|^2}{4k_1k_2} \right], \quad (\text{A.1a})$$

$$r_{12} = r'_{12} = -\frac{i}{\Delta} \frac{u_{12}}{2\sqrt{k_1k_2}}, \quad (\text{A.1b})$$

$$r_{21} = r'_{21} = -\frac{i}{\Delta} \frac{u_{21}}{2\sqrt{k_1k_2}}, \quad (\text{A.1c})$$

$$r_{22} = r'_{22} = \frac{1}{\Delta} \left[ \frac{u_{22}}{2ik_2} \left( 1 - \frac{u_{11}}{2ik_1} \right) - \frac{|u_{12}|^2}{4k_1k_2} \right]. \quad (\text{A.1d})$$

mientras que las expresiones de las amplitudes de transmisión son:

$$t_{11} = t'_{11} = \frac{1}{\Delta} \left( 1 - \frac{u_{22}}{2ik_2} \right), \quad (\text{A.2a})$$

$$t_{12} = t'_{12} = -\frac{i}{\Delta} \frac{u_{12}}{2\sqrt{k_1 k_2}}, \quad (\text{A.2b})$$

$$t_{21} = t'_{21} = -\frac{i}{\Delta} \frac{u_{21}}{2\sqrt{k_1 k_2}}, \quad (\text{A.2c})$$

$$t_{22} = t'_{22} = \frac{1}{\Delta} \left( 1 - \frac{u_{11}}{2ik_1} \right), \quad (\text{A.2d})$$

donde hemos definido la cantidad

$$\Delta = \left( 1 - \frac{u_{11}}{2ik_1} \right) \left( 1 - \frac{u_{22}}{2ik_2} \right) + \frac{u_{12}u_{21}}{4k_1 k_2}. \quad (\text{A.3})$$

## A.2. El límite $k_2 \rightarrow 0^+$

Debido a que estamos considerando dos canales abiertos, de la ecuación (2.14) se obtiene que el número de onda  $k$  de la partícula incidente y el ancho de la guía  $W$  deben satisfacer la siguiente relación:

$$2 \leq \frac{kW}{\pi} \quad (\text{A.4})$$

Supongamos que el ancho de la guía es fijo y disminuimos el valor de  $k$  hasta que éste tome el valor  $2\pi/W$ , entonces en la ecuación (A.4) se cumplirá la igualdad, lo que propiciará que  $k_2 = 0$ . Para estudiar el comportamiento de las amplitudes de reflexión y transmisión debemos considerar el límite  $k_2 \rightarrow 0^+$  en las ecuaciones (A.1) y (A.2). Al hacer lo anterior se obtiene que las amplitudes de reflexión se comportan de la siguiente manera

$$r_{11} = r'_{11} = -\frac{|u_{12}|^2 - u_{11}u_{22}}{(|u_{12}|^2 - u_{11}u_{22}) + 2ik_1 u_{22}}, \quad (\text{A.5a})$$

$$r_{12} = r'_{12} = 0, \quad (\text{A.5b})$$

$$r_{21} = r'_{21} = 0, \quad (\text{A.5c})$$

$$r_{22} = r'_{22} = -1, \quad (\text{A.5d})$$

mientras que las de transmisión

$$t_{11} = t'_{11} = \frac{2ik_1 u_{22}}{(|u_{12}|^2 - u_{11}u_{22}) + 2ik_1 u_{22}}, \quad (\text{A.6a})$$

$$t_{12} = t'_{12} = 0, \quad (\text{A.6b})$$

$$t_{21} = t'_{21} = 0, \quad (\text{A.6c})$$

$$t_{22} = t'_{22} = 0, \quad (\text{A.6d})$$

De las expresiones (A.5) y (A.6) obtenemos que conforme  $k$  se aproxima al umbral (por arriba) se da el siguiente comportamiento:

- En el canal 2 hay una reflexión total en el mismo canal; es decir, conforme  $k$  se acerca al umbral el valor de la amplitud de reflexión  $r_{22}$  tiende a la unidad y el de  $t_{22}$  tiende a cero.
- Cuando la incidencia se da en el canal del umbral, no hay reflexión ni transmisión al canal abierto 1.
- Si se incide en el canal abierto 1 hay transmisión y reflexión en el mismo canal, pero no al canal 2.

En conclusión, cuando la energía es tal que  $k$  está muy cerca del umbral, entonces el canal del umbral “se desacopla ” del resto de los canales siendo imposible que haya transmisión o reflexión a dicho canal.



# Apéndice B

## Algunos detalles de los resultados analíticos

### B.1. Detalles de la solución exacta en el caso $N = 1$

#### B.1.1. El régimen general: ecuación (4.37a)

En esta sección presentaremos los detalles más importantes relacionados con la solución exacta en el caso  $N = 1$  que presentamos en la sección 5.2. La cantidad  $K_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L)$ , Ec. (4.34b), y los coeficientes de difusión que se utilizan en la ecuación de difusión en el caso  $N = 1$  son, respectivamente:

$$K^{ij,hl} = \left[ (-1)^i + (-1)^{j+1} + (-1)^h + (-1)^{l+1} \right] k, \quad (\text{B.1a})$$

$$D^{ij,hl}(k, L) = \frac{(-1)^{i+h+1}}{2\ell} e^{iK^{ij,hl}L}. \quad (\text{B.1b})$$

En las expresiones de (B.1) hemos omitido los índices de canal, pues todos toman el valor 1.

Si multiplicamos la ecuación (5.4b) por la cantidad  $e^{ix_0s}$ , podemos reescribir la pareja de ecuaciones (5.4) como el siguiente sistema de tres ecuaciones acopladas:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial A}{\partial s} = A + 2b_r, \quad (\text{B.2a})$$

$$\frac{\partial b_r}{\partial s} + x_0 b_i = -A - 2b_r, \quad (\text{B.2b})$$

$$\frac{\partial b_i}{\partial s} - x_0 b_r = 0, \quad (\text{B.2c})$$

donde hemos definido la función real:

$$A(s) = 2 \langle \alpha \alpha^* \rangle_{x_0, s} - 1, \quad (\text{B.3a})$$

y la función compleja

$$b(s) = b_r(s) + i b_i(s) = e^{ix_0 s} \langle \alpha \beta \rangle_{x_0, s}, \quad (\text{B.3b})$$

siendo  $b_r(s)$  y  $b_i(s)$  la parte real e imaginaria, respectivamente, de la función  $b(s)$ . De las condiciones iniciales (5.6) obtenemos que las condiciones iniciales para el sistema (B.2) son las siguientes:

$$A(0) = 1, \quad (\text{B.4a})$$

$$b_r(0) = 0, \quad (\text{B.4b})$$

$$b_i(0) = 0. \quad (\text{B.4c})$$

El sistema (5.6) se resuelve mediante el método de la transformada de Laplace. Al aplicar la definición de la transformada de Laplace obtenemos que las cantidades  $A(s)$ ,  $b_r(s)$  y  $b_i(s)$  se obtienen de la siguiente manera<sup>1</sup>:

$$\tilde{A}(p) = \int_0^\infty e^{-ps} A(s) ds, \quad (\text{B.5a})$$

$$\tilde{b}_r(p) = \int_0^\infty e^{-ps} b_r(s) ds, \quad (\text{B.5b})$$

$$\tilde{b}_i(p) = \int_0^\infty e^{-ps} b_i(s) ds. \quad (\text{B.5c})$$

Haciendo uso de las propiedades de esta transformada, podemos expresar las transformadas de las derivadas de (B.2) en términos de las correspondientes transformadas de (B.5) y de las condiciones iniciales (B.4), es decir,

$$\int_0^\infty e^{-ps} \frac{\partial A(s)}{\partial s} ds = p \tilde{A}(p) - A(0), \quad (\text{B.6a})$$

$$\int_0^\infty e^{-ps} \frac{\partial b_r(s)}{\partial s} ds = p \tilde{b}_r(p) - b_r(0), \quad (\text{B.6b})$$

$$\int_0^\infty e^{-ps} \frac{\partial b_i(s)}{\partial s} ds = p \tilde{b}_i(p) - b_i(0); \quad (\text{B.6c})$$

por lo tanto, al aplicar este método al sistema (B.2) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones algebraicas:

---

<sup>1</sup>Para evitar confusión con nuestra variable  $s = L/\ell$ , Ec. (5.5a), denotaremos la variable en el espacio transformado de Laplace con la letra  $p$  en vez de la letra  $s$ , que es la notación usual.

$$\frac{1}{2} (p\tilde{A} - 1) = \tilde{A} + 2\tilde{b}_r \quad (\text{B.7a})$$

$$p\tilde{b}_r + x_0\tilde{b}_i = -\tilde{A} - 2\tilde{b}_r \quad (\text{B.7b})$$

$$p\tilde{b}_i - x_0\tilde{b}_r = 0 \quad (\text{B.7c})$$

del cual podemos despejar las cantidades  $\tilde{A}(p)$ ,  $\tilde{b}_r(p)$  y  $\tilde{b}_i(p)$ , obteniendo así:

$$\tilde{A}(p) = \frac{p^2 + 2p + x_0^2}{p^3 + x_0^2p - 2x_0^2} \quad (\text{B.8a})$$

$$\tilde{b}_r(p) = -\frac{p}{p^3 + x_0^2p - 2x_0^2}, \quad (\text{B.8b})$$

$$\tilde{b}_i(p) = -\frac{x_0}{p^3 + x_0^2p - 2x_0^2}. \quad (\text{B.8c})$$

Una vez que tenemos las cantidades  $\tilde{A}(p)$ ,  $\tilde{b}_r(p)$  y  $\tilde{b}_i(p)$  usamos la fórmula de Mellin [48] para invertir la transformada de Laplace y obtener las funciones deseadas  $A(s)$ ,  $b_r(s)$  y  $b_i(s)$ , siendo estas:

$$A(s) = \frac{p_1^2 + 2p_1 + x_0^2}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{p_1s} + \frac{p_2^2 + 2p_2 + x_0^2}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{p_2s} + \frac{p_3^2 + 2p_3 + x_0^2}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{p_3s}, \quad (\text{B.9a})$$

$$b_r(s) = -\left[ \frac{p_1}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{p_1s} + \frac{p_2}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{p_2s} + \frac{p_3}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{p_3s} \right] \quad (\text{B.9b})$$

$$b_i(s) = -\left[ \frac{x_0}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{p_1s} + \frac{x_0}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{p_2s} + \frac{x_0}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{p_3s} \right]. \quad (\text{B.9c})$$

donde  $p_1$ ,  $p_2$  y  $p_3$  son las raíces del polinomio cúbico<sup>2</sup> que aparece en el denominador de las tres cantidades de (B.8). Estas raíces están dadas por las siguientes expresiones

$$p_1 = u + v, \quad (\text{B.10a})$$

$$p_2 = -\frac{1}{2}(u + v) + i\frac{\sqrt{3}}{2}(u - v), \quad (\text{B.10b})$$

$$p_3 = -\frac{1}{2}(u + v) - i\frac{\sqrt{3}}{2}(u - v), \quad (\text{B.10c})$$

---

<sup>2</sup>La obtención de estas raíces se realizó mediante el método de Tartaglia-Cardano [49]

con

$$u = \frac{x_0}{\sqrt{3}} \left[ \sqrt{1 + \left( \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right)^2} + \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right]^{1/3}, \quad (\text{B.11a})$$

$$v = -\frac{x_0}{\sqrt{3}} \left[ \sqrt{1 + \left( \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right)^2} - \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right]^{1/3}, \quad (\text{B.11b})$$

Con las expresiones de (B.9) y las definiciones de (B.3) se obtiene la solución exacta (5.7).

### B.1.2. La aproximación de longitud de onda corta (SWLA): ecuación (4.37b)

Cuando el número de onda  $k$  y el camino libre medio  $\ell$  son tales que la cantidad  $x_0 = 2k\ell \gg 1$ , podemos desarrollar las cantidades  $u$  y  $v$  de (B.11) en potencias inversas de  $x_0$ . Los desarrollos que obtenemos, respectivamente, son los siguientes:

$$u = \frac{x_0}{\sqrt{3}} \left[ 1 + \frac{\sqrt{3}}{x_0} + \frac{3}{2x_0^2} - \frac{4\sqrt{3}}{x_0^3} - \frac{105}{8x_0^4} + \dots \right], \quad (\text{B.12a})$$

$$v = -\frac{x_0}{\sqrt{3}} \left[ 1 - \frac{\sqrt{3}}{x_0} + \frac{3}{2x_0^2} + \frac{4\sqrt{3}}{x_0^3} - \frac{105}{8x_0^4} + \dots \right], \quad (\text{B.12b})$$

con los que podemos aproximar las raíces  $p_1$ ,  $p_2$  y  $p_3$ , Ec. (B.10), de la siguiente manera:

$$p_1 \simeq 2 - \frac{8}{x_0^2} + O\left(\frac{1}{x_0^4}\right), \quad (\text{B.13a})$$

$$p_2 \simeq (-1 + ix_0) + \left(\frac{4}{x_0^2} + i\frac{3}{2x_0}\right) + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right), \quad (\text{B.13b})$$

$$p_3 \simeq (-1 - ix_0) + \left(\frac{4}{x_0^2} - i\frac{3}{2x_0}\right) + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right). \quad (\text{B.13c})$$

Los desarrollos en potencias inversas de  $x_0$  de (B.13) nos permiten escribir las soluciones exactas (B.9) como series de potencias en  $1/x_0$ , obteniendo así:

$$A(s) = e^{2s} + \frac{4}{x_0^2} [-(1+2s)e^{2s} + e^{-s} \cos x_0 s] + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right), \quad (\text{B.14a})$$

$$b_r(s) = -\frac{1}{x_0} e^{-s} \sin x_0 s + \frac{1}{x_0^2} \left[ \left(2 - \frac{3s}{2}\right) e^{-s} \cos x_0 s - 2e^{2s} \right] + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right), \quad (\text{B.14b})$$

$$b_i(s) = \frac{1}{x_0} [-e^{2s} + e^{-s} \cos x_0 s] + \frac{1}{x_0^2} \left(3 - \frac{3s}{2}\right) e^{-s} \sin x_0 s + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right). \quad (\text{B.14c})$$

Las expresiones aproximadas de las cantidades  $A(s)$ ,  $b_r(s)$  y  $b_i(s)$ , Ec. (B.14), junto con las definiciones de la ecuación (B.3) nos permiten escribir la ecuación (5.18).

## B.2. Detalles de la ecuación de difusión en la aproximación de longitud de onda corta

### B.2.1. Obtención de las cantidades básicas

En esta sección presentaremos el procedimiento que se siguió para obtener las ecuaciones de evolución de las cantidades  $\langle t'_{mn} \rangle_L$ ,  $\langle r'_{mn} \rangle_L$ ,  $\langle T'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle R'_{mn} \rangle_L$  en la aproximación de longitud de onda corta SWLA: ver ecuaciones (5.27a), (5.33a), (5.35a) y (5.37a), respectivamente<sup>3</sup>. Si bien el procedimiento que expondremos a continuación sirve para obtener las cuatro ecuaciones antes mencionadas, únicamente exhibiremos el procedimiento para las cantidades  $\langle t'_{mn} \rangle_L$  y  $\langle T'_{mn} \rangle_L$ . Para obtener estas ecuaciones debemos expresar las amplitudes  $t'_{mn}$ ,  $r'_{mn}$  y sus correspondientes cantidades conjugadas, en términos de los elementos de la matriz de transferencia [ver ecuaciones (2.88) y (4.1)], es decir:

$$t'_{mn} = \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn}, \quad t'^*_{mn} = \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn}, \quad (\text{B.15a})$$

$$r'_{mn} = \left[ M^{12} (M^{22})^{-1} \right]_{mn}, \quad r'^*_{mn} = \left[ M^{21} (M^{11})^{-1} \right]_{mn}. \quad (\text{B.15b})$$

Debemos notar que en todos los observables de la ecuación (B.15) aparece la matriz inversa de alguno de los bloques de la matriz de transferencia; por esta razón al aplicar el operador del lado derecho de la ecuación (4.56) a las cantidades  $t'_{mn}$  y  $t'^*_{mn}$ , habrá que calcular las siguientes derivadas:

<sup>3</sup>Al igual que en la sección 5.3, aquí denotaremos los valores esperados en el SWLA con  $\langle \dots \rangle_L$  en vez de hacerlo con  $\langle \dots \rangle_L^{(0)}$ .

$$\frac{\partial \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}}, \quad \frac{\partial \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}}, \quad (\text{B.16a})$$

$$\frac{\partial^2 \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu} \partial M_{a\alpha}^{i\lambda}}, \quad \frac{\partial^2 \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu} \partial M_{a\alpha}^{i\lambda}}. \quad (\text{B.16b})$$

Para obtener las derivadas de (B.16) consideremos una matriz arbitraria  $A(x, y)$  cuya matriz inversa  $A^{-1}(x, y)$  existe. Por definición el producto de estas matrices satisface la siguiente relación:

$$AA^{-1} = I. \quad (\text{B.17a})$$

Al derivar (B.17a) con respecto a  $x$  se obtiene:

$$\frac{\partial A}{\partial x} A^{-1} + A \frac{\partial A^{-1}}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.17b})$$

de donde podemos despejar la derivada de  $A^{-1}$ , obteniendo así:

$$\frac{\partial A^{-1}}{\partial x} = -A^{-1} \frac{\partial A}{\partial x} A^{-1}. \quad (\text{B.17c})$$

Si ahora se aplica la derivada con respecto a la variable  $y$  a la ecuación (B.17c) se obtiene la siguiente expresión para la segunda derivada

$$\frac{\partial^2 A^{-1}}{\partial y \partial x} = A^{-1} \left[ \frac{\partial A}{\partial y} A^{-1} \frac{\partial A}{\partial x} - \frac{\partial^2 A}{\partial y \partial x} + \frac{\partial A}{\partial x} A^{-1} \frac{\partial A}{\partial y} \right] A^{-1}. \quad (\text{B.17d})$$

Al aplicar las ecuaciones (B.17c) y (B.17d) a nuestro caso particular, obtenemos para  $\left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn}$ :

$$\frac{\partial \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}} = -\delta_{h\mu}^{22} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mc} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\beta n}, \quad (\text{B.18a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu} \partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} &= \delta_{i\lambda, h\mu}^{22, 22} \left[ \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\alpha c} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\beta n} \right. \\ &\quad \left. + \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mc} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\beta a} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\alpha n} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.18b})$$

mientras que para  $\left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn}$ :

$$\frac{\partial \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}} = -\delta_{h\mu}^{11} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mc} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta n}, \quad (\text{B.18c})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu} \partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} &= \delta_{i\lambda, h\mu}^{11, 11} \left[ \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{ma} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\alpha c} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta n} \right. \\ &\quad \left. + \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mc} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta a} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\alpha n} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.18d})$$

En el grupo de expresiones de (B.18) hemos abreviado la notación al hacer las siguientes definiciones:

$$\delta_h^2 \delta_\mu^2 = \delta_{h\mu}^{22} \quad \delta_{h\mu}^{22} \delta_{i\lambda}^{22} = \delta_{h\mu, i\lambda}^{22, 22} \quad (\text{B.19a})$$

$$\delta_h^1 \delta_\mu^1 = \delta_{h\mu}^{11} \quad \delta_{h\mu}^{11} \delta_{i\lambda}^{11} = \delta_{h\mu, i\lambda}^{11, 11} \quad (\text{B.19b})$$

Una vez que tenemos las expresiones de (B.18) podemos obtener las ecuaciones de  $\langle t'_{mn} \rangle$  y  $\langle T'_{mn} \rangle$ .

### B.2.2. Obtención de la Ecuación de Difusión de $\langle t'_{mn} \rangle_L$ .

Para obtener la ecuación de difusión de  $\langle t'_{mn} \rangle_L$  sustituimos  $F(M) = t'_{mn}$  en la ecuación (4.56) y hacemos uso de la expresión (B.18b), obteniendo así:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle t'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab, cd}^{ij, hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 t'_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \quad (\text{B.20a}) \\ &= \sum_{\substack{jl \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab, cd}^{2j, 2l} \left\langle M_{b\alpha}^{j2} M_{d\beta}^{l2} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\alpha c} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\beta n} \right\rangle_L \\ &\quad + \sum_{\substack{jl \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab, cd}^{2j, 2l} \left\langle M_{b\alpha}^{j2} M_{d\beta}^{l2} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mc} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\beta a} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{\alpha n} \right\rangle_L. \end{aligned}$$

Al sumar sobre los índices de canal  $\alpha$  y  $\beta$  obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle t'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab, cd}^{2j, 2l} \left\langle \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \\ &\quad + \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab, cd}^{2j, 2l} \left\langle \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{mc} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{da} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bn} \right\rangle_L. \end{aligned} \quad (\text{B.20b})$$

Si en el último renglón de la ecuación anterior se hace el intercambio de índices  $a \leftrightarrow c$ ,  $b \leftrightarrow d$  y  $j \leftrightarrow l$ , y usamos las propiedades de simetría de los coeficientes de difusión, Ec. (4.39c), obtenemos:

$$\frac{\partial \langle t'_{mn} \rangle_L}{\partial L} = 2 \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{2j,2l} \left\langle \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L. \quad (\text{B.21})$$

Aunque este tratamiento está pensado para el SWLA, si en la ecuación (B.21) reemplazáramos  $\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl}(k) \rightarrow D_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L)$ , entonces esta ecuación será válida en el régimen general, Ec. (4.37a), ya que hasta este momento, no hemos sustituido la dependencia de los coeficientes de difusión del SWLA, Ec. (4.52). Si nos restringimos al SWLA, nos damos cuenta que el único coeficiente de difusión que contribuye en (B.21) es  $\tilde{D}_{ab,cd}^{22,22}$ . Al tomar en cuenta lo anterior la (B.21) se simplifica, dando como resultado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle t'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= 2 \sum_{abcd} \tilde{D}_{ab,cd}^{22,22} \left\langle \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ M^{22} (M^{22})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{22} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \\ &= 2 \sum_{abcd} \tilde{D}_{ab,cd}^{22,22} \left\langle \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \delta_{bc} \delta_{dn} \right\rangle_L^{(0)} \\ &= 2 \sum_{ab} \tilde{D}_{ab,bn}^{22,22} \langle t'_{ma} \rangle_L; \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

por lo tanto, al sustituir la ecuación (4.52a) en (B.22) se obtiene la ecuación (5.27a).

### B.2.3. Obtención de la Ecuación de Difusión de $\langle T'_{mn} \rangle_L$ .

Al introducir el observable  $F(M) = T_{mn} = t_{mn} t_{mn}^*$  en la ecuación (4.56) obtenemos la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle T'_{mn} \rangle_L}{\partial L} &= \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \left[ t'_{mn} \frac{\partial^2 t_{mn}^*}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} + t_{mn}^* \frac{\partial^2 t'_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right] \right\rangle_L \\ &+ \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \left[ \frac{\partial t'_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \frac{\partial t_{mn}^*}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}} + \frac{\partial t_{mn}^*}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \frac{\partial t'_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right] \right\rangle_L. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Las derivadas que aparecen del lado derecho de la ecuación anterior deben expresarse en términos de los elementos de la matriz de transferencia, lo cual se logra al utilizar la expresión (B.15a) y el grupo de expresiones de (B.18).

Para seguir adelante trataremos por separado las cuatro contribuciones de la ecuación (B.23):

- Del primer renglón de (B.23) definimos las siguientes cantidades:

$$I = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} t'_{mn} \frac{\partial^2 t'^*_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \quad (\text{B.24a})$$

$$II = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} t'^*_{mn} \frac{\partial^2 t'_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \quad (\text{B.24b})$$

- Del segundo renglón de (B.23) definimos las siguientes cantidades:

$$III = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial t'_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \frac{\partial t'^*_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \quad (\text{B.25a})$$

$$IV = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial t'^*_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \frac{\partial t'_{mn}}{\partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \quad (\text{B.25b})$$

Comencemos con  $I$ : Usando las ecuaciones (B.15a) (B.18d) en (B.24a) obtenemos:

$$\begin{aligned} I &= \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle t'_{mn} M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 t'^*_{mn}}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \quad (\text{B.26a}) \\ &= \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \delta_{i\lambda,h\mu}^{11,11} \left\langle t'_{mn} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{ma} M_{b\alpha}^{j\lambda} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\alpha c} M_{d\beta}^{l\mu} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta n} \right\rangle_L \\ &\quad + \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \delta_{i\lambda,h\mu}^{11,11} \left\langle t'_{mn} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mc} M_{d\beta}^{l\mu} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta a} M_{b\alpha}^{j\lambda} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\alpha n} \right\rangle_L, \end{aligned} \quad (\text{B.26b})$$

Al sumar sobre los índices de bloque  $i$ ,  $\lambda$ ,  $h$  y  $\mu$  obtenemos

$$\begin{aligned} I &= \sum_{\substack{jl \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,1l} \left\langle t'_{mn} t'^*_{ma} M_{b\alpha}^{j1} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\alpha c} M_{d\beta}^{l1} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta n} \right\rangle_L \\ &\quad + \sum_{\substack{jl \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,1l} \left\langle t'_{mn} t'^*_{mc} M_{d\beta}^{l1} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta a} M_{b\alpha}^{j1} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\alpha n} \right\rangle_L. \end{aligned} \quad (\text{B.26c})$$

Finalmente al sumar sobre los índices de canal  $\alpha$  y  $\beta$  obtenemos:

$$\begin{aligned}
I &= \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,1l} \left\langle t'_{mn} t'^*_{ma} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l1} (M^{11})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \\
&\quad + \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,1l} \left\langle t'_{mn} t'^*_{mc} \left[ M^{l1} (M^{11})^{-1} \right]_{da} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bn} \right\rangle_L. \quad (\text{B.26d})
\end{aligned}$$

Si en el último renglón de la ecuación anterior renombramos los índices de suma como  $a \leftrightarrow c$ ,  $b \leftrightarrow d$  y  $j \leftrightarrow l$ , y usamos las propiedades de simetría de los coeficientes de difusión, Ec. (4.39c), obtenemos:

$$I = 2 \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,1l} \left\langle t'_{mn} t'^*_{ma} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l1} (M^{11})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \quad (\text{B.27})$$

Mediante un procedimiento análogo encontramos:

$$II = 2 \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{2j,2l} \left\langle t'^*_{mn} t_{ma} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \quad (\text{B.28})$$

Ahora obtengamos la contribución *III*. Usando las ecuaciones (B.15a), (B.18a) y (B.18c) en (B.25a) obtenemos:

$$\begin{aligned}
III &= \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \delta_{h\mu,i\lambda}^{11,22} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{cn} \right. \\
&\quad \times \left. \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mc} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{\beta n} \right\rangle_L \\
&= \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{2j,1l} \left\langle \left[ (M^{22})^{-1} \right]_{ma} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bn} \left[ (M^{11})^{-1} \right]_{mc} \left[ M^{l1} (M^{11})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L
\end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Al realizar las sumas sobre los índices de bloque y de canal

$$III = \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{2j,1l} \left\langle t'_{ma} t'^*_{mc} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bn} \left[ M^{l1} (M^{11})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L. \quad (\text{B.30})$$

De manera análoga obtenemos:

$$IV = \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,2l} \left\langle t'^*_{ma} t'_{mc} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bn} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L. \quad (\text{B.31})$$

Si en la ecuación (B.30) el intercambio de índices  $a \leftrightarrow c$ ,  $b \leftrightarrow d$  y  $j \leftrightarrow l$ , y nuevamente hacemos uso de la ecuación (4.39c), obtenemos:

$$III = IV = \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,2l} \left\langle t'^*_{ma} t'_{mc} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bn} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \quad (\text{B.32})$$

Al introducir en la ecuación (B.23) los resultados obtenidos en las ecuaciones (B.27)-(B.28) y (B.30)-(B.32) obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle T'_{mn} \rangle_L}{\partial L} = & 2 \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,1l} \left\langle t'_{mn} t'^*_{ma} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l1} (M^{11})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \quad (\text{B.33}) \\ & + 2 \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{2j,2l} \left\langle t'^*_{mn} t_{ma} \left[ M^{j2} (M^{22})^{-1} \right]_{bc} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L \\ & + 2 \sum_{\substack{jl \\ abcd}} \tilde{D}_{ab,cd}^{1j,2l} \left\langle t'^*_{ma} t'_{mc} \left[ M^{j1} (M^{11})^{-1} \right]_{bn} \left[ M^{l2} (M^{22})^{-1} \right]_{dn} \right\rangle_L. \end{aligned}$$

Al igual que la ecuación (B.21), la ecuación (B.33) es válida en el régimen general, Ec. (4.37a), ya que hasta este momento, no hemos sustituido la dependencia de los coeficientes de difusión del SWLA, Ec. (4.52). Si nos restringimos al SWLA, nos damos cuenta que en el primer renglón el único coeficiente de difusión que contribuye es  $\tilde{D}_{ab,cd}^{11,11}$ , en el segundo sólo contribuye  $\tilde{D}_{ab,cd}^{22,22}$  y en el tercero contribuyen  $\tilde{D}_{ab,cd}^{11,22}$  y  $\tilde{D}_{ab,cd}^{12,21}$ ; por lo tanto, en el SWLA la ecuación (B.33) se simplifica de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle T'_{mn} \rangle_L}{\partial L} = & 2 \sum_{ab} \tilde{D}_{ab,bn}^{11,11} (\langle t'_{mn} t'^*_{ma} \rangle_L + \langle t'^*_{mn} t_{ma} \rangle_L) \quad (\text{B.34}) \\ & + 2 \sum_{ac} \tilde{D}_{an,cn}^{11,22} \langle t'^*_{ma} t'_{mc} \rangle_L + 2 \sum_{abcd} \tilde{D}_{ab,cd}^{12,21} \langle t'^*_{ma} t'_{mc} r'^*_{bn} r'_{dn} \rangle_L, \end{aligned}$$

donde hemos utilizado las ecuaciones (4.52a) y (B.15b). Al sustituir los coeficientes de difusión que aparecen en (B.34) obtenemos la ecuación (5.35a).



# Apéndice C

## Detalles de los valores esperados de la serie de Born

En el Capítulo 7 se realizó el estudio de la dispersión en el régimen balístico. Todos los resultados teóricos de ese Capítulo se obtuvieron a través de la serie de Born, lo que requirió obtener los valores promedio del órdenes relevantes de las serie de Born. Lo anterior se realizó implementando la notación compacta definida en la sección 2.6.2 [ver ecuaciones (2.152)-(2.156)] y el modelo estadístico de ruido blanco generalizado definido en la sección 7.2.2 [ver ecuación (7.16)]. Al aplicar el modelo estadístico definido en (7.16), obtuvimos que sólo las contribuciones de orden par en el potencial son relevantes.

El cálculo de los diferentes órdenes en el potencial requirió que calculásemos una serie de integrales dependiendo del orden en el potencial. A continuación presentamos brevemente la manera en que se aplica el método, para lo cual tomaremos como ejemplos el segundo y cuarto orden de la la amplitud de transmisión  $t_{aa_0}$ .

Si usamos las expresiones (2.152b) y (2.152d) y el modelo de ruido blanco generalizado, Ec. (7.16), se obtiene que el promedio del segundo y cuarto, respectivamente, se expresan de la siguiente manera:

$$\langle (t_{aa_0})_2 \rangle_L = - \sum_{b_1}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1a_0}}} C(ab_1, b_1a_0) \int_0^L f_{2;a,a_0;b_1}(x_1, x_1) dx_1, \quad (C.1a)$$

$$\begin{aligned} \langle (t_{aa_0})_4 \rangle_L &= \sum_{b_1, b_2, b_3}^{\infty} \frac{\Gamma(ab_1) \Gamma(b_1b_2) \Gamma(b_2b_3) \Gamma(b_3a_0)}{\sqrt{\ell_{ab_1} \ell_{b_1b_2} \ell_{b_2b_3} \ell_{b_3a_0}}} \\ &\times \left[ C(ab_1, b_1b_2) C(b_2b_3, b_3a_0) \int_0^L \int_0^L f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_1, x_2, x_2) dx_1 dx_2 \right. \\ &+ C(ab_1, b_2b_3) C(b_1b_2, b_3a_0) \int_0^L \int_0^L f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_2, x_1, x_2) dx_1 dx_2 \\ &\left. + C(ab_1, b_3a_0) C(b_1b_2, b_2b_3) \int_0^L \int_0^L f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_2, x_2, x_1) dx_1 dx_2 \right] \end{aligned} \quad (C.1b)$$

donde hemos definido la función de dos puntos:

$$\begin{aligned} f_{2;a,a_0;b_1}(x_1, x_2) &= \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_1}; x_1 - x_2) \varphi_+(k_{a_0}; x_2) \\ &= e^{-ik_a x_1} e^{ik_{b_1}|x_1 - x_2|} e^{ik_{a_0} x_2}, \end{aligned} \quad (\text{C.2a})$$

y la de cuatro puntos:

$$\begin{aligned} f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_2, x_3, x_4) &= \varphi_-(k_a; x_1) \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_1}; x_1 - x_2) \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_2}; x_2 - x_3) \\ &\quad \times \tilde{g}_0^{(+)}(k_{b_3}; x_3 - x_4) \varphi_+(k_{a_0}; x_4), \\ &= e^{-ik_a x_1} e^{ik_{b_1}|x_1 - x_2|} e^{ik_{b_2}|x_2 - x_3|} e^{ik_{b_3}|x_3 - x_4|} e^{ik_{a_0} x_4}. \end{aligned} \quad (\text{C.2b})$$

Con ayuda de las funciones definidas en (C.2), se evaluarán las integrales del segundo y cuarto de (C.1), obteniendo así:

$$\int_0^L f_{2;a,a_0}^{b_1}(x_1, x_1) dx_1 = -i \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{(k_a - k_{a_0})} = e^{-i(k_a - k_{a_0})L/2} \frac{\sin \frac{k_a - k_{a_0}}{2} L}{\frac{k_a - k_{a_0}}{2}}, \quad (\text{C.3})$$

para la integral del segundo orden, mientras que para las del cuarto orden se obtiene:

$$\begin{aligned} &\int_0^L \int_0^L f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_1, x_2, x_2) dx_1 dx_2 \quad (\text{C.4a}) \\ &= \frac{1}{k_{a_0} - k_{b_2}} \left[ \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{-k_a + k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{b_2})L}}{k_a - k_{b_2}} \right] \\ &\quad + \frac{1}{k_a + k_{b_2}} \left[ \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_2})L}}{k_{a_0} + k_{b_2}} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\int_0^L \int_0^L f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_2, x_1, x_2) dx_1 dx_2 \quad (\text{C.4b}) \\ &= \frac{1}{-k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left[ \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i[k_a - k_{b_1} - k_{b_2} - k_{b_3}]L}}{-k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right] \\ &\quad + \frac{1}{k_a + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \left[ \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{k_a - k_{a_0}} - \frac{-1 + e^{i(k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3})L}}{k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_2} + k_{b_3}} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\int_0^L \int_0^L f_{4;a,a_0;b_1,b_2,b_3}(x_1, x_2, x_2, x_1) dx_1 dx_2 \quad (\text{C.4c}) \\ &= \frac{1}{-k_a + k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \left[ \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{-k_a + k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i(k_{b_1} + k_{b_3})L}}{k_{b_1} + k_{b_3}} \right] \\ &\quad + \frac{1}{k_{b_1} + k_{b_3}} \left[ \frac{1 - e^{-i(k_a - k_{a_0})L}}{-k_a + k_{a_0}} + \frac{1 - e^{-i[k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}]L}}{k_a - k_{a_0} + k_{b_1} + k_{b_3}} \right]. \end{aligned}$$

Al sustituir la integral (C.3) en (C.1a) se obtiene la expresión del segundo orden (7.72); análogamente, al sustituir las expresiones de (C.4) en la ecuación (C.1b) se obtiene la expresión del cuarto orden (7.76).

Todas las expresiones teóricas del Capítulo 7 se obtienen aplicando el mismo método.



# Apéndice D

## Series asintóticas

### D.1. Discusión general

Antes de hablar de las series asintóticas recordemos brevemente la manera en que una serie de potencias *convergente* representa a una función  $F(x)$ . Consideremos una función  $F(x)$  analítica en el punto  $x = 0$ , la cual tiene el siguiente desarrollo en serie de potencias alrededor de  $x = 0$ :

$$F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k, \quad |x| < r, \quad (\text{D.1})$$

donde  $r$  es el radio de convergencia de la serie (D.1). La  $n$ -ésima suma parcial de la serie (D.1) se define de la siguiente manera:

$$S_n(x) = \sum_{k=0}^n c_k x^k \quad (\text{D.2})$$

La serie de la ecuación (D.1) representa a la función  $F(x)$  en el sentido de que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [F(x) - S_n(x)] = 0 \quad \forall x \text{ tal que } |x| < r. \quad (\text{D.3})$$

Lo anterior quiere decir que *para cada  $x$  fija* la serie de la ecuación (D.2) puede aproximarse a la función  $F(x)$  tanto como se desee al considerar un número de términos suficientemente grande.

Una *representación asintótica en serie de potencias* de  $x$  de una función  $f(x)$ , para valores de  $x$  cercanos a cero e incluso cero, se define de la siguiente manera:

$$f(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad x \rightarrow 0 \Leftrightarrow \quad (\text{D.4a})$$

$$\lim_{|x| \rightarrow 0} \frac{|f(x) - s_n(x)|}{|x|^n} = 0, \quad (\text{D.4b})$$

para cada  $n$  fija. Al igual que en la ecuación (D.2)  $s_n(x)$  representa la  $n$ -ésima suma parcial:

$$s_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k. \quad (\text{D.4c})$$

La serie asintótica, Ec. (D.4a), representa la función  $f(x)$  en el sentido de que *para cada  $n$  fija* la  $n$ -ésima suma parcial se aproxima a  $f(x)$  más rápidamente que  $|x|^n$  se aproxima a cero para valores de  $x$  cercanos a 0.

De manera análoga una *representación asintótica en serie de potencias inversas* de  $x$  de una función  $g(x)$ , para valores de  $x \gg 1$  e incluso  $x \rightarrow \infty$ , se define de la siguiente manera:

$$g(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a_k}{x^k}, \quad x \rightarrow \infty, \Leftrightarrow \quad (\text{D.5a})$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} |x|^n |g(x) - s_n(x)| = 0, \quad (\text{D.5b})$$

para cada  $n$  fija. Análogamente la  $n$ -ésima suma parcial se define como:

$$s_n(x) \sim \sum_{k=0}^n \frac{b_k}{x^k}. \quad (\text{D.5c})$$

La serie asintótica, Ec. (D.5a), representa la función  $g(x)$  en el sentido de que *para cada  $n$  fija* la  $n$ -ésima suma parcial se aproxima a  $g(x)$  más rápidamente que  $|x|^n$  tiende a infinito para valores de  $x \rightarrow \infty$ .

En las definiciones de serie asintótica, Ecs. (D.4a) y (D.5a), no se pide que la serie asintótica converja, de hecho la mayoría de las series asintóticas son series divergentes, sin embargo, a pesar de la naturaleza divergente de las series asintóticas, éstas son de gran utilidad para aproximar funciones cuyos argumentos sean próximos a un valor singular, lejos del cual la serie asintótica difiere notablemente del comportamiento de la función. Los puntos singulares más comunes alrededor de los cuales se considera una representación asintótica son: el origen e infinito. En las referencias [45], [47] y [50] se discute el desarrollo asintótico alrededor de un punto arbitrario  $x_0$ ; además, la representación asintótica no tiene que ser, forzosamente, en potencias de  $x$  o inversas de  $x$ : por ejemplo Erdélyi [45] define el desarrollo asintótico de una función  $f(x)$  como:

$$f(x) \sim \sum_{k=0}^{\infty} a_k \phi_k(x), \quad (\text{D.6})$$

donde las funciones  $\phi_k(x)$  no son, necesariamente, las funciones  $x^k$  o  $1/x^k$ , pero si cumplen relaciones análogas a las ecuaciones (D.4b) y (D.5b). Para fijar ideas, en la presente discusión sólo trataremos con series asintóticas en potencias de  $x$  e inversas de  $x$ , es decir, con punto singular en el origen o infinito respectivamente.

Como ya mencionamos, la utilidad de la serie asintótica es aproximar una función  $f(x)$  mediante una de las sumas parciales  $s_n(x)$  de su desarrollo asintótico; sin embargo, como exhibiremos en los ejemplos de este Apéndice, si una función  $f(x)$  tiene un

desarrollo asintótico la suma parcial que mejor se aproxima al valor  $f(x_0)$ , depende del valor de  $x_0$ , es decir, la suma parcial que mejor se aproxima al valor  $f(x_0)$  es aquella que contiene el *número óptimo de términos*: ni uno más ni uno menos. Lo anterior contrasta con las ideas que se tienen de las series convergentes cuyas sumas parciales  $S_n(x)$  se aproximan cada vez más a la función  $F(x)$  en el punto  $x = x_0$ , conforme el número de términos de la suma parcial crece.

## D.2. Un ejemplo de serie asintótica: la función de Bessel $J_0(x)$

Una función con la que se puede ejemplificar la idea de serie asintótica es la función de Bessel  $J_\nu(x)$ , la cual tiene el siguiente desarrollo asintótico para valores grandes de  $x$  [44]:

$$J_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} [P(\nu, x) \cos \chi - Q(\nu, x) \sin \chi] \quad (\text{D.7a})$$

donde

$$\chi = x - \left(\frac{1}{2}\nu + \frac{1}{4}\right)\pi \quad (\text{D.7b})$$

y las funciones  $P(\nu, x)$  y  $Q(\nu, x)$  tienen los siguientes desarrollos asintóticos para valores grandes de  $x$ :

$$P(\nu, x) \sim \sum_k^{\infty} (-1)^k \frac{(\nu, 2k)}{(2x)^{2k}} \quad (\text{D.7c})$$

$$Q(\nu, x) \sim \sum_k^{\infty} (-1)^k \frac{(\nu, 2k+1)}{(2x)^{2k+1}} \quad (\text{D.7d})$$

siendo  $(n, k)$  el símbolo de Hankel, el cual está definido de la siguiente manera:

$$(n, k) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + n + k\right)}{k! \Gamma\left(\frac{1}{2} + n - k\right)}. \quad (\text{D.7e})$$

Como podemos en las expresiones (D.7c) y (D.7d) las representaciones asintóticas de las funciones  $P(\nu, x)$  y  $Q(\nu, x)$  son series en potencias inversas de  $x$ , por lo que el punto singular es el infinito.

Para fijar ideas el ejemplo que consideremos será la función de Bessel  $J_0(x)$ ; por lo tanto, al utilizar la ecuación (D.7a) para  $\nu = 0$  se obtiene:

$$J_0(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} [P(0, x) \cos \chi - Q(0, x) \sin \chi] \quad (\text{D.8a})$$

con

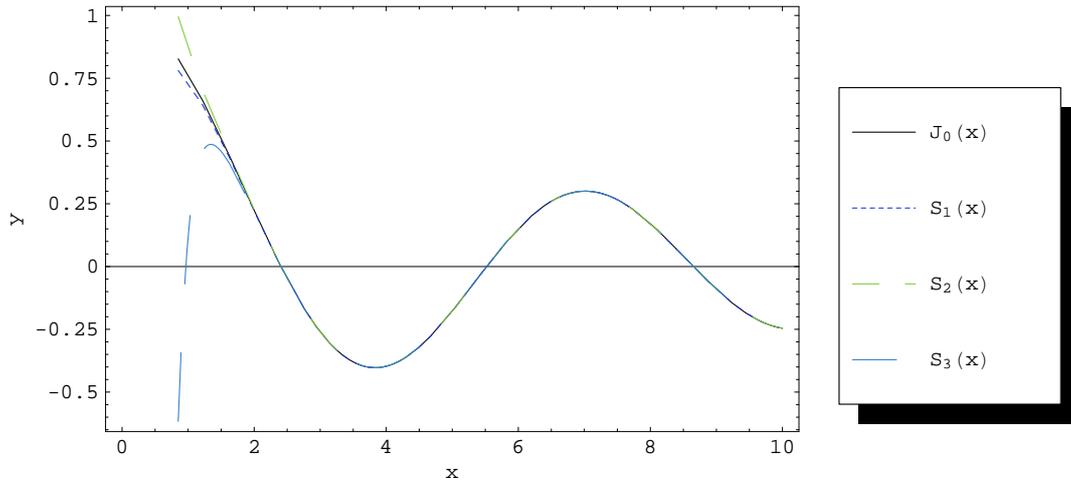


Figura D.1: Función de Bessel superpuesta con las primeras tres sumas parciales

$$\chi = x - \frac{1}{4}\pi \quad (\text{D.8b})$$

y las funciones  $P(0, x)$  y  $Q(0, x)$  tienen los siguientes desarrollos asintóticos:

$$P(0, x) \sim \sum_k^{\infty} (-1)^k \frac{(0, 2k)}{(2x)^{2k}} \quad (\text{D.8c})$$

$$Q(0, x) \sim \sum_k^{\infty} (-1)^k \frac{(0, 2k+1)}{(2x)^{2k+1}} \quad (\text{D.8d})$$

$$(0, k) = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + k\right)}{k! \Gamma\left(\frac{1}{2} - k\right)}. \quad (\text{D.8e})$$

Es fácil darse cuenta que los desarrollos asintóticos de las funciones  $P(0, x)$  y  $Q(0, x)$  representan series divergentes ya que al aplicarles el criterio de convergencia entre el  $n$ -ésimo sumando y el  $n+1$ -ésimo sumando se obtiene respectivamente:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(0, 2(n+1)) (2x)^{2n}}{(2x)^{2(n+1)} (0, 2n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(2n + \frac{1}{2})^2 (2n + \frac{3}{2})^2}{(2n+1)(2n+2)(2x)^n} \rightarrow \infty \quad (\text{D.9})$$

Si definimos las  $n$ -ésimas sumas parciales  $SP_n(0, x)$  y  $SQ_n(0, x)$  de las funciones  $P(0, x)$  y  $Q(0, x)$ , Ecs. (D.8c)-(D.8d), como:

$$SP_n(0, x) = \sum_k^n (-1)^k \frac{(0, 2k)}{(2x)^{2k}} \quad (\text{D.10a})$$

$$SQ_n(0, x) = \sum_k^n (-1)^k \frac{(0, 2k+1)}{(2x)^{2k+1}}, \quad (\text{D.10b})$$

y la  $n$ -ésima suma parcial  $S_{0,n}(x)$  del desarrollo asintótico de la función de Bessel  $J_0(x)$ , Eq. (D.8a), como

$$S_{0,n}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} [SP_n(0, x) \cos \chi - SQ_n(0, x) \sin \chi] \quad (D.10c)$$

Consideremos las primeras tres sumas parciales del desarrollo asintótico de la función de Bessel, es decir, las sumas parciales  $S_{0,1}(x)$ ,  $S_{0,2}(x)$  y  $S_{0,3}(x)$ . En la figura D.1 mostramos el comportamiento de estas tres primeras sumas parciales junto con la curva real de la función de Bessel  $J_0(x)$ . En dicha figura se observa que las tres sumas parciales se aproximan muy bien a la curva real de  $J_0(x)$  para valores de  $x$  que sean de  $x > 2$ .

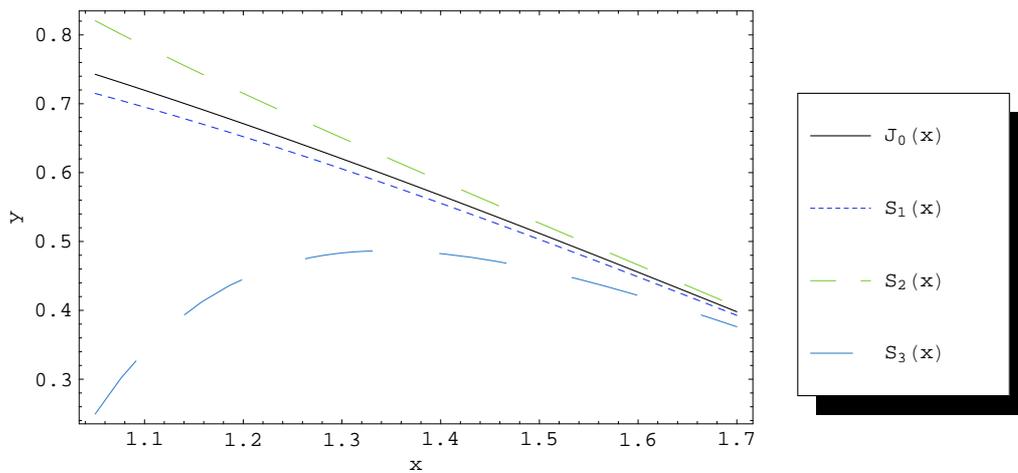


Figura D.2: Primera ampliación de la superposición de la Función de Bessel con las primeras tres sumas parciales

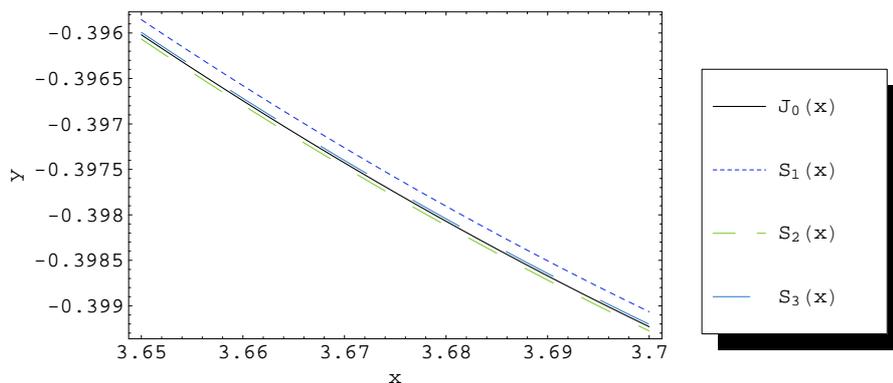


Figura D.3: Segunda ampliación de la superposición de la Función de Bessel con las primeras tres sumas parciales



# Bibliografía

- [1] A. Ishimaru. *Waves Propagation and Scattering in Random Media*. (Academic Press, New York, 1978).
- [2] S. M. Rytov, Y. A. Kravtsov, and V. I. Tatarskii. *Principles of Statistical Radiophysics*. (Springer, Berlin, 1989).
- [3] *Scattering in Volumes and Surfaces*. Edited by M. Nieto Vesperinas, and J. C. Dainty (North Holland, Amsterdam, 1990).
- [4] *Mesoscopic Phenomena in Solids*, volume 30 of *Modern Problems in Condensed Mater Sciences*. Edited by B. L. Al'tshuler, P. A. Lee, and R. A. Webb (North Holland, Amsterdam 1991).
- [5] P. Sheng. *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena*. (Academic Press, New York, 1995).
- [6] C. W. J. Beenakker. *Rev. Mod. Phys.*, **69**:731, (1997).
- [7] Y. Imry. *Introduction to Mesoscopic Physics*. (Oxford Univ. Press, Oxford, 1997).
- [8] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [9] Y. Alhassid. *Rev. Mod. Phys.*, **72**:895, (2000).
- [10] P. A. Mello and N. Kumar. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems. Complexity and Statistical Fluctuations*. (Oxford, University Press, Oxford, 2004).
- [11] A. García-Martín and J. J. Sáenz. *Waves in Random and Complex Media*, **15**:229, (2005).
- [12] Y. V. Fyodorov, D. V. Savin, and H. J. Sommers. *J. Phys. A*, **38**:10731, (2005).
- [13] A. D. Stone. In *Physics and Tecnology of Submicron Structures*. Edited by H. Heinrich, G. Bauer and F. Kuchar (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988).
- [14] P. A. Mello and B. Shapiro. *Phys. Rev. B*, **37**:5860, (1988).
- [15] P. A. Mello, P. Pereyra, and N. Kumar. *Ann. Phys.*, **181**:290, (1988).

- [16] O.N. Dorokhov. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **36**:259, (1982). [JETP Lett. **36**, 318 (1982)].
- [17] A. García-Martín and J. J. Sáenz. *Phys. Rev. Lett.*, **87**:116603, (2001).
- [18] P. A. Mello and S. Tomsovic. *Phys. Rev. B.*, **46**:15963, (1992).
- [19] P. A. Mello. In *Mesoscopic Quantum Physics*. Edited by E. Akkermans, G. Montambaux and J.-L. Pichard, Les Houches Summer School, Session LXI (Elsevier, Amsterdam, 1995).
- [20] S. Chandrasekhar. *Rev. Mod. Phys.*, **15**:1, (1943). [Reprinted in *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*, edited by N. Wax (Dover, New York, 1954), p. 3].
- [21] R. Landauer. *Phil. Mag.*, **21**:863, (1970).
- [22] L.S. Froufe-Pérez, M. Yépez, P.A. Mello, and J.J. Sáenz. *Phys. Rev. E.*, **75**:031113, (2007).
- [23] P. A. Mello, M. Yépez, L. S. Froufe-Pérez, and J. J. Sáenz. *Physica A*, **372**:203, (2006).
- [24] P. A. Mello, M. Yépez, L. S. Froufe-Pérez, and J. J. Sáenz. *Physica A*, **386**:603, (2007).
- [25] P. A. Mello. *Phys. Rev. Lett.*, **60**:1089, (1988).
- [26] P. A. Mello, E. Akkermans, and B. Shapiro. *Phys. Rev. Lett.*, **61**:459, (1988).
- [27] P. A. Mello. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **23**:4061, (1990).
- [28] P. A. Mello and A. D. Stone. *Phys. Rev. B*, **44**:3559, (1991).
- [29] P. Roman. *Advanced Quantum Theory, an outline of the fundamental ideas*. (Addison-Wesley, Massachusetts, 1965).
- [30] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. (John Wiley & Sons, Berkeley California, third edition, 1999).
- [31] W. K. H. Panofsky and M. Phillips. *Classical Electricity and Magnetism*. (Addison-Wesley, Cambridge Massachusetts, second edition, 1962).
- [32] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Electrodynamics of continuous media*, volume 8 of *Course of theoretical physics*. (Pergamon, Oxford, 1984).
- [33] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics*, volume 5 of *Course of theoretical physics*. (Pergamon, Oxford, 1980).
- [34] S. R. de Groot and L. G. Suttrop. *Foundations of Electrodynamics*. (North-Holland, Amsterdam, 1972. U.M.I Out-of-Print Books on Demand Michigan 1992).
- [35] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics (Non-relativistic theory)*, volume 3 of *Course of theoretical physics*. (Pergamon, Oxford, 1977).

- [36] A. Messiah. *Quantum Mechanics*. (Dover, New York, 1999. Two Volumes Bound as One).
- [37] M. Born and E. Wolf. *Principles of Optics*. (Cambridge University Press, Cambridge, seventh edition, 1999). pp. 116-120.
- [38] M. Butiker. *IBM J. Res. Developm.*, **32**:317, (1988).
- [39] L. S. Froufe-Pérez. *Estadística de la dispersión de ondas en medios desordenados*. PhD thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2006.
- [40] P. García-Mochales, P. A. Serena, N. García, and J. L. Costa-Krämer. *Phys. Rev. B*, **53**:10268, (1996).
- [41] L. S. Froufe-Pérez, P. García Mochales, P. A. Serena, P. A. Mello, and J. J. Sáenz. *Phys. Rev. Lett.*, **89**:246403, (2002).
- [42] L. S. Froufe-Pérez, M. Yépez, P. A. Mello, and J. J. Sáenz. Statistical scattering of waves in disordered waveguides: From microscopic potentials to limiting macroscopic statistics. cond-mat/0610669.
- [43] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. (Academic Press, New York, fourth edition, 1965).
- [44] M. Abramowitz. *Handbook of Mathematical Functions*. (Dover, New York, 1965).
- [45] A. Erdélyi. *Asymptotic Expansions*. (Dover, New York, 1956).
- [46] P. M. Morse and H. Feshbach. *Methods of Theoretical Physics*, volume I. (McGraw-Hill, New York, 1953).
- [47] F. W. J. Olver. *Asymptotics and special functions*. (Academic Press, New York, 1974).
- [48] H. F. Weinberger. *A first course in partial differential equations with complex variables and transform methods*. (Dover, New York, 1995).
- [49] M. A. Flores y E. L. Fautsch. *Temas Selectos de Matemáticas*. (Progreso, México, 1981. Primera Edición).
- [50] E. Rainville. *Special Functions*. (Macmillan, New York, 1960).



# Statistical scattering of waves in disordered waveguides: Universal properties

P.A. Mello<sup>a,\*</sup>, M. Yépez<sup>a</sup>, L.S. Froufe-Pérez<sup>b</sup>, J.J. Sáenz<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 01000 México, Distrito Federal, Mexico*

<sup>b</sup>*Departamento de Física de la Materia Condensada and Instituto “Nicolás Cabrera”, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

Available online 7 September 2006

---

## Abstract

The statistical theory of certain complex wave interference phenomena, like the statistical fluctuations of transmission and reflection of waves, is of considerable interest in many fields of physics. In this article, we shall be mainly interested in those situations where the complexity derives from the quenched randomness of scattering potentials, as in the case of disordered conductors, or, more in general, disordered waveguides.

In studies performed in such systems one has found remarkable *statistical regularities*, in the sense that the probability distribution for various macroscopic quantities involves a rather small number of relevant physical parameters, while the rest of the microscopic details serves as mere “scaffolding”. We shall review past work in which this feature was captured following a maximum-entropy approach, as well as later studies in which the existence of a limiting distribution, in the sense of a generalized central-limit theorem, has been actually demonstrated. We then describe a microscopic potential model that was developed recently, which gives rise to a further generalization of the central-limit theorem and thus to a limiting macroscopic statistics.

© 2006 Elsevier B.V. All rights reserved.

*Keywords:* Disordered waveguides; Quantum transport; Random processes

---

## 1. Introduction

Complex scattering of waves has captured the interest of physicists for a long time [1]. For instance, the problem of coherent multiple scattering of waves, which has long been of great importance in optics, has seen a revived interest in relation to the phenomenon of localization.

The present article fits in the general topic of “statistical theory of complex wave-interference phenomena”. In particular, we shall study the statistical fluctuations of transmission and reflection of waves, which are of considerable interest in mesoscopic physics. Complexity in wave scattering may derive from:

- (i) the chaotic nature of the underlying classical dynamics, as in microwave cavities and quantum dots, or
- (ii) the randomness of the scattering potentials in a disordered medium, as a disordered conductor, or

---

\*Corresponding author.

*E-mail address:* [mello@fisica.unam.mx](mailto:mello@fisica.unam.mx) (P.A. Mello).

a disordered waveguide carrying classical waves (electromagnetic, elastic, etc.), on which we shall concentrate here.

Why do statistics on the results of a scattering process? The point is that the interference pattern resulting from the coherent multiple scattering of waves from the systems described above is so complex (a small variation in some external parameter changes it completely) that only a statistical treatment is meaningful.

We shall find a recurrent theme in our presentation: the statistical regularity of the behavior, which involves a relatively small number of relevant physical parameters, while the rest of details serves as mere “scaffolding”. This feature was captured in the past following a maximum-entropy approach, within the powerful, non-perturbative, framework known as random-matrix theory (RMT): Shannon’s information entropy is maximized, subject to the symmetries and constraints that are physically relevant [2,3]. Later, generalized central-limit theorems (CLT) have been demonstrated [4,5]. Here we shall revisit past and recent efforts towards discovering universal features in the statistical scattering of waves in disordered waveguides.

The paper is organized as follows. We first indicate the various physical regimes to be encountered in the problem of disordered conductors. We then mention how the statistical regularities in the problem have been captured in the past within a maximum-entropy approach: we briefly mention the transfer-matrix method that was used and the RMT model that was constructed, giving rise to a diffusion equation in transfer-matrix space. We then indicate a CLT that was proved, thus showing that the maximum-entropy approach captures the universal features found in the CLT. We then describe a microscopic potential model that was developed recently, which gives rise to a further generalization of the CLT and thus to a limiting macroscopic statistics. We then give our conclusions.

## 2. The maximum-entropy approach

The fundamental physical process occurring in the system under study, the disordered waveguide shown schematically in Fig. 1(a), is coherent multiple scattering of waves. The length of the disordered section of the waveguide is  $L$ ,  $W$  is its width (the system being assumed two-dimensional) and  $N$  is the total number of running modes supported by the waveguide; the mean-free-path (mfp) is denoted by  $\ell$ . The system might as well be a disordered conductor with the same dimensions. In the transport of waves through the system one encounters various physical regimes, indicated in Fig. 1(b): (i) the *ballistic* regime, for  $0 < L < \ell$ ; (ii) the *diffusive*, or *metallic* regime, for  $\ell < L < N\ell$ ; (iii) the *insulating* regime, for  $N\ell < L$ .

The aim is to calculate the transport properties of waves through this system. One important quantity is, of course, the conductance of the disordered quasi-one-dimensional (q-1d) system, which is given by Landauer’s formula:

$$G = \frac{2e^2}{h} g, \tag{1}$$

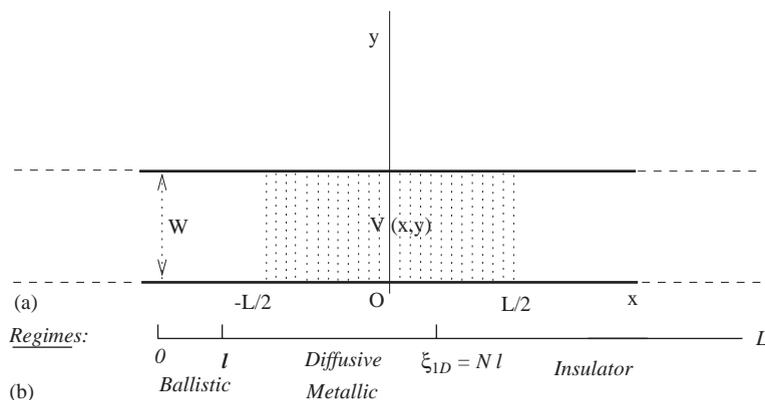


Fig. 1. A disordered waveguide and the various physical regimes.

$$g = \text{tr } tt^\dagger = \sum_{a,b=1}^N |t_{ab}|^2, \tag{2}$$

where  $a, b$  denote the  $N$  transverse (running) modes:  $a, b = 1, \dots, N$ . Landauer’s relation allows calculating the conductance—a transport quantity—from the scattering properties of the system. In microwave systems, one can actually measure the individual transmission coefficients  $T_{ab} = |t_{ab}|^2$ , as well as  $T = \sum_{a,b=1}^N |t_{ab}|^2$ , experimentally.

The main approaches to the problem have been [1,6]: (i) perturbation theory in the disordered potential; (ii) supersymmetry methods, giving rise to a non-linear sigma model and (iii) RMT models of the scattering matrix  $S$ , or the transfer matrix  $M$  of the system. Here we shall concentrate on these latter non-perturbative models.

One has observed remarkable *statistical regularities*, in the sense that the probability distribution for various macroscopic quantities involves a relatively small number of relevant physical parameters (essentially the *mfp*  $\ell$ ). Within a RMT scheme, this feature was captured in the past following a *maximum-entropy approach* [2], which we now describe.

To a waveguide of length  $L$  we assign the transfer matrix  $M''$  (see Fig. 2), which has the property that acting on the wave amplitudes  $a^{(1)}$  on the left gives the amplitudes  $a^{(2)}$  on the right:

$$M'' a^{(1)} = a^{(2)}. \tag{3}$$

For every configuration of disorder we have one transfer matrix  $M''$ . If we assign a probability density  $p_L(M'')$  to our transfer matrices, what results is a *RMT of transfer matrices*.

To the waveguide of length  $L$  we now add a “building block” (BB) of thickness  $\delta L$  which is much shorter than  $L$ , but *still contains many weak scatterers* (the so-called dense-weak-scattering limit (DWSL)), as shown schematically in Fig. 2.

The transfer matrix  $M'$  associated with the BB will be considered to be statistically independent from  $M''$ ; we write its probability density as  $p_{\delta L}(M')$ . The transfer matrices  $M''$  and  $M'$  are combined as

$$M = M' M'' \tag{4}$$

to obtain the total transfer matrix of the combined system, while the probability density of the latter,  $p_{L+\delta L}(M)$ , is obtained from the individual ones by the “convolution”

$$p_{L+\delta L}(M) = \int p_L((M')^{-1} M) p_{\delta L}(M') d\mu(M') \equiv p_L \star p_{\delta L}, \tag{5}$$

where  $d\mu(M')$  is the invariant measure associated with the group of transfer matrices. Eq. (5) has the structure of the *Smoluchowski equation in Brownian motion theory* [7].

Expecting the *results to be largely independent of the details of the BB*, the distribution  $p_{\delta L}(M')$  for the BB was modelled, in Ref. [2], by maximizing the *Shannon entropy*

$$\mathcal{S}[p] = - \int p(M') \ln p(M') d\mu(M'), \tag{6}$$

subject to the constraints

$$\int p_{\delta L}(M') d\mu(M') = 1 \quad (\text{normalization condition}), \tag{7}$$

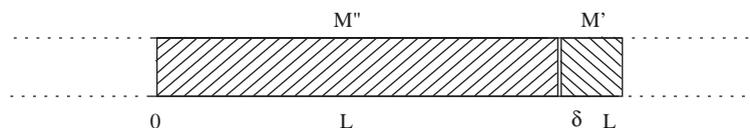


Fig. 2. A waveguide of length  $L$  and a BB added to it.

$$\frac{1}{N} \sum_{a,b=1}^N \langle |r_{ab}|^2 \rangle = \frac{\delta L}{\ell}, \quad (8)$$

$\ell$  being the elastic mfp. The only physical information conveyed by  $p_{\delta L}(M')$  is the mfp  $\ell$ .

Following the procedure developed in the theory of Brownian motion, we can convert the integral equation (5) into a differential equation, with the result [2,3]:

$$\frac{\partial w_s^{(\beta)}(\lambda)}{\partial s} = \frac{2}{\beta N + 2 - \beta} \sum_{a=1}^N \frac{\partial}{\partial \lambda_a} \left[ \lambda_a (1 + \lambda_a) J^{(\beta)}(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda_a} w_s^{(\beta)}(\lambda) \right]. \quad (9)$$

This is a *diffusion equation in transfer-matrix space*, known as the DMPK equation (after Dorokhov [8] and Mello et al. [2]), which governs the “evolution” with the length  $L$  of the waveguide of the probability distribution  $w_s^{(\beta)}(\lambda)$  of our transfer matrices. This equation has been written in terms of new variables as follows: (i)  $s = L/\ell$  denotes the length in units of the mfp; (ii)  $\lambda_a$  ( $a = 1, \dots, N$ ) are “radial” variables in terms of which the conductance can be written as  $g = \sum_{a=1}^N 1/(1 + \lambda_a)$ ; (iii) we have used the Jacobian  $J_\beta(\lambda) = \prod_{a < b} |\lambda_a - \lambda_b|^\beta$ . Finally, Eq. (9) has to be solved with the initial condition  $w_0^{(\beta)}(\lambda) = \delta(\lambda)$ . The quantity  $\beta$  ( $= 1, 2, 4$ ) denotes the universality class of RMT [9].

The distribution  $P(g)$  of the conductance is known to evolve from a Gaussian (deep in the diffusive, metallic regime) to a log-normal distribution (deep in the localized, insulating regime) [6]. Although  $P(g)$  cannot be easily obtained algebraically from the above expressions, various approximations show that this behavior is well described by the DMPK equation (9). In the crossover regime, Ref. [10] found the main statistical properties of  $P(g)$  arising from the DMPK equation using a Monte Carlo calculation. The results are shown in Fig. 3, where  $P(g)$  is plotted (solid lines) for both  $\beta = 1$  and 2 for different values of  $\langle g \rangle$ . The results of extensive q-1d tight-binding-model calculations (symbols), carried out for bulk disorder, are also shown. We see that the agreement between the two types of results is excellent. In contrast, the results for surface disorder and  $\beta = 1$ , also shown in the figure for comparison, are not described properly by the DMPK equation.

### 3. Central-limit theorems

It was shown later [4] that a limiting distribution for  $w_s(\lambda)$  arises when the individual, microscopic, scattering units are combined in the so-called DWSL and within a particular class of models. The DWSL corresponds to a large density of weak scatterers, with a fixed mfp  $\ell$ . In the particular model that was studied, the individual scattering units were defined through their transfer matrices  $M_i$  and an “isotropic” distribution of their phases was assumed. The limiting distribution that arises depends only on  $\ell$  and is insensitive to other details of the microscopic distribution: it thus constitutes a *generalized CLT*. The result turns out to be identical to the DMPK equation (9) found in the maximum-entropy model described above. We can thus say that *the maximum-entropy model selects the limiting distribution*, in the sense of the DWSL, within a class of models for the transfer matrices of the individual scattering units.

A class of limiting distributions wider than that of Ref. [4] was studied by one of the present authors (PAM) and Tomsovic in Ref. [5], in which the isotropy assumption of Ref. [4] was relaxed to a large extent. In Ref. [5], the DWSL plays again an essential role and the result is a more general CLT than that of Ref. [4]. The evolution with  $L$  is described by a generalized diffusion equation, in which the diffusion coefficients are the inverse mfps for the various scattering processes that may occur in the problem. When the various mfps can be represented by a single one, one encounters the DMPK equation that was described above. Thus the model of Ref. [5] appears as a possible candidate to study the influence of the specific scattering properties of the various modes, which seem to be relevant, for instance, for the problem of waveguides with surface disorder, where DMPK does not give a proper description.

### 4. A potential model for the evolution of expectation values. A central-limit theorem

We first present a general way of expressing the expectation value of an observable when we add a BB to an already existing waveguide of length  $L$ , as shown in Fig. 2. The transfer matrix of the two pieces is combined

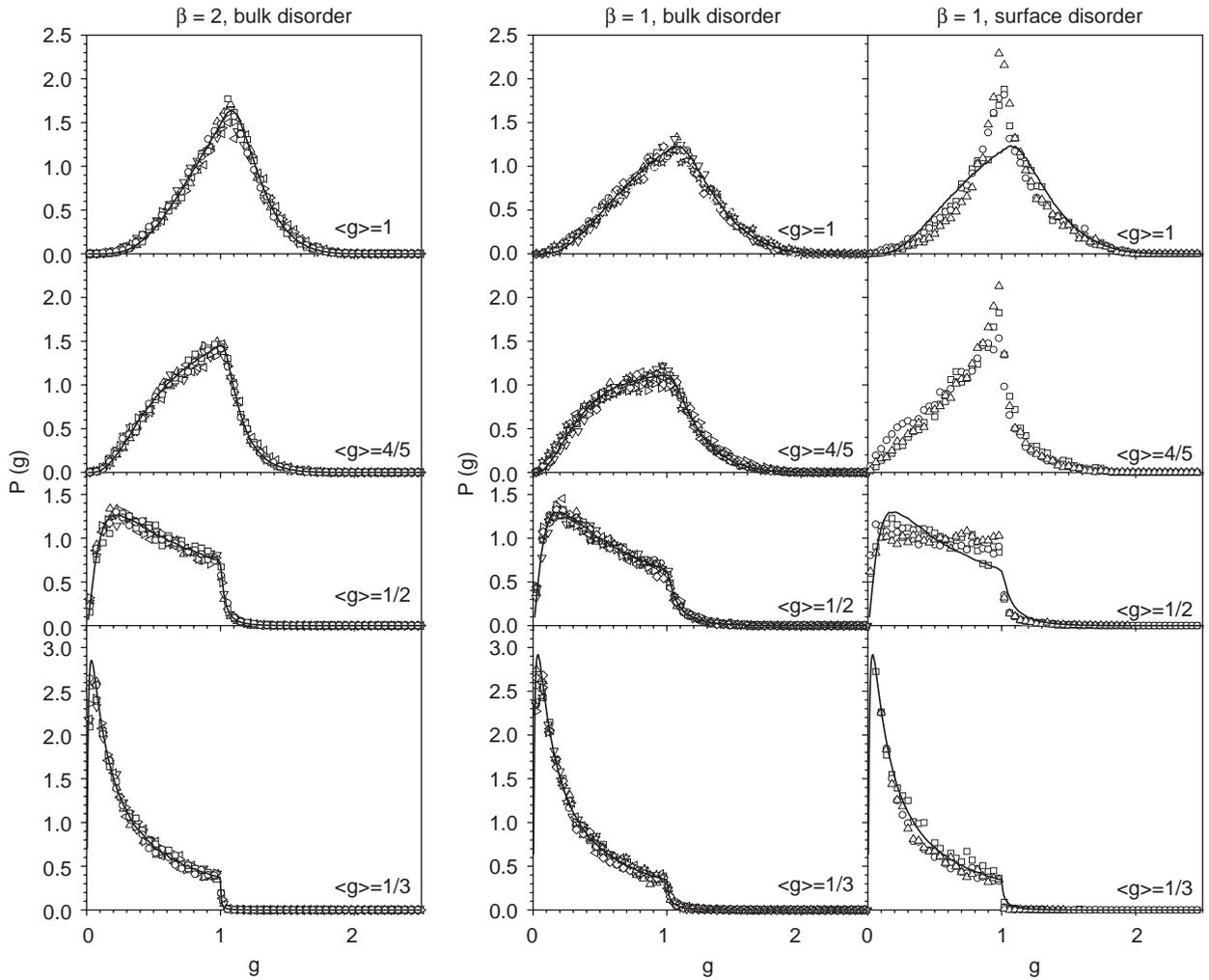


Fig. 3. Conductance distribution from the DMPK equation and from numerical simulations for bulk and surface disorder, as explained in the text (after Ref. [10]).

as in Eq. (4), which can also be written as

$$M = M'' + \delta M = M'' + \varepsilon M'', \tag{10}$$

where we have expressed the transfer matrix of the BB as

$$M' = I + \varepsilon. \tag{11}$$

Consider now a function  $F(M)$  of the transfer matrix  $M$ , whose statistical properties we want to study: it might be, for instance, the conductance  $G$  studied earlier, the transmission coefficient  $T_{ab}$ , or any other quantity of physical interest. Its average for the enlarged piece can be written in terms of that for the original one as

$$\langle F(M) \rangle_{L+\delta L} = \langle F(M) \rangle_L + \langle \varepsilon \rangle_{L,\delta L} \left\langle M \frac{\partial F(M)}{\partial M} \right\rangle_L + \frac{1}{2!} \langle \varepsilon \varepsilon \rangle_{L,\delta L} \left\langle M M \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M \partial M} \right\rangle_L + \dots \tag{12}$$

To simplify the notation, we have indicated symbolically with dots the relevant summations over channel and block indices (see Ref. [5] for more details).

It is clear that we now need an expression for the various moments of the quantities  $\varepsilon$  associated with the BB. Recently [11], such an expression has been obtained from a potential model, which we now outline.

We construct the BB as a sequence of  $m \gg 1$  random  $\delta$ -potential slices, such that

$$d \ll \delta L \ll \{\lambda, \ell\}, \tag{13}$$

as shown schematically in Fig. 4.

The  $r$ th  $\delta$ -slice potential, defined as

$$U_r(x, y) = u_r(y)\delta(x - x_r), \tag{14}$$

has matrix elements with respect to channels given by

$$[U_r(x)]_{ab} = (u_r)_{ab}\delta(x - x_r), \tag{15}$$

in terms of which we specify the statistical model. The  $m$  potentials  $u_r$ ,  $r = 1, \dots, m$ , are assumed to be *statistically independent, identically distributed, with zero average* and, for simplicity, *zero odd moments*, so that

$$\langle (u_r)_{ab} \rangle = 0, \tag{16}$$

$$\langle (u_{r_1})_{a_1 b_1} (u_{r_2})_{a_2 b_2} \rangle = \kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2)\delta_{r_1 r_2}, \tag{17}$$

$$\begin{aligned} \langle (u_{r_1})_{a_1 b_1} (u_{r_2})_{a_2 b_2} (u_{r_3})_{a_3 b_3} (u_{r_4})_{a_4 b_4} \rangle &= \kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2)\kappa_2(a_3 b_3, a_4 b_4)\delta_{r_1 r_2}\delta_{r_3 r_4} \\ &\quad + \kappa_2(a_1 b_1, a_3 b_3)\kappa_2(a_2 b_2, a_4 b_4)\delta_{r_1 r_3}\delta_{r_2 r_4} \\ &\quad + \kappa_2(a_1 b_1, a_4 b_4)\kappa_2(a_2 b_2, a_3 b_3)\delta_{r_1 r_4}\delta_{r_2 r_3} \\ &\quad + \kappa_4(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4)\delta_{r_1 r_2 r_3 r_4} \\ &\quad \dots, \end{aligned} \tag{18}$$

where  $\kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2)$ ,  $\kappa_4(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4)$ , etc., denote the second, fourth, etc., cumulants of  $(u_r)_{ab}$ . From these expressions we can calculate, in the DWSL, the various moments of  $\varepsilon$  needed in Eq. (12). One finds that the first moment vanishes, the second moment behaves linearly with  $\delta L$  and higher moments behave as higher powers thereof. Also, the very important result emerges that the dependence on the cumulants of the potential higher than the second drops out in the DWSL. The *diffusion coefficients*  $D_{ab,cd}^{jk,lm}$ , or inverse mfps  $\ell_{ab}$ , defined as

$$\langle \varepsilon_{ab}^{jk} \varepsilon_{cd}^{lm} \rangle_{L, \delta L} = 2D_{ab,cd}^{jk,lm}(k, L)\delta L + \dots, \tag{19}$$

depend only upon the second cumulants of the potential. They are energy dependent and also length dependent.

Finally, we take the first term on the r.h.s. of Eq. (12) to the l.h.s., divide both sides by  $\delta L$  and take the limit  $\delta L \rightarrow 0$ . The result is the Fokker–Planck equation:

$$\frac{\partial \langle F(M) \rangle_L}{\partial L} = D_{ab,cd}^{jk,lm} \left\langle M_{be}^{kn} M_{df}^{mp} \frac{\partial^2 F}{\partial M_{ae}^{jn} \partial M_{cf}^{lp}} \right\rangle_L. \tag{20}$$

The fact that cumulants of the potential higher than the second are irrelevant in the end signals the existence of a *generalized CLT*: once the mfp’s are specified, the limiting equation (20) is *universal*, i.e., independent of other details of the microscopic statistics.

One of the main difficulties in solving Eq. (20), both analytically and numerically, is that it involves averages of different quantities on the l.h.s. and on the r.h.s. So far, that equation has been solved analytically for the

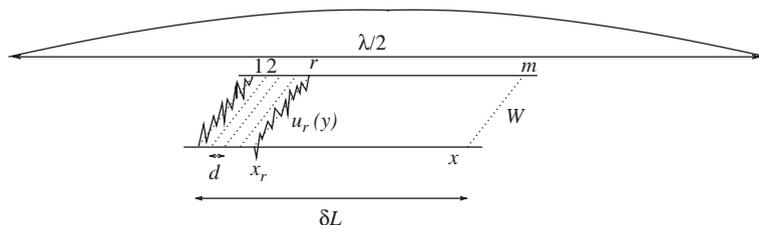


Fig. 4. Construction of the BB using  $\delta$ -potential slices in the regime defined by the inequalities (13).

one-open-channel case ( $N = 1$ ) and a restricted number of “observables” only: the results thus obtained are in excellent agreement with microscopic calculations [11]. Numerically, we have found no “direct” way of solving Eq. (20). Recently, a numerical algorithm which was called “random walk in transfer-matrix space” has been implemented [11,12], in which a BB is constructed with the property given in Eq. (19), and then combined with successive BBs to construct a waveguide of finite length  $L$ . The results have been compared with those arising from microscopic calculations, in which the entities that are combined are, literally, individual potential slices. For situations in which we have bulk disorder, the comparison is excellent, even for quantities which are not described properly by DMPK. For surface disorder, preliminary results indicate a reasonable agreement for the observables examined so far.

## 5. Conclusions

In this paper, we have first revisited some earlier results which seem to indicate that a maximum-entropy approach to the problem of transport in disordered waveguides works well when there is a central-limit theorem (CLT) “behind the scenes”.

We have briefly described a rather general CLT that was obtained in the past, in Ref. [5].

Recently, we have shown that a CLT arises in a model consisting of a random distribution of  $\delta$ -potential slices. The parameters on which the result depends are the mfps  $\ell_{ab}$ —which depend on the variances of the potential slices matrix elements—and the correlation coefficient of these matrix elements. Other details of the potential distribution are “washed out” in the dense-weak-scattering limit (DWSL). The result is expressed in terms of a generalized diffusion equation for the evolution with length of expectation values of physical observables.

Numerical results based on the “random walk in transfer-matrix space” method indicate an excellent agreement with microscopic calculations with bulk disorder, and a reasonable one for the problem with surface disorder.

More effort is needed towards an analytical, as well as a numerical, treatment of the diffusion equation.

## Acknowledgments

P.A.M. and M.Y. acknowledge financial support by Conacyt, Mexico, the former through Grant no. 42655. L.S.F. and J.J.S. have been supported by the Spanish MCyT (Ref. no. BFM2003-01167) and the EU Integrated Project “Molecular Imaging” (EU contract LSHG-CT-2003-503259).

## References

- [1] P.A. Mello, N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems. Complexity and Statistical Fluctuations*, Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [2] P.A. Mello, P. Pereyra, N. Kumar, *Ann. Phys. (N.Y.)* 181 (1988) 290.
- [3] P.A. Mello, A.D. Stone, *Phys. Rev. B* 44 (1991) 3559.
- [4] P.A. Mello, B. Shapiro, *Phys. Rev. B* 37 (1988) 5860.
- [5] P.A. Mello, S. Tomsovic, *Phys. Rev. B* 46 (1992) 15963.
- [6] C.W.J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* 69 (1997) 731.
- [7] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* 15 (1943) 1 (Reprinted in: N. Wax (Ed.), *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*, Dover Publications, New York, 1954, p. 3).
- [8] O.N. Dorokhov, *Solid State Commun.* 51 (1984) 381.
- [9] F.J. Dyson, *J. Math. Phys.* 3 (1962) 140.
- [10] L.S. Froufe-Pérez, P. García-Mochales, P. Serena, P.A. Mello, J.J. Sáenz, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 246403.
- [11] L.S. Froufe-Pérez, M. Yépez, P.A. Mello, J.J. Sáenz, to be published.
- [12] L. Froufe-Pérez, Ph.D. Thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2006.

# Statistical scattering of waves in disordered waveguides: From microscopic potentials to limiting macroscopic statistics

L. S. Froufe-Pérez,<sup>1</sup> M. Yépez,<sup>2</sup> P. A. Mello,<sup>2</sup> and J. J. Sáenz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física de la Materia Condensada, and Instituto “Nicolás Cabrera,”  
Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

<sup>2</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 01000 México Distrito Federal, México*  
(Received 20 October 2006; revised manuscript received 8 December 2006; published 21 March 2007)

We study the statistical properties of wave scattering in a disordered waveguide. The statistical properties of a “building block” of length  $\delta L$  are derived from a potential model and used to find the evolution with length of the expectation value of physical quantities. In the potential model the scattering units consist of thin potential slices, idealized as delta slices, perpendicular to the longitudinal direction of the waveguide; the variation of the potential in the transverse direction may be arbitrary. The sets of parameters defining a given slice are taken to be statistically independent from those of any other slice and identically distributed. In the dense-weak-scattering limit, in which the potential slices are very weak and their linear density is very large, so that the resulting mean free paths are fixed, the corresponding statistical properties of the full waveguide depend only on the mean free paths and on no other property of the slice distribution. The universality that arises demonstrates the existence of a generalized central-limit theorem. Our final result is a diffusion equation in the space of transfer matrices of our system, which describes the evolution with the length  $L$  of the disordered waveguide of the transport properties of interest. In contrast to earlier publications, in the present analysis the energy of the incident particle is fully taken into account. For one propagating mode,  $N=1$ , we have been able to solve the diffusion equation for a number of particular observables, and the solution is in excellent agreement with the results of microscopic calculations. In general, we have not succeeded in finding a solution of the diffusion equation. We have thus developed a numerical simulation, to be called “random walk in the transfer matrix space,” in which the universal statistical properties of a “building block” are first implemented numerically, and then the various building blocks are combined to find the statistical properties of the full waveguide. The reported results thus obtained (in which use was made of a “short-wavelength approximation”) are in very good agreement with those arising from truly microscopic calculations, for both bulk and surface disorder. Since the paper has a clear pedagogical aim, we have included, for the benefit of experts and nonexperts, a number of appendixes that contain the more involved calculations.

DOI: [10.1103/PhysRevE.75.031113](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.75.031113)

PACS number(s): 05.60.Gg, 73.23.-b, 05.40.-a, 84.40.Az

## I. INTRODUCTION

The statistical theory of certain complex wave interference phenomena, such as the statistical fluctuations of transmission and reflection of waves, is of considerable interest in many fields of physics [1–12]. In the literature one has contemplated situations in which such a complexity derives from the chaotic nature of the underlying classical dynamics, as in the case of chaotic microwave cavities and quantum dots, or from the quenched randomness of scattering potentials, as in the case of disordered conductors or, more in general, disordered waveguides. It is the latter domain that will interest us here.

In studies performed in such systems one has found remarkable statistical regularities, in the sense that the probability distribution for various macroscopic quantities involves a rather small number of relevant physical parameters, or scaling parameters, while the rest of the microscopic details serves as mere “scaffolding.” In Ref. [13] it was shown that a limiting distribution of physical quantities indeed arises in the so-called dense-weak-scattering limit (DWSL) and within a particular class of models: the individual, microscopic, scattering units were defined through their transfer matrices and an “isotropic” distribution of their phases was assumed. The limiting distribution that was found constitutes a generalized *central-limit theorem* (CLT).

Within this model only one relevant physical parameter occurs: the mean free path (MFP), which is the only property arising from the individual scattering units that survives in the DWSL. This is consistent with the scaling hypothesis proposed by Abrahams *et al.* [14]. (When abandoning the DWSL, two parameters were needed in Ref. [15] to describe the conductance distribution.) The result found in Ref. [13] coincides with that of the maximum-entropy model that had been developed in Ref. [16], which gives rise to a diffusion equation known as the DMPK equation (after Dorokhov [17] and Mello, Pereyra and Kumar [16]), which can thus be interpreted as capturing the features arising from a CLT. CLT’s associated with products of matrices had been studied earlier, as, for instance, in the well-known Oseledec theorem [6,18]; the results of Refs. [13,16] are consistent with this theorem in the localized regime.

An alternative approach to the study of disordered conductors goes back to the work by Efetov and Larkin [19,20]. One uses a microscopic Hamiltonian with a white-noise random potential as a starting point and reduces the problem, in some well-controlled approximations, to the investigation of an effective field-theoretic model describing diffusion modes (the so-called nonlinear sigma model). In the quasi-one-dimensional (Q1D) case this method allows for quite a few properties of the system to be investigated in detail [20,21]. It is interesting to note that if the system is characterized

by a single microscopic length scale—the mean-free-path  $l$ —which is, for example, the case for bulk disorder with isotropic scattering, the supersymmetry method described in this paragraph and the DMPK approach are known to be equivalent [22]. Frequently, however, one is interested in situations when the scattering is not isotropic, as in samples with rough surface and no bulk disorder. In principle, the supersymmetry approach is able to deal with the problem; however, in practice the calculations in that case are much more involved and not that much was done in this direction.

In spite of the successes of the DMPK equation of Ref. [16] in the study of the conductance distribution [6], that equation fails to give the proper description when the difference in behavior of the various modes becomes relevant. A clear example was given in Ref. [23], where the conductance distribution was studied in the crossover region  $\langle G \rangle \approx e^2/h$ . For waveguides with bulk disorder the description is excellent, whereas for waveguides with surface disorder it is not satisfactory [11,24].

A class of limiting distributions wider than that of Ref. [13] was studied by one of the present authors and Tomsovic in Ref. [25] (to be referred to as MT), in which the isotropy assumption of Ref. [13] was relaxed to a large extent. The DWSL played an essential role and the result was a more general CLT than that of Ref. [13], expressed in terms of a generalized diffusion equation. The scaling parameters that appear in MT are the MFP’s for the various scattering processes that may occur in the problem. When the various MFP’s can be represented by a single one, one encounters the same diffusion equation that was studied in Ref. [16] using a maximum-entropy model. Thus the MT model appears as a possible candidate to study, in the problem of waveguides with surface disorder, the influence of the specific scattering properties of the relevant modes.

The ideas of MT are further developed in the “Brownian-motion” model of Ref. [26]: a waveguide of length  $L$  is enlarged by adding a piece of thickness  $\delta L$  [to be called a “building block” (BB)], small on a macroscopic scale but still containing many scatterers, which is likened to a Brownian particle which, in a time interval  $\delta t$ , small on a macroscopic scale, still suffers many collisions from the molecules of the surrounding medium. The transfer matrix for a BB is written as  $M = I + \varepsilon$  and the independent parameters which  $M$  depends upon are chosen so that  $\varepsilon$  for the BB satisfies a number of properties, reminiscent of those of a Brownian particle:

$$\langle \varepsilon \rangle_{\delta L} = 0 + O(\delta L^2), \quad (1.1a)$$

$$\langle \varepsilon \varepsilon \rangle_{\delta L} = O(\delta L), \quad (1.1b)$$

while higher moments of  $\varepsilon$  behave as higher powers of  $\delta L$  [see Eqs. (3.73) and (3.74) of Ref. [26]]. The result of this analysis is the same diffusion equation as that of MT.

Though appealing the assumptions behind the Brownian-motion model of Ref. [26] for the BB may be, they are, nevertheless, arbitrary. Of course, they can be deduced from the MT model for the more microscopic scattering units. However, even these have a certain degree of arbitrariness. It would be satisfactory if these models could be obtained in a

unified way from a maximum-entropy “ansatz:” this, however, is not known to the present authors at this time.

The motivation of the present paper is to *derive* from a potential model the statistical properties of the BB and use them to find the “evolution” with length of the expectation value of physical quantities. Since the potential model will be introduced at the level of the individual scattering units, the approach to be presented here is, in a way, hybrid between the methods of MT and Ref. [26]. We shall see that within the present model it is not strictly true that the individual transfer matrices (resulting from the individual potentials) for the various scatterers are identically distributed [see Eq. (3.24) below], as was assumed in MT, and this fact will be taken into account. The continuous limit is also treated here in a more satisfactory way than in MT, and the energy appears explicitly in the following presentation, in contrast to earlier publications. We believe that the present model is physically more complete than that of Ref. [16]; it is also better founded than that of MT and Ref. [26], in the sense that there is a lesser degree of arbitrariness in the assumptions, although the resulting diffusion equation has a “structure” similar to the one obtained in MT and Ref. [26]. Our diffusion equation will be found suitable to study wave-transport problems in which the physics of the various modes is relevant, as is the case of waveguides with surface disorder, instead of bulk disorder; we shall also find a good description of the statistical properties of quantities that involve phases, which were not described at all in previous models. The reader is referred to Ref. [27] for a preliminary account of the results of the present paper.

The paper is organized as follows. In the next section we derive a Fokker-Planck equation for the “evolution” with the waveguide length  $L$  of the expectation value of the physical quantities of interest. That equation represents the central result of the present paper and is given in Eq. (2.10), which we reproduce here for convenience:

$$\frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L}{\partial L} = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} D_{ab,cd}^{ij,hl}(k,L) \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L. \quad (1.2)$$

We notice that Eq. (1.2) contains no drift term and is thus a diffusion equation. The physical observable is denoted by  $F(\mathbf{M})$ ,  $\mathbf{M}$  being the transfer matrix of the sample of length  $L$ . The quantities  $D_{ab,cd}^{ij,hl}(k,L)$  play the role of “diffusion coefficients,” which are defined in terms of the second moments of  $\varepsilon$  for the BB in Eq. (3.51) below (see the term linear in  $\delta L$ ) and are given explicitly in Eq. (3.52) in terms of the mean free paths. Notice that the diffusion coefficients depend on the energy ( $\sim k^2$ ) and also on the length  $L$  of the sample. The mean free paths depend only on the second moments of the potential intensity of the individual impurities [see Eq. (3.36)], higher moments being irrelevant for the diffusion equation: this is precisely what signals the existence of a CLT. In order to derive the diffusion equation (1.2) we need a statistical model for the building block (BB): this is derived in Sec. III using a potential model for the random impurities. Although the treatment of Sec. II is applicable to the or-



$$\mathbf{M}^{(L+\delta L)} = \mathbf{M}^{(\delta L)} \mathbf{M}^{(L)}. \quad (2.3)$$

We assume the BB to be of arbitrary thickness  $\delta L$ , and to contain many weak scatterers (see Fig. 1).

Its transfer matrix  $\mathbf{M}^{(\delta L)}$  will be written as

$$\mathbf{M}^{(\delta L)} = \mathbf{I}_{2N} + \varepsilon. \quad (2.4)$$

The combination law for  $\mathbf{M}$ , Eq. (2.3), can be written as

$$\mathbf{M}^{(L+\delta L)} = \mathbf{M}^{(L)} + \delta \mathbf{M} \quad (2.5a)$$

$$= \mathbf{M}^{(L)} + \varepsilon \mathbf{M}^{(L)}. \quad (2.5b)$$

Consider now a function  $F(\mathbf{M})$  of the  $\mathbf{M}$  matrix, which we shall call an ‘‘observable:’’ it could be, for instance, the transmission amplitude  $t_{ab}$ , or the conductance  $G$ , which is proportional to the total transmission coefficient  $T$ . We are interested in the expectation value  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_n$  of such an observable for a system containing  $n$  impurities. We first find below a recurrence relation with  $n$  for that expectation value and then, in the continuous limit, we shall find the equation that governs the ‘‘evolution’’ of  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_L$  with increasing length  $L$ .

We first analyze the restrictions imposed on the  $\mathbf{M}$  matrix elements by the presence of TRI alone, a property which is relevant to the orthogonal universality class  $\beta=1$ . If we write a particular  $\mathbf{M}$  matrix element as  $M_{ab}^{ij} = \xi_{ab}^{ij} + i\eta_{ab}^{ij}$ , the TRI relation, Eq. (A4), implies that only the real and imaginary parts of the blocks  $M^{11}$  and  $M^{12}$  are relevant. Alternatively, we may consider  $F(\mathbf{M})$  as a function  $F(M^{11}, (M^{11})^*, M^{12}, (M^{12})^*)$ , a procedure which will be found more convenient in what follows; however, for convenience in the notation, we shall write  $M^{22}$  as a shorthand for  $(M^{11})^*$  and  $M^{21}$  for  $(M^{12})^*$  and thus consider  $F(\mathbf{M})$  as a function  $F(M^{11}, M^{22}, M^{12}, M^{21})$ , enforcing (A4) at the end of the calculation. With this procedure, TRI is exactly fulfilled. The orthogonal case is the one we shall restrict to in what follows. For the unitary case  $\beta=2$ , we just mention that one would need to consider the real and imaginary parts of the four blocks or, alternatively, the four blocks and their complex conjugates.

Writing the composition law for the  $\mathbf{M}$  matrix as in Eq. (2.5), the expressions for the observable  $F(\mathbf{M})$  before and after adding the building block are related by the Taylor expansion (in terms of the variables discussed in the previous paragraph)

$$\begin{aligned} F(\mathbf{M}^{(n+m)}) &= F(\mathbf{M}^{(n)} + \delta \mathbf{M}) = F(\mathbf{M}^{(n)}) + \sum_{\substack{i\lambda \\ a\alpha}} (\delta M_{a\alpha}^{i\lambda}) \\ &\times \left. \frac{\partial F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \right|_{\mathbf{M}=\mathbf{M}^{(n)}} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{i\lambda h\mu \\ a\alpha c\beta}} (\delta M_{a\alpha}^{i\lambda}) (\delta M_{c\beta}^{h\mu}) \\ &\times \left. \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right|_{\mathbf{M}=\mathbf{M}^{(n)}} + \dots, \end{aligned} \quad (2.6)$$

where the lower indices  $a, \alpha, \dots$ , on each  $M$  indicate channels and run over the values  $1, \dots, N$ , while the upper indices

$i, \lambda, \dots$ , identify the block in Eq. (2.1) and take on the values 1, 2.

In Eq. (2.6), the  $\varepsilon_{ab}^{ij}$  occurring in each  $\delta M_{ab}^{ij}$  is a function of the  $m$  potentials defining the BB, as will be explained in the next section. Similarly,  $M_{ab}^{ij}$  depends implicitly on the  $n$  potentials defining the original waveguide. Multiplying both sides of Eq. (2.6) by the appropriate probability distributions—assuming the two pieces  $n$  and  $m$  to be statistically independent—we find

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{n+m} &= \langle F(\mathbf{M}) \rangle_n + \sum_{\substack{ij\lambda \\ ab\alpha}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \rangle_m \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} \frac{\partial F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \right\rangle_n \\ &+ \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijh\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_m \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} M_{d\beta}^{h\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_n \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.7)$$

Here,  $\langle \dots \rangle_n$  denotes an average evaluated with the probability density for the transfer matrix of the original sample containing  $n$  scattering units, i.e.,

$$\langle G(\mathbf{M}) \rangle_n \equiv \langle G(\mathbf{M}^{(n)}) \rangle. \quad (2.8)$$

The next step is to describe the problem in the dense-weak-scattering limit (DWSL) briefly described in the Introduction [and defined in Eqs. (3.39a)–(3.39d) below], so that we can speak of the continuous length  $L$  of the system and the length  $\delta L$  of the BB. Eq. (2.7) becomes

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L} &= \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L + \sum_{\substack{ij\lambda \\ ab\alpha}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \rangle_{L, \delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} \frac{\partial F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \right\rangle_L \\ &+ \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijh\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} M_{d\beta}^{h\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.9)$$

To proceed, we need a statistical model for the BB. For this purpose, a potential model is discussed in Sec. III, in which the BB is constructed as a collection of  $m$  individual scattering units represented by delta-potential slices. It is found that the first moment of  $\varepsilon$  for the BB vanishes [see Eq. (3.29)], the second moments, in the DWSL, admit an expansion in powers of  $\delta L$  starting with  $\delta L$  itself [see Eq. (3.51)], while higher moments behave as higher powers thereof [see the discussion following Eq. (D19)]. Also, the very important result emerges that *the dependence on the cumulants of the potential higher than the second drops out in the DWSL*. These results are reminiscent of the statistical behavior of the velocity increment of a Brownian particle during a time interval  $\delta t$  during which many collisions from the surrounding medium have occurred [31].

When the moments of the BB, evaluated in the DWSL, are substituted in Eq. (2.9), we obtain, on the RHS of that equation, a power series in  $\delta L$ . We also perform, on the LHS of Eq. (2.9), a Taylor expansion of  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L}$  in powers of  $\delta L$  around the ‘‘initial’’ value  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_L$ . We can then identify

the coefficients of the various powers of  $\delta L$  on the two sides of the equation. In particular, the coefficients of  $\delta L$  give the diffusion equation

$$\frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L}{\partial L} = \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} D_{ab,cd}^{ij,hl}(k,L) \left\langle M_{ba}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{aa}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L. \quad (2.10)$$

The quantities  $D_{ab,cd}^{ij,hl}(k,L)$  play the role of ‘‘diffusion coefficients:’’ they are defined in Eq. (3.51) below as proportional to the coefficient of the linear term in an expansion in powers of  $\delta L$  of the second moment of  $\varepsilon$  for the BB and are given explicitly in Eq. (3.52) in terms of the mean free paths. The diffusion coefficients depend on the energy ( $\sim k^2$ ) and also on the length  $L$  of the sample.

We remark that, just as the coefficients of  $\delta L$  in Eq. (2.9) are expressible in terms of the MFP’s, the coefficients of higher-order terms in  $\delta L$  have a similar property, because the contribution of higher moments becomes irrelevant in the DWL. Equating the coefficients of such higher-order terms on both sides of Eq. (2.9) we obtain results which could be derived from the diffusion equation (2.10) by successive differentiations. [See comment right after Eq. (3.56).]

In the potential model discussed in the next section only the orthogonal case  $\beta=1$  is contemplated. We expect a similar behavior for the unitary class  $\beta=2$ , although we do not have at the present moment the specific expression for each diffusion coefficient in this case.

Equation (2.10) represents the central result of the present paper. It depends only on the mean free paths which, in turn, depend only on the second moments of the individual delta-potential strengths [Eq. (3.36)]. The fact that cumulants of the potential higher than the second are irrelevant in the end signals the existence of a generalized CLT: once the MFP’s are specified, the limiting equation (2.10) is *universal*, i.e., independent of other details of the microscopic statistics.

The transfer matrix  $M$  must fulfill the properties (A2) and (A3)–(A4) arising from FC and TRI, respectively. These relations are satisfied for the individual scatterers to be introduced in the next section, so that they must be satisfied for a system of any length. That (A4) is satisfied is obvious from our construction explained right above Eq. (2.6). The diffusion coefficients appearing in Eq. (2.10) will be calculated in the next section in terms of the potentials: they will thus be fully consistent with FC and TRI. As explained right above Eq. (2.7), the last average appearing on the right-hand side of the diffusion equation (2.10) is evaluated with the probability distribution for the potentials inside the waveguide of length  $L$ . Although this average is never evaluated explicitly, it should be consistent with FC: provided the initial condition  $L=0$  satisfies FC, and since the diffusion coefficients of Eq. (2.10) satisfy FC exactly, Eq. (2.10) ‘‘propagates’’ that information as the length evolves starting from  $L=0$ . As an illustration, this general assertion has been verified explicitly for the  $N=1$  case.

### III. STATISTICAL PROPERTIES OF THE BUILDING BLOCK

In the present section we investigate the statistical scattering properties of the BB which was used in Sec. II to build a

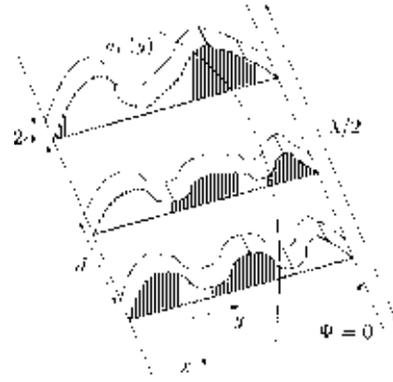


FIG. 2. Schematic representation of the construction of the building block (BB) as a collection of ‘‘thin potential slices.’’

disordered system with a Q1D geometry (see Fig. 1).

Suppose that we model the scatterers constituting the BB by a sequence of thin slices [the scattering units referred to right above Eq. (2.3)] of cross section  $W^{D-1}$  ( $D$  being the dimensionality of the waveguide). From now on we denote the thickness of the slices by  $2\alpha$  and their separation by  $d$ . (See Fig. 2. Notice that in Fig. 1 the same symbols refer to individual scatterers; here, a slice may contain one or more of the individual scatterers shown in Fig. 1.) The statistical properties of the potential slices will be specified below (see Sec. III B 1). Inside  $2\alpha$ , the  $r$ th scattering slice is described by the potential  $V_r(x, y)$ . We denote by  $x$  the coordinate along the waveguide and by  $y$  the coordinates in the transverse direction. The distance  $d$  between slices is taken to be much larger than  $\alpha$ , but much smaller than the wavelength  $\lambda$  of the incident wave and the thickness  $\delta L$  of the BB. Initially we do not specify the ratio of the wavelength  $\lambda$  to  $\delta L$  or the mean-free-path  $l$  (to be defined later), so we shall start out constructing the BB as a collection of  $m$  thin slices satisfying the inequalities

$$\alpha \ll d \ll \{\lambda, \delta L, l\}. \quad (3.1a)$$

Later on, in Sec. III D, we shall find it advantageous to study a second regime, in which  $\delta L$  (and hence any final  $L$ ) and  $l$  contain many wavelengths, i.e.,

$$\alpha \ll d \ll \lambda \ll \{\delta L, l\}, \quad (3.1b)$$

corresponding to what we shall call the short-wavelength approximation (SWLA).

In principle we have no restriction on the dimensionality  $D$  of the waveguide; however, to be specific, we shall restrict the discussion to two-dimensional waveguides with uniform width  $W$ . As we already indicated, in the potential model to be presented below we shall be concerned with the orthogonal, or  $\beta=1$ , symmetry class only.

#### A. Properties of a single scattering slice

Consider a single scattering slice with potential  $V(x, y) = \hbar^2 U(x, y)/(2m)$ , centered at the origin of coordinates  $x=0$ , and let  $[U(x)]_{ab}$  be the matrix elements of  $U(x, y)$  with respect to the ‘‘transverse’’ states  $\chi_a(y)$  of the waveguide, i.e.,

$$[U(x)]_{ab} = \int_0^W \chi_a(y) U(x,y) \chi_b(y) dy, \quad (3.2)$$

with

$$\chi_a(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \frac{\pi a y}{W}, \quad (3.3)$$

$a$  being an integer. Under the conditions

$$k\alpha \ll 1, \quad (3.4a)$$

$$K_{ab}\alpha \ll 1, \quad (3.4b)$$

where  $k=2\pi/\lambda=\sqrt{2mE}/\hbar$  and

$$K_{ab}^2 = |U_{ab}| \equiv |[U(0)]_{ab}|, \quad (3.5)$$

we speak of a thin scatterer (a thin barrier or well) and the dependence of the potential across the thickness  $2\alpha$  is neglected. On the other hand, the quantity

$$2\alpha U_{ab} \equiv u_{ab} \quad (3.6)$$

(which has dimensions of  $k$ ) is arbitrary. Such a scatterer can be well approximated by the “delta potential”

$$U(x,y) = u(y)\delta(x), \quad (3.7a)$$

$$[U(x)]_{ab} = u_{ab}\delta(x), \quad (3.7b)$$

obtained formally taking the limits

$$|U_{ab}| \rightarrow \infty, \quad (3.8a)$$

$$\alpha \rightarrow 0, \quad (3.8b)$$

in such a way that the quantity  $u_{ab}$  of Eq. (3.6) stays fixed. From the inequalities (3.1) we see that the range  $2\alpha$  of the potential is the smallest length scale in the problem: the limit (3.8b) is the extreme idealization of this situation.

Equations (3.7) define a delta-slice potential centered at the origin of coordinates. The potential produced by the  $r$ th delta slice, centered at  $x=x_r$ , is written as

$$U_r(x,y) = u_r(y)\delta(x-x_r), \quad (3.9a)$$

$$[U_r(x)]_{ab} = (u_r)_{ab}\delta(x-x_r). \quad (3.9b)$$

We remind the reader that  $U_r(x,y)$  has dimensions of  $k^2$ , whereas  $u_r(y)$  and  $(u_r)_{ab}$  have dimensions of  $k$ .

A particle scattered by the potential of Eq. (3.7) inside the waveguide is described by the wave function

$$\psi(x,y) = \sum_{a=1}^{\infty} [\psi(x)]_a \chi_a(y), \quad (3.10)$$

which satisfies Schrödinger’s equation; its components  $[\psi(x)]_a$  satisfy the coupled equations

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + k_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} [\psi(x)]_b (u_r)_{ab} \delta(x-x_r), \quad 1 \leq a \leq N, \quad (3.11a)$$

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \kappa_a^2 \right) [\psi(x)]_a = \sum_{b=1}^{\infty} [\psi(x)]_b (u_r)_{ab} \delta(x-x_r), \quad a \geq N+1. \quad (3.11b)$$

Equation (3.11a) refers to open channels and Eq. (3.11b) to closed ones. The quantity  $k_a$ , defined by the relation

$$k_a^2 = k^2 - \left( \frac{\pi a}{W} \right)^2, \quad (3.12)$$

is the “longitudinal” momentum for the open channel  $a$ , with the replacement  $k_a \Rightarrow i\kappa_a$  for closed channels [10]. Notice that if  $N\pi < kW < (N+1)\pi$ , the problem admits precisely  $N$  open channels.

The open-channel  $2N$ -dimensional transfer matrix  $\mathbf{M}$  (that relates open-channel amplitudes on both sides of the potential) for the  $r$ th slice, to be designated by  $\mathbf{M}_r$ , will be written as

$$\mathbf{M}_r = \begin{bmatrix} M_r^{11} & M_r^{12} \\ [M_r^{12}]^* & [M_r^{11}]^* \end{bmatrix} \equiv \mathbf{I}_{2N} + \epsilon_r. \quad (3.13)$$

Since, eventually, we shall be interested in the limit of weak scatterers in which  $\mathbf{M}_r$  is close to the unit matrix, we have introduced the difference  $\epsilon_r$  between  $\mathbf{M}_r$  and the  $2N$ -dimensional unit matrix  $\mathbf{I}_{2N}$ . In the above equation we have taken into account explicitly the fact that our system obeys time-reversal invariance [see Eq. (A7)]. The 11 and 12 blocks of the matrix  $\epsilon_r$  are given by

$$(\epsilon_r)_{ab}^{11} = -i(\hat{v}_r)_{ab} e^{-i(k_a - k_b)x_r} \equiv (\hat{v}_r)_{ab} (\vartheta_r)_{ab}^{11} \quad (3.14a)$$

$$(\epsilon_r)_{ab}^{12} = -i(\hat{v}_r)_{ab} e^{-i(k_a + k_b)x_r} \equiv (\hat{v}_r)_{ab} (\vartheta_r)_{ab}^{12}, \quad (3.14b)$$

where  $a$  and  $b$  label the open channels and thus run from 1 to  $N$ . We have defined

$$(\vartheta_r)_{ab}^{jl} = [\vartheta(x_r)]_{ab}^{jl} = i(-)^j e^{i[(-)^j k_a + (-)^{j+1} k_b]x_r} \quad (3.15)$$

and we have introduced the real quantities

$$(\hat{v}_r)_{ab} = \frac{(\hat{u}_r)_{ab}}{2\sqrt{k_a k_b}}, \quad (3.16)$$

where, as explained in Appendix B,  $(\hat{u}_r)_{ab}$  is an “effective” potential strength that takes into account transitions to closed channels [see also Ref. [10], Eq. (3.134)].

In the above equations the strength of the various scatterers is arbitrary. As we already indicated, we shall be interested in the situation of weak scatterers, defined by the inequality

$$|(\hat{u}_r)_{ab}| \ll \sqrt{k_a k_b}, \quad (3.17)$$

which has to be added to the inequalities (3.1a) and (3.1b) in order to complete the specification of the physical regime.

## B. Construction of the building block: The regime

### (3.1a)

#### 1. The statistical model

The BB is assumed, for the time being, centered at  $x=0$ . For the application to Eq. (2.9) the BB will have to be translated to the interval  $(L, L+\delta L)$ ; this will be done in Sec. III C. The BB is constructed from  $m$  delta slices located at the positions  $x_r$  (see Fig. 2), i.e., assuming  $m$  to be odd,

$$x_r = rd, \quad (3.18a)$$

$$r = -\frac{m-1}{2}, \dots, 0, \dots, \frac{m-1}{2}, \quad (3.18b)$$

$$\delta L = (m-1)d, \quad (3.18c)$$

where  $d$  denotes the distance between successive slices and  $\delta L$  the thickness of the BB.

The  $m$  potentials  $\hat{u}_r(y)$ ,  $r=1, \dots, m$ , are assumed to be statistically independent and identically distributed. We indicate the  $p$ th moments of the individual  $\hat{u}_r(y)$ 's and  $\hat{v}_r(y)$  [which are related by the definition (3.16)] as

$$\mu_p^{(u)}(a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_p b_p) = \langle (\hat{u}_r)_{a_1 b_1} (\hat{u}_r)_{a_2 b_2} \dots (\hat{u}_r)_{a_p b_p} \rangle, \quad (3.19a)$$

$$\mu_p^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_p b_p) = \langle (\hat{v}_r)_{a_1 b_1} (\hat{v}_r)_{a_2 b_2} \dots (\hat{v}_r)_{a_p b_p} \rangle. \quad (3.19b)$$

We assume, for simplicity, that all odd moments vanish, i.e.,

$$\mu_{2t+1}^{(u)}(a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_{2t+1} b_{2t+1}) = 0. \quad (3.20)$$

We thus have

$$\langle (\hat{u}_r)_{ab} \rangle = \mu_1^{(u)}(ab) = 0 \quad (3.21a)$$

$$\begin{aligned} \langle (\hat{u}_r)_{ab} (\hat{u}_s)_{cd} \rangle &= \mu_2^{(u)}(ab, cd) \delta_{rs} \\ &\dots \end{aligned} \quad (3.21b)$$

and similarly for the  $\hat{v}_r$ 's. It is useful to introduce the correlation coefficient between the matrix elements  $(\hat{u}_r)_{ab}$  and

$(\hat{u}_r)_{cd}$  [which coincides with the correlation coefficient between  $(\hat{v}_r)_{ab}$  and  $(\hat{v}_r)_{cd}$ ] as

$$C(ab, cd) = \frac{\mu_2^{(u)}(ab, cd)}{[\mu_2^{(u)}(ab)\mu_2^{(u)}(cd)]^{1/2}} = \frac{\mu_2^{(v)}(ab, cd)}{[\mu_2^{(v)}(ab)\mu_2^{(v)}(cd)]^{1/2}}, \quad (3.22)$$

where  $\mu_2^{(v)}(ab) \equiv \mu_2^{(v)}(ab, ab)$  denotes the variance of  $(\hat{v}_r)_{ab}$  [recall that  $\mu_1^{(v)}(ab)=0$ ]. For even moments higher than the second we do not make, at this point, any special assumption; a particular scaling law will be assumed in Eq. (3.40) below.

From the statistics of the  $(\hat{u}_r)_{ab}$ 's [and  $(\hat{v}_r)_{ab}$ 's] we can find the statistics of the  $(\epsilon_r)_{ab}^{ij}$ , using the relations (3.14). For instance, we find that the first moment of  $(\epsilon_r)_{ab}^{ij}$  vanishes, i.e.,

$$\langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} \rangle = 0 \quad (3.23)$$

and that the second moments can be written as

$$\langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} (\epsilon_s)_{cd}^{hl} \rangle = \mu_2^{(v)}(ab, cd) [(\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_r)_{cd}^{hl}] \delta_{rs}, \quad (3.24)$$

where  $(\vartheta_r)_{ab}^{ij}$  was defined in Eqs. (3.14) and (3.15). The individual transfer matrices depend on the slice position  $x_r$  and, as a consequence, they are not identically distributed.

#### 2. The transfer matrix for the building block: Its first and second moments

The transfer matrix for the total sequence of  $m$  delta slices is given by

$$\mathbf{M}^{(m)} = \mathbf{M}_m \mathbf{M}_{m-1} \dots \mathbf{M}_1 \quad (3.25a)$$

$$= (\mathbf{I}_{2N} + \epsilon_m) (\mathbf{I}_{2N} + \epsilon_{m-1}) \dots (\mathbf{I}_{2N} + \epsilon_1) \quad (3.25b)$$

$$\begin{aligned} &= \mathbf{I}_{2N} + \sum_r \epsilon_r + \sum_{r_1 > r_2} \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} + \dots \\ &+ \sum_{r_1 > \dots > r_\mu} \epsilon_{r_1} \dots \epsilon_{r_\mu} + \dots \end{aligned} \quad (3.25c)$$

$$\equiv \mathbf{I}_{2N} + \epsilon. \quad (3.25d)$$

The last line defines the matrix  $\epsilon$  [that was already introduced in Eq. (2.4)] by which the total transfer matrix  $\mathbf{M}$  of the BB differs from the unit matrix  $\mathbf{I}_{2N}$ ; it is given by

$$\begin{aligned} \epsilon &= \sum_r \epsilon_r + \sum_{r_1 > r_2} \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} + \dots + \sum_{r_1 > \dots > r_\mu} \epsilon_{r_1} \dots \epsilon_{r_\mu} + \dots \\ &\equiv \sum_{\mu=1}^m \epsilon^{(\mu)}, \end{aligned} \quad (3.26a)$$

$$\equiv \sum_{\mu=1}^m \epsilon^{(\mu)}, \quad (3.26b)$$

where the last line defines the contribution to  $\epsilon$  of order  $\mu$  in the individual  $\epsilon_r$ 's. Our aim is to find the statistical properties—in particular the moments—of the matrix  $\epsilon$ . In the future we shall use the notation  $\langle \dots \rangle_{\delta L}$  to indicate an average associated with the BB, i.e.,

$$\langle G(\mathbf{M}) \rangle_{\delta L} \equiv \langle G(\mathbf{M}^{(m)}) \rangle, \quad (3.27)$$

just as in Eq. (2.8). For the average of  $\mathbf{M}$  we trivially find, from Eqs. (3.25a) and (3.25b) and the fact the various  $\epsilon_r'$  are statistically independent and average to zero [Eq. (3.23)],

$$\langle \mathbf{M} \rangle_{\delta L} = \langle \mathbf{M}_m \rangle \cdots \langle \mathbf{M}_1 \rangle = I_{2N}. \quad (3.28)$$

Thus Eq. (3.25d) implies that the first moment of  $\epsilon$  vanishes, i.e.,

$$\langle \epsilon \rangle_{\delta L} = 0, \quad (3.29)$$

as could also have been obtained by averaging Eq. (3.26) directly

$$\langle \epsilon \rangle_{\delta L} = \sum_{\mu=1}^m \langle \epsilon^{(\mu)} \rangle_{\delta L} \quad (3.30a)$$

$$= \sum_r \langle \epsilon_r \rangle + \sum_{r_1 > r_2} \langle \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} \rangle + \cdots + \sum_{r_1 > \dots > r_\mu} \langle \epsilon_{r_1} \cdots \epsilon_{r_\mu} \rangle + \cdots = 0. \quad (3.30b)$$

For the second moments of  $\epsilon$  we have, from Eq. (3.26b)

$$\langle \epsilon_{ab}^{ij} \epsilon_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_{\mu, \mu'=1}^m \langle [\epsilon^{(\mu)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(\mu')}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} \quad (3.31a)$$

$$+ \langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} + \langle [\epsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} \quad (3.31b)$$

$$+ \langle [\epsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} + \langle [\epsilon^{(3)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} + \langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(3)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} + \cdots. \quad (3.31c)$$

The second line (3.31a) is second order in the individual  $[\epsilon_r]_{ab}^{ij}$  and hence in the potentials  $(\hat{v}_r)_{ab}$ , and the successive lines are higher order in these quantities.

a. *The second-order term in the second-moment expansion, (3.31a).* The second-order term (3.31a) in the second moment expansion can be written using Eqs. (3.26) and (3.24) as

$$\langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_{r,s} \langle (\epsilon_r)_{ab}^{ij} (\epsilon_s)_{cd}^{hl} \rangle \quad (3.32a)$$

$$= \sum_{r,s} \langle (\hat{v}_r)_{ab} (\hat{v}_s)_{cd} \rangle [(\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_s)_{cd}^{hl}] \quad (3.32b)$$

$$= \frac{\mu_2^{(v)}(ab, cd)}{d} \sum_r [(\vartheta_r)_{ab}^{ij} (\vartheta_r)_{cd}^{hl}] d. \quad (3.32c)$$

From the definition of the correlation coefficient between pairs of matrix elements, (3.22), we can write the fraction in Eq. (3.32c) as

$$\begin{aligned} \frac{\mu_2^{(v)}(ab, cd)}{d} &= C(ab, cd) \left[ \frac{\mu_2^{(v)}(ab)}{d} \frac{\mu_2^{(v)}(cd)}{d} \right]^{1/2} \\ &\equiv \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{l_{ab}(k) l_{cd}(k)}}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Here we have used the standard definition of the *mean free*

*path* (MFP)  $l_{ab}$  associated with the incoherent sum of reflections from channel  $b$  to  $a$  from a sequence of  $\nu=1/d$  scatterers per unit length, i.e.,

$$\frac{1}{l_{ab}(k)} = \nu \langle |r_1(k)|_{ab}^2 \rangle, \quad (3.34)$$

together with the fact that the average reflection coefficient for a delta slice is  $r$  independent and approximately given, in the weak-scattering regime, (3.17), by [see Eqs. (A5), (3.13), and (3.14)]

$$\langle |(r_1)_{ab}|^2 \rangle \approx \langle |(\hat{v}_1)_{ab}|^2 \rangle. \quad (3.35)$$

We can write the following equivalent expressions for the inverse MFP:

$$\frac{1}{l_{ab}(k)} = \nu \mu_2^{(v)}(ab) = \frac{\mu_2^{(v)}(ab)}{d} = \frac{\mu_2^{(u)}(ab)}{4k_a k_b d} \equiv \frac{\tilde{\mu}_2^{(u)}(ab)}{4k_a k_b}, \quad (3.36)$$

where the energy dependence of the MFP is exhibited explicitly. It will be convenient to make the change of variables

$$\hat{u}_{ab} = \tilde{u}_{ab} \sqrt{d} \quad (3.37)$$

and consider the distribution of  $\tilde{u}_{ab}$  to be independent of  $d$ , with a variance  $\tilde{\mu}_2^{(u)}(ab)$  [which was introduced in Eq. (3.36)], related to  $\mu_2^{(u)}(ab)$  by

$$\mu_2^{(u)}(ab) = \tilde{\mu}_2^{(u)}(ab)d. \quad (3.38)$$

Since our delta slice is spatially symmetric in the  $x$  direction, we have the same result for the MFP for the transmission, out of the incident flux, from channel  $b$  to channel  $a$ . Within the present model there is thus no distinction between the so-called transport and scattering MFP's [32].

We now turn to the summation in Eq. (3.32c). We shall evaluate it in the *dense-weak-scattering limit* (DWSL) which we now define [see Eqs. (3.39) below]. This limit was already referred to in Secs. I and II. Within the regime defined by the inequalities (3.1a) we have already considered  $\alpha$  as the smallest length scale occurring in the problem and simplified the situation by literally taking the limit  $\alpha \rightarrow 0$  [Eq. (3.8b)]. With regards to the next length scale in our regime, i.e., the distance  $d$  between successive scattering slices, we shall again be interested in a simplifying limit. For a *fixed energy* (and hence fixed  $\lambda$ ), fixed  $\delta L$  and MFP's, it will be convenient to take the continuous limit

$$d \rightarrow 0, \quad (3.39a)$$

$$m \rightarrow \infty, \quad (3.39b)$$

in such a way that

$$md = \delta L \quad (3.39c)$$

remains fixed. From Eq. (3.37), in the limit  $d \rightarrow 0$  each individual scatterer becomes infinitely weak and, from Eq. (3.38),

$$\mu_2^{(u)}(ab) \rightarrow 0, \quad (3.39d)$$

while the MFP's  $l_{ab}$  of Eq. (3.36) remain fixed (for a fixed energy). The DWSL can be considered as the extreme idealization of the inequality (3.17) and of the inequality  $d \ll \{\lambda, \delta L, l\}$  of (3.1a) for fixed energy,  $\delta L$  and MFP's.

We have already assumed in Eq. (3.20) that all the odd moments of  $\hat{u}$  and  $\hat{v}$  vanish. From Eq. (3.19) with  $p=2t$  and the change of variables (3.37) we see that the even moments scale with  $d$  as

$$\mu_{2t}^{(u)}(a_1 b_1, \dots, a_{2t} b_{2t}) = d^t \tilde{\mu}_{2t}^{(u)}(a_1 b_1, \dots, a_{2t} b_{2t}), \quad (3.40)$$

$\tilde{\mu}_{2t}^{(u)}(a_1 b_1, \dots, a_{2t} b_{2t})$  being independent of  $d$ , with a similar expression for  $\mu_{2t}^{(v)}(a_1 b_1, \dots, a_{2t} b_{2t})$ . Equation (3.38) is the particular case of this last equation for  $t=1$ .

In the DWSL, the  $\Sigma_r$  appearing in Eq. (3.32c) tends to an integral, which we denote by

$$\begin{aligned} \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) &\equiv \lim_{\text{DWS}} \sum_r [(\partial_r)_{ab}^{ij} (\partial_r)_{cd}^{hl}] d \\ &= \int_{-\delta L/2}^{\delta L/2} \vartheta_{ab}^{ij}(x) \vartheta_{cd}^{hl}(x) dx, \end{aligned} \quad (3.41)$$

where  $\vartheta_{ab}^{ij}(x)$  is given by Eq. (3.15) with  $x_r$  replaced by  $x$ . We find explicitly

$$\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) = (-)^{i+h+1} \frac{\sin \frac{K_{ab,cd}^{ij,hl} \delta L}{2}}{\frac{K_{ab,cd}^{ij,hl}}{2}}, \quad (3.42)$$

a quantity with dimensions of length,  $K_{ab,cd}^{ij,hl}$  being given by

$$K_{ab,cd}^{ij,hl} = (-1)^i k_a + (-1)^{j+1} k_b + (-1)^h k_c + (-1)^{l+1} k_d. \quad (3.43)$$

From Eq. (3.43), and using the notation of Eq. (A8), we readily find the symmetry relations

$$K_{ab,cd}^{ij,hl} = K_{cd,ab}^{hl,ij} = -K_{ab,cd}^{i\bar{j},h\bar{l}}, \quad (3.44)$$

so that

$$\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) = \Delta_{cd,ab}^{hl,ij}(k, \delta L) = \Delta_{ab,cd}^{i\bar{j},h\bar{l}}(k, \delta L). \quad (3.45)$$

We thus have, for the expression (3.32) in the DWSL:

$$\lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{kl} \rangle_{\delta L} = \frac{C(ab,cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L), \quad (3.46)$$

a result valid for arbitrary  $k$  and  $\delta L$ .

For the application to Eq. (2.9) we shall need the expansion of the moments of  $\varepsilon$  in powers of  $\delta L$ , with the BB translated to the interval  $(L, L+\delta L)$ ; this will be done in Sec. III C below. For the time being we perform that expansion, for simplicity, with the BB centered at the origin. We see from Eq. (3.42) that the leading term of  $\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L)$  in an expansion in powers of  $\delta L$  is linear in  $\delta L$  [as is obvious from the integral definition itself, Eq. (3.41)], i.e.,

$$\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) = (-)^{i+h+1} \delta L + O(\delta L)^2. \quad (3.47)$$

As a result, Eq. (3.46) shows that the leading term in an expansion in powers of  $\delta L$  of the second-order contribution to the second moments of  $\varepsilon$  for the BB behaves, in the DWSL, as

$$\lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = (-)^{i+h+1} \frac{C(ab,cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \delta L + O(\delta L)^2. \quad (3.48)$$

*b. The fourth-order term in the second-moment expansion, Eq. (3.31c).* A similar analysis is performed in Appendix C, Eq. (C2), for the fourth-order contribution to the second moments of  $\varepsilon$ , Eq. (3.31c): it is shown that the leading term of such a quantity, in an expansion in powers of  $\delta L$ , behaves, in the DWSL, as  $(\delta L/l)^2$ , where  $l$  denotes a typical MFP [see Eq. (C6)]. From this result and Eq. (3.48) we thus have

$$\lim_{\text{DWS}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = (-)^{i+h+1} \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \delta L + O(\delta L)^2. \quad (3.49)$$

The analysis of the two above particular cases is generalized to arbitrary moments in Appendix D. For an even moment ( $p=2t$ ) in the DWSL, the lowest-order term in Eq. (D1) (this term is of order  $2t$  in the  $\hat{v}_r$ 's) has a leading term in an expansion in powers of  $\delta L$  which behaves as  $(\delta L/l)^t$ . Higher-order terms in (D1) are higher order in  $\delta L$ . Also, *the dependence on the cumulants of the potential higher than the second drops out in the DWSL*. The contribution to the second moments obtained above, Eq. (3.49), represents, for  $t=1$ , a particular case of this general result. For an odd moment ( $p=2t+1$ ), the corresponding term behaves as  $(\delta L/l)^{t+1}$ . In conclusion, this proves the behavior of the moments of  $\varepsilon$  that was mentioned in Sec. II, right after Eq. (2.9).

### C. The diffusion coefficients and the diffusion equation

We now generalize the above analysis to the situation in which the BB lies in the interval  $(L, L+\delta L)$ . The integral in Eq. (3.41) has to be performed in that interval [the notation  $\langle \dots \rangle_{L, \delta L}$  in Eq. (2.9) and in some of the following equations indicates this fact] and Eq. (3.46) becomes

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} \\ = \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \Delta_{ab, cd}^{ij, hl}(k, \delta L) e^{iK_{ab, cd}^{ij, hl}(L+\delta L/2)}, \end{aligned} \quad (3.50)$$

while the expansion in Eq. (3.49) [taking into account Eq. (C8)] is now

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} = 2D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \delta L + \left[ iK_{ab, cd}^{ij, hl} D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \right. \\ \left. + 2 \sum_{\alpha' \beta', \lambda' \mu'} D_{\alpha \alpha', c \beta'}^{i \lambda', h \mu'}(k, L) D_{\alpha' b, \beta' d}^{\lambda' j, \mu' l}(k, L) \right] \\ \times (\delta L)^2 + O(\delta L)^3, \end{aligned} \quad (3.51)$$

where  $K_{ab, cd}^{ij, hl}$  was defined in Eq. (3.43). In Eq. (3.51) we have defined the “diffusion coefficients”  $D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L)$

$$D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) = (-)^{i+h+1} \frac{C(ab, cd)}{2\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} e^{iK_{ab, cd}^{ij, hl}L}, \quad (3.52)$$

which depend on the energy (through the energy dependence of the MFP's and through  $K_{ab, cd}^{ij, hl}$ ) and also on the length  $L$ . Notice that the diffusion coefficients are, in general, complex numbers; this, however, should not worry the reader, because the evolution of real observables will always turn out to be real [see, for instance, Eq. (4.5a) below].

From the relations (3.44) we readily find for the diffusion coefficients the symmetry properties

$$D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) = D_{cd, ab}^{hl, ij}(k, L) = [D_{ab, cd}^{\bar{j}, \bar{h}l}(k, L)]^*. \quad (3.53)$$

We introduce the expansion (3.51) and a similar one for higher moments of  $\varepsilon$  on the right-hand side (RHS) of Eq. (2.9), thus obtaining a power series in  $\delta L$ :

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L} = \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L + \sum_{\substack{ijhl, \lambda\mu \\ abcd, \alpha\beta}} \left\{ D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \delta L \right. \\ \left. + \left[ \frac{1}{2} iK_{ab, cd}^{ij, hl} D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{\alpha' \beta', \lambda' \mu'} D_{\alpha \alpha', c \beta'}^{i \lambda', h \mu'}(k, L) D_{\alpha' b, \beta' d}^{\lambda' j, \mu' l}(k, L) \right] (\delta L)^2 \right\} \\ \times \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{\alpha\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L + O(\delta L)^2. \end{aligned} \quad (3.54)$$

The curly bracket in this last equation corresponds to the BB second moment of Eq. (3.51); the contribution [which starts with  $(\delta L)^2$ ] of the third and higher moments is just indicated in the last line. We also perform on the left-hand side (LHS) of Eq. (2.9) a Taylor expansion of  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L}$  in powers of  $\delta L$  around the “initial” value  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_L$ , i.e.,

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L} = \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L + \frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L}{\partial L} \delta L + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L}{\partial L^2} (\delta L)^2 \\ + \dots \end{aligned} \quad (3.55)$$

We then identify the coefficients of the various powers of  $\delta L$  in (3.54) and (3.55). In particular, the coefficients of  $\delta L$  give the diffusion equation, (2.10), derived in Sec. II, which we reproduce here:

$$\frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L}{\partial L} = \sum_{\substack{ijhl, \lambda\mu \\ abcd, \alpha\beta}} D_{ab, cd}^{ij, hl}(k, L) \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{\alpha\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L. \quad (3.56)$$

Equating the coefficients of higher powers of  $\delta L$  in Eqs. (3.54) and (3.55) we obtain results which could be derived from the diffusion equation (3.56) by successive differentiations. We have verified this statement explicitly for the coefficients of  $(\delta L)^2$  in the specific one-channel case treated in Sec. IV A below.

The diffusion equation (3.56) governs the evolution with length of the expectation value of physical observables. The expectation values appearing in Eq. (3.56) must fulfill, for  $L=0$ , the “initial condition”

$$\langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L=0} = F(\mathbf{I}), \quad (3.57)$$

obtained by setting  $\mathbf{M}=\mathbf{I}$  in the expression  $F(\mathbf{M})$  for the observable, since for  $L=0$  the scattering system is absent. More general initial conditions are discussed in Ref. [6].

As was indicated earlier, the cumulants of the potential higher than the second are irrelevant in the end; this signals the existence of a *generalized central-limit theorem* (CLT): once the MFP's are specified, the limiting equation (3.56) is *universal*, i.e., independent of other details of the microscopic statistics.

Since the structure of the present diffusion equation is essentially the same as the structure of the one derived in MT [Ref. [25], Eq. (3.18)], it is worthwhile, for the sake of comparison, to summarize, at this point, the MT model. In MT the statistical assumptions are made at the level of the individual scattering units, just as in the present paper (the same units that were also contemplated in Ref. [13]); however, the assumptions are not made for the potentials, but rather for the corresponding transfer matrices. In MT, the transfer matrix for each scattering unit is close to the unit matrix and is written as  $\mathbf{M}_r = \mathbf{I} + \epsilon_r$ , just as in our Eq. (3.13) above; it is further expressed in terms of independent parameters (in the Pereyra representation [33]), for which various statistical assumptions are made:

(i) The first moment and some of the second moments of the independent parameters are chosen so that the resulting  $\langle \epsilon_r \rangle = 0$  [see Eqs. (3.15) and (3.16) of MT; with this feature, there is no drift term in the resulting Fokker-Planck equation], while the remaining second moments of the independent parameters are kept arbitrary.

(ii) The individual scattering units are statistically independent and identically distributed.

(iii) The energy does not appear explicitly, but only as the energy at which the resulting MFP's have to be evaluated.

(iv) In order to obtain explicit expressions for the diffusion coefficients, in the analysis that follows from Eq. (3.18) of Ref. [25] a more explicit model was postulated for the second moments mentioned in (i) above.

In the present paper, assumption (i) is a consequence of the vanishing of the first moment of the individual potentials, Eq. (3.21a), thus giving Eq. (3.23). Assumption (ii) has to be contrasted with Eq. (3.24) above, which shows that, here, the transfer matrices for the individual scattering units are not identically distributed. As it has already been stressed, in contrast to assumption (iii) the energy appears now explicitly. Finally, the additional assumptions mentioned in (iv) are, to some extent, arbitrary; they are compared below with those arising from the short-wavelength approximation of the present model.

#### D. The short-wavelength approximation: The regime (3.1b)

In the DWSL the above expressions are exact for all energies. We now turn to a different regime, to be called the short-wavelength approximation (SWLA), defined by the inequalities (3.1b). The regime to be studied is analogous to the geometrical optics limit studied in optics [34]. Essentially, we shall assume that we can fit many wavelengths inside a BB, i.e.,

$$\lambda \ll \delta L \quad \text{or} \quad k\delta L \gg 1, \quad (3.58)$$

so that in this regime *only lengths much larger than the wavelength actually enter the description*.

To this end we go back to Eq. (2.9) which, after setting  $\langle \epsilon_{ac}^{ik} \rangle_{L,\delta L} = 0$  because of (3.29), we rewrite here for convenience

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L,k} &= \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L,k} + \frac{1}{2!} \sum_{ijkl} \langle \epsilon_{ab}^{ij} \epsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k} \\ &\quad \times \sum_{\substack{\lambda\mu \\ \alpha\beta}} \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{aa}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_{L,k} + \dots \end{aligned} \quad (3.59)$$

We have indicated explicitly the  $k$  dependence of the various expectation values. We first analyze below the BB factors appearing on the RHS of the above equation, and then the remaining expectation values.

(1) The BB factor  $\langle \epsilon_{ab}^{ij} \epsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k}$  can be written, from Eq. (3.31), as

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_{ab}^{ij} \epsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k} &= \langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k} + \langle [\epsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k} \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (3.60)$$

The first term on the RHS of this last equation is given by Eq. (3.50), and its contribution to (3.59) is given by

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle [\epsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\epsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k} \sum_{\substack{\lambda\mu \\ \alpha\beta}} \langle (\dots)^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{abcd \\ (K=0)}} \frac{C(ab,cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k,\delta L) e^{iK(L+\delta L/2)} \\ &\quad \times \sum_{\substack{\lambda\mu \\ \alpha\beta}} \langle (\dots)^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{abcd \\ (K \neq 0)}} \frac{C(ab,cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \\ &\quad \times \Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k,\delta L) e^{iK(L+\delta L/2)} \sum_{\substack{\lambda\mu \\ \alpha\beta}} \langle (\dots)^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

In this equation,  $K$  is an abbreviation for  $K_{ab,cd}^{ij,hl}$  which was defined in Eq. (3.43), and  $\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k,\delta L)$  was given in Eq. (3.42). We have also used the notation

$$\langle (\dots)^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L,k} \equiv \left\langle M_{b\alpha}^{i\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{aa}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_{L,k}, \quad (3.62)$$

as an abbreviation for the last factor appearing on the RHS of Eq. (3.59). In the second line in Eq. (3.61) the sum is over the combinations of indices that make  $K_{ab,cd}^{ij,hl} = 0$ , while in the third line it is over those combinations that make  $K_{ab,cd}^{ij,hl} \neq 0$ .

The second term on the RHS of Eq. (3.60) is given in Eq. (C7) and, using a similar convention as in the last equation, its contribution to Eq. (3.59) can be written as

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L; k} \sum_{\lambda\mu} \langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L, k} \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl\lambda'\mu'} \frac{C(\alpha\alpha', c\beta')}{\sqrt{l_{\alpha\alpha'}(k)l_{c\beta'}(k)}} \frac{C(\alpha'b, \beta'd)}{\sqrt{l_{\alpha'b}(k)l_{\beta'd}(k)}} \Delta_{\alpha\alpha', \alpha'b, c\beta', \beta'd}^{i\lambda', \lambda'j, h\mu', \mu'l} [k, \mathcal{R}(\delta L)] e^{i(K_1+K_2)(L+\delta L/2)} \sum_{\lambda\mu} \langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L, k} \\
 & \quad \text{abcd}\alpha'\beta' \\
 & \quad (K_1=K_2=0) \\
 & \quad + \frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{ccc} \sum_{ijkl\lambda'\mu'} & + & \sum_{ijkl\lambda'\mu'} & + & \sum_{ijkl\lambda'\mu'} \\ \text{abcd}\alpha'\beta' & & \text{abcd}\alpha'\beta' & & \text{abcd}\alpha'\beta' \\ (K_1 \neq 0, K_2 \neq 0) & & (K_1=0, K_2 \neq 0) & & (K_1 \neq 0, K_2=0) \end{array} \right\} \frac{C(\alpha\alpha', c\beta')}{\sqrt{l_{\alpha\alpha'}(k)l_{c\beta'}(k)}} \frac{C(\alpha'b, \beta'd)}{\sqrt{l_{\alpha'b}(k)l_{\beta'd}(k)}} \\
 & \quad \times \Delta_{\alpha\alpha', \alpha'b, c\beta', \beta'd}^{i\lambda', \lambda'j, h\mu', \mu'l} [k, \mathcal{R}(\delta L)] e^{i(K_1+K_2)(L+\delta L/2)} \sum_{\lambda\mu} \langle (\dots)_{abcd\alpha\beta}^{ijhl\lambda\mu} \rangle_{L, k}. \tag{3.63} \\
 & \quad \alpha\beta
 \end{aligned}$$

We recall that  $K_1$  and  $K_2$  are defined in Eq. (C4).

Higher-order contributions occurring on the RHS of Eq. (3.60) can be obtained from the analysis of Appendix D.

We now analyze the consequences of the inequality (3.58) for the above expressions (3.61) and (3.63), which so far are exact. It will be convenient to take the wave number  $k$  as

$$k = \frac{(N+1/2)\pi}{W}, \tag{3.64}$$

i.e., halfway between the threshold for the last open channel and that for the first closed one, so that the longitudinal momenta are given by  $k_a = k\sqrt{1 - [a/(N+1/2)]^2}$ . From Eq. (3.43) we see that when  $K_{ab,cd}^{ij,hl} \neq 0$ ,  $K_{ab,cd}^{ij,hl}$  is proportional to  $k$  (the coefficients only depending on channel indices), so that  $K_{ab,cd}^{ij,hl} \delta L \gg 1$ . As a result we have the following:

(i) In Eq. (3.61) the sum with  $K=0$  gives the largest contribution (proportional to  $\delta L$ , as we now analyze in detail), while the sum with  $K \neq 0$ , which contains  $K$  in the denominator of  $\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L)$ , will be neglected. Let us be more specific about the combination of indices  $ab, cd$  and  $ij, hl$  that give rise to  $K=0$  in Eq. (3.61). Take, for instance,  $i=j=h=l=1$ . Since  $k_a, k_b, k_c, k_d$  are incommensurate,  $K_{ab,cd}^{11,11} = k_b - k_a + k_d - k_c$  [see Eq. (3.43)] can only vanish if  $a=b$  and  $c=d$ , or  $a=d$  and  $b=c$ . On the other hand,  $K_{ab,cd}^{12,12} = -(k_a + k_b + k_c + k_d)$  never vanishes. We thus have, for  $\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L)$ , defined for arbitrary  $k$  and  $\delta L$  in Eq. (3.42), the approximate result

$$\Delta_{ab,cd}^{ij,hl}(k, \delta L) \approx (-1)^{i+h+1} \delta_{K0} \delta L \tag{3.65a}$$

(here,  $\delta_{K0}$  is Kronecker's delta which takes on the value 1 when  $K=0$  and vanishes otherwise) or, more explicitly,

$$\Delta_{ab,cd}^{11,11}(k, \delta L) \approx - \frac{\delta_{ab}\delta_{cd} + \delta_{ad}\delta_{bc}}{1 + \delta_{ac}} \delta L, \tag{3.65b}$$

$$\Delta_{ab,cd}^{11,22}(k, \delta L) \approx \frac{\delta_{ab}\delta_{cd} + \delta_{ac}\delta_{bd}}{1 + \delta_{ad}} \delta L, \tag{3.65c}$$

$$\Delta_{ab,cd}^{12,21}(k, \delta L) \approx \frac{\delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}}{1 + \delta_{ab}} \delta L, \tag{3.65d}$$

$$\Delta_{ab,cd}^{11,12}(k, \delta L) \approx \Delta_{ab,cd}^{11,21}(k, \delta L) \approx \Delta_{ab,cd}^{12,12}(k, \delta L) \approx 0. \tag{3.65e}$$

We can thus write  $\langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L}$  in the DWSL, followed by the SWLA, as

$$\lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{kl} \rangle_{\delta L} \approx \frac{C(ab, cd)}{\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} (-1)^{i+h+1} \delta_{K0} \delta L. \tag{3.66a}$$

One finds explicitly in the various cases [ $C(a, c)$  being an abbreviation for  $C(aa, cc)$ ]:

$$\begin{aligned}
 & \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{11} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{11} \rangle_{\delta L} \\
 & \approx - \frac{1}{1 + \delta_{ac}} \left[ C(a, c) \frac{\delta L}{\sqrt{l_{aa}(k)l_{cc}(k)}} \delta_{ab}\delta_{cd} + \frac{\delta L}{l_{ab}} \delta_{ad}\delta_{bc} \right], \tag{3.66b}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{11} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{22} \rangle_{\delta L} \\
 & \approx \frac{1}{1 + \delta_{ad}} \left[ C(a, c) \frac{\delta L}{\sqrt{l_{aa}(k)l_{cc}(k)}} \delta_{ab}\delta_{cd} + \frac{\delta L}{l_{ab}} \delta_{ac}\delta_{bd} \right], \tag{3.66c}
 \end{aligned}$$

$$\lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{12} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{21} \rangle_{\delta L} \approx \frac{\delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}}{1 + \delta_{ab}} \frac{\delta L}{l_{ab}(k)}, \tag{3.66d}$$

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{11} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{12} \rangle_{\delta L} &\approx \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{11} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{21} \rangle_{\delta L} \\ &\approx \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{12} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{12} \rangle_{\delta L} \approx 0. \end{aligned} \quad (3.66e)$$

Other combinations can be found from TRI, Eqs. (A7). The result is that in the DWSL, followed by the SWLA, the second-order contribution to a second moment of  $\varepsilon$  for the BB is either negligible or behaves as  $\delta L/l$ ,  $l$  denoting a typical MFP.

One can write Eqs. (3.66) as

$$\lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(1)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(1)}]_{cd}^{kl} \rangle_{\delta L} \approx 2\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl}(k)\delta L, \quad (3.67)$$

where we have defined the diffusion coefficients in the SWLA as

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} = (-1)^{i+h+1} \frac{C(ab,cd)}{2\sqrt{l_{ab}(k)l_{cd}(k)}} \delta_{K0} \quad (3.68)$$

which, from Eq. (3.66), take the explicit form

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{11,11}(k) = -\frac{1}{1+\delta_{ac}} \left[ \frac{C(a,c)}{2\sqrt{l_{aa}(k)l_{cc}(k)}} \delta_{ab}\delta_{cd} + \frac{1}{2l_{ab}} \delta_{ad}\delta_{bc} \right], \quad (3.69a)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{11,22}(k) = \frac{1}{1+\delta_{ad}} \left[ \frac{C(a,c)}{2\sqrt{l_{aa}(k)l_{cc}(k)}} \delta_{ab}\delta_{cd} + \frac{1}{2l_{ab}} \delta_{ac}\delta_{bd} \right], \quad (3.69b)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{12,21}(k) = \frac{\delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}}{1+\delta_{ab}} \frac{1}{2l_{ab}(k)}, \quad (3.69c)$$

$$\tilde{D}_{ab,cd}^{11,12}(k) = \tilde{D}_{ab,cd}^{11,21}(k) = \tilde{D}_{ab,cd}^{12,12}(k) = 0. \quad (3.69d)$$

These diffusion coefficients depend on the energy through the MFP's only.

(ii) Equation (C3) shows that in the DWSL, followed by the SWLA, the fourth-order contribution (C2) to a second moment of  $\varepsilon$  for the BB is either negligible or behaves as  $(\delta L/l)^2$ ,  $l$  denoting a typical MFP. Thus in Eq. (3.63) we keep only the sum for  $K_1=K_2=0$  and neglect the other summations, the result being thus proportional to  $(\delta L/l)^2$ .

We finally obtain, for the BB second moments of Eq. (3.60) in the SWLA [see also Eqs. (3.68) and (C8)]:

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L;k} &\approx 2\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl}(k)\delta L \\ &+ 2 \sum_{\alpha'\beta',\lambda'\mu'} \tilde{D}_{\alpha\alpha',c\beta'}^{i\lambda',h\mu'}(k) \tilde{D}_{\alpha'b,\beta'd}^{\lambda'\mu'1}(k) (\delta L)^2 \\ &+ O(\delta L)^3. \end{aligned} \quad (3.70)$$

(2) Similar arguments applied to the analysis of Appendix D lead to the result that a  $(2t)$ -th moment of  $\varepsilon$  for the BB can either be neglected because it contains  $k_a$ 's in the denomina-

tor, or it gives a contribution to Eq. (3.59) which is proportional to  $(\delta L/l)^t$ , whereas a  $(2t+1)$ -th moment contributes as  $(\delta L/l)^{t+1}$ .

(3) We need some knowledge about the behavior of the averages  $\langle \dots \rangle_{L,k}$  appearing in Eq. (3.59) in the SWLA. We shall assume that, for large enough  $k$ , we can approximate

$$\langle \dots \rangle_{L,k} \approx \langle \dots \rangle_L^{(0)}, \quad (3.71)$$

where the RHS represents a function smooth to all scales of  $L$  and whose energy dependence only appears through the MFP's  $l_{ab}(k)$ . This ansatz, which seems merely reasonable at this point, is verified in a particular case in Sec. IV A below. In the analysis that follows we shall assume that the energy is kept fixed, so that the MFP's will be taken as fixed parameters and will be written as  $l_{ab}$ . Likewise, we shall write  $\tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl}$  for the diffusion coefficients.

We now make use of Eq. (3.70) and the result (2) above, as well as the assumption (3.71), to write Eq. (3.59) in the SWLA as

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L}^{(0)} &\approx \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L^{(0)} + \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd,\alpha\beta}} \left[ \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \delta L \right. \\ &+ \left. \sum_{\alpha'\beta',\lambda'\mu'} \tilde{D}_{\alpha\alpha',c\beta'}^{i\lambda',h\mu'} \tilde{D}_{\alpha'b,\beta'd}^{\lambda'\mu'1} (\delta L)^2 \right] \\ &\times \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{\alpha\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L^{(0)} + O(\delta L)^2. \end{aligned} \quad (3.72)$$

The square bracket in this last equation corresponds to the BB second moment appearing in Eq. (3.59); the contribution of the third and higher moments is just indicated in the last line, in accordance with (2) above.

We now assume that the quantity  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L}^{(0)}$  appearing on the LHS of Eq. (3.72) can be expanded in a Taylor series around the value  $L$ , and that  $\delta L$  is smaller than the radius of convergence  $R$  of the expansion, i.e.,  $\lambda \ll \delta L < R$ , so that

$$\begin{aligned} \langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L+\delta L}^{(0)} &= \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L^{(0)} + \frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L^{(0)}}{\partial L} \delta L \\ &+ \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L^{(0)}}{\partial L^2} (\delta L)^2 + \dots \end{aligned} \quad (3.73)$$

Comparing the coefficients of  $\delta L$  in Eqs. (3.72) and (3.73) we finally find

$$\frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L^{(0)}}{\partial L} = \sum_{\substack{ijhl,\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \tilde{D}_{ab,cd}^{ij,hl} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M_{\alpha\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L^{(0)}. \quad (3.74)$$

In the SWLA we have thus ended up with an evolution equation for the "smooth" quantities defined in Eq. (3.71).

We need to fix the initial conditions appropriate to Eq. (3.74). If we require Eq. (3.57) for the exact expectation values, i.e.,  $\langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L=0,k} = F(\mathbf{I})$ , and  $F(\mathbf{I})$  is  $k$  independent, then Eq. (3.71) implies

$$\langle F(\mathbf{M}) \rangle_{L=0}^{(0)} = F(\mathbf{I}). \quad (3.75)$$

More detailed assumptions than Eq. (3.71) on the structure of the expectation value  $\langle \dots \rangle_{L,k}$  appearing in Eq. (3.59) in the SWLA are presented in Appendix F of Ref. [29] for the one-channel case,  $N=1$ . There, a rederivation of Eq. (3.74) using such assumptions is also discussed.

The derivations given above of both diffusion equations (3.56) valid for arbitrary energies, and Eq. (3.74), valid in the SWLA, use, as a starting point, Eq. (3.59) which describes the result of adding a BB to an already existing waveguide of length  $L$ . This is also the starting point of the derivation given in Appendix F of Ref. [29]. We believe that it would be very instructive to rederive the diffusion equation in the SWLA, Eq. (3.74), starting directly from the more general one, Eq. (3.56), since such a derivation would shed more light on the nature of the various approximations involved. However, we have succeeded in fulfilling this goal only in the one-channel case  $N=1$ ; the derivation is presented in Appendix F of Ref. [29].

#### IV. APPLICATIONS OF THE DIFFUSION EQUATION

##### A. Analytic examples

In this section we study a simple example in which the diffusion equation (3.56) can be solved exactly. We restrict the analysis to a one-channel geometry ( $N=1$ ) and consider, as examples of the observable  $F(\mathbf{M})$ , the quantities

$$M^{11}M^{22} = \alpha\alpha^* = \frac{1}{tt^*} \equiv \frac{1}{T}, \quad (4.1a)$$

$$M^{11}M^{12} = \alpha\beta = -\left(\frac{r}{t^2}\right)^*, \quad (4.1b)$$

where we have used Eq. (A5) to establish the connection with reflection and transmission amplitudes. We shall give only the main results of the calculation, some of the details being presented in Appendix E.

For the one-channel case, the diffusion equation (3.56) can be written as

$$\frac{\partial \langle F(\mathbf{M}) \rangle_L}{\partial L} = \sum_{ijhl\lambda\mu} D^{ij,hl}(k,L) \left\langle M^{j\lambda} M^{l\mu} \frac{\partial^2 F(\mathbf{M})}{\partial M^{i\lambda} \partial M^{h\mu}} \right\rangle_L, \quad (4.2)$$

where the diffusion coefficient  $D^{ij,hl}(k,L)$  is given explicitly in Eq. (E1). For simplicity, we have suppressed all channel indices, which would take the value 1. We emphasize that in the DWSL this equation is exact, in the sense that it is valid for all energies.

The MFP is energy dependent. However, in the present calculation we keep the energy fixed and so the MFP is taken as a fixed parameter and will be written as  $l$ . One can write all the evolution equations in terms of the ratio of the length  $L$  to the MFP  $l$

$$s = L/l, \quad (4.3)$$

and essentially the ratio of the MFP to the wavelength  $\lambda$

$$x_0 = 2kl. \quad (4.4)$$

Using the diffusion coefficients of Eq. (E1) one finds the pair of coupled equations

$$\frac{\partial \langle \alpha\alpha^* \rangle_s}{\partial s} = \langle \alpha\beta \rangle_s e^{ix_0 s} + (2\langle \alpha\alpha^* \rangle_s - 1) + \langle \alpha^* \beta^* \rangle_s e^{-ix_0 s}, \quad (4.5a)$$

$$\frac{\partial \langle \alpha\beta \rangle_s}{\partial s} = -\langle \alpha\beta \rangle_s - (2\langle \alpha\alpha^* \rangle_s - 1)e^{-ix_0 s} - \langle \alpha^* \beta^* \rangle_s e^{-2ix_0 s}, \quad (4.5b)$$

which have to be solved with the initial conditions at  $s=0$ :

$$\langle \alpha\alpha^* \rangle_{s=0} = 1, \quad (4.6a)$$

$$\langle \alpha\beta \rangle_{s=0} = 0. \quad (4.6b)$$

The second derivatives of the observable  $F(\mathbf{M})$  appearing on the RHS of the diffusion equation (4.2) produce, in general, quantities which are different from the observable  $F(\mathbf{M})$  itself, whose average we wish to study. One then needs to compute the evolution of these other quantities and this, in turn, generates still new ones. In the example considered here, Eq. (4.5) shows that the evolution of  $\langle \alpha\alpha^* \rangle$  involves  $\langle \alpha\alpha^* \rangle$  and  $\langle \alpha\beta \rangle$ , and similarly for the evolution of  $\langle \alpha\beta \rangle$ : we thus find a pair of coupled equations which “close,” in the sense that the quantities occurring on the RHS are the same as on the LHS.

The evolution equations (4.5) for the real quantity  $\langle \alpha\alpha^* \rangle_s$  and the complex quantity  $\langle \alpha\beta \rangle_s$  can be written as the triplet of coupled equations (E2), which can be solved using the method of Laplace transforms, with the initial conditions (4.6), with the result

$$\langle \alpha\alpha^* \rangle_s = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left[ \frac{p_1^2 + 2p_1 + x_0^2}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{p_1 s} + \frac{p_2^2 + 2p_2 + x_0^2}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{p_2 s} + \frac{p_3^2 + 2p_3 + x_0^2}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{p_3 s} \right], \quad (4.7a)$$

$$\langle \alpha\beta \rangle_s = - \left[ \frac{p_1 + ix_0}{(p_1 - p_2)(p_1 - p_3)} e^{(p_1 - ix_0)s} + \frac{p_2 + ix_0}{(p_2 - p_1)(p_2 - p_3)} e^{(p_2 - ix_0)s} + \frac{p_3 + ix_0}{(p_3 - p_1)(p_3 - p_2)} e^{(p_3 - ix_0)s} \right]. \quad (4.7b)$$

In this equation,  $p_1$ ,  $p_2$ , and  $p_3$  are the roots of the third degree polynomial  $P(p) = p^3 + x_0^2 p - 2x_0^2$ , with  $p_1 \in \mathbb{R}$ ,  $p_2, p_3 \in \mathbb{C}$  and  $p_3 = p_2^*$ .

The solutions (4.7) are exact, being valid for arbitrary length  $L$ , MFP  $l$ , and wavenumber  $k$ . Moreover, as shown below, the solutions of the diffusion equation are in full

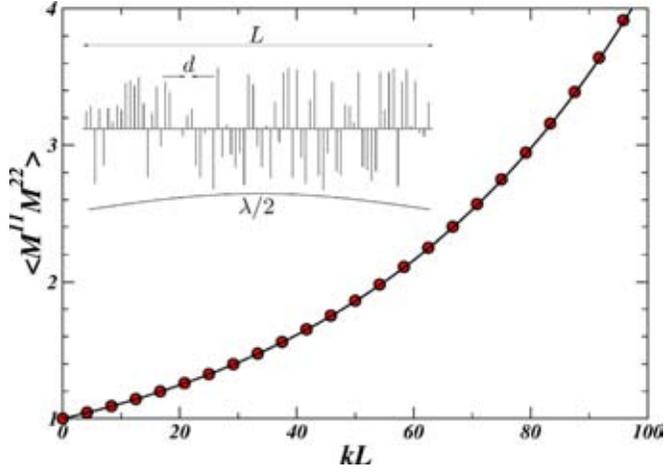


FIG. 3. (Color online)  $\langle M^{11} M^{22} \rangle = \langle \alpha \alpha^* \rangle$  versus  $kL$ . Numerical results (circles) from the one-dimensional model sketched in the inset are indistinguishable from the analytical results (bold line), Eq. (4.7a). The results correspond to  $x_0 = 2kl = 200$  and  $d/l = 10^{-3}$ .

quantitative agreement with the statistical averages obtained from numerical solutions of the one-dimensional wave equation.

A one-dimensional version of the delta-slice model discussed in Sec. III B 1 is sketched in the inset of Fig. 3. Notice that in a 1D problem there are no evanescent modes.

The system of length  $L$  is constructed from “delta potentials”  $U_r(x) = u_r \delta(x - x_r)$  [recall that  $U_r(x)$  and  $u_r$  have dimensions of  $k^2$  and  $k$ , respectively], located at the positions

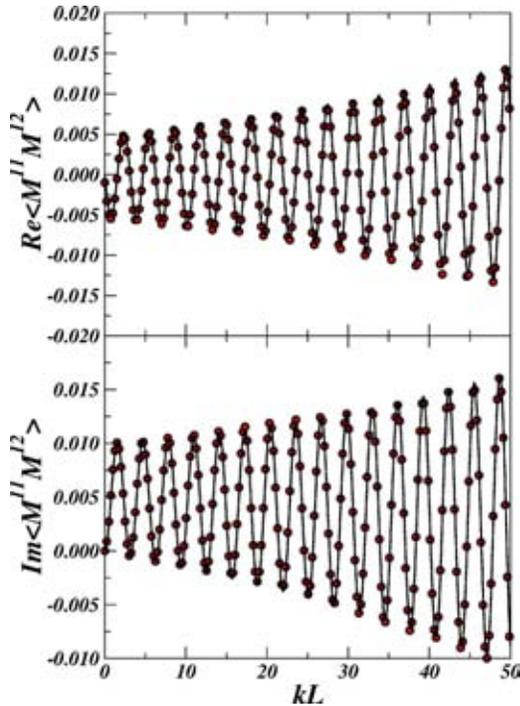


FIG. 4. (Color online) Real (top) and imaginary (bottom) parts of  $\langle M^{11} M^{12} \rangle = \langle \alpha \beta \rangle$  as a function of  $kL$ . Numerical results (circles) are indistinguishable from the analytical results (bold line). The parameters are the same as in Fig. 3.

$x_r = rd$  ( $r=0, 1, 2, \dots$ );  $u_r$  is assumed to be uniformly distributed over the interval  $[-u_{\max}, +u_{\max}]$ . The mean free path, obtained from Eq. (3.36), is simply given by

$$\frac{d}{l} = \frac{1}{3} \left( \frac{u_{\max}}{2k} \right)^2. \quad (4.8)$$

The results of the numerical calculations for  $\langle \alpha \alpha^* \rangle$  and  $\langle \alpha \beta \rangle$  versus  $L$  are shown in Figs. 3 and 4, respectively. Averages were obtained from  $10^7$  different microscopic realizations. Numerical results are indistinguishable from the analytical solution of the diffusion equation [Eqs. (4.7a) and (4.7b)].

It will be interesting to see what these results reduce to in the SWLA discussed in Sec. III D above. In preparation for this, we first consider a fixed value of  $s = L/l$  and take  $x_0 = 2kl \gg 1$ . From Eq. (E8) one can expand the functions  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_s$ ,  $\langle \alpha \beta \rangle_s$  in powers of  $1/x_0$ ; in terms of the original variables  $k$ ,  $l$ , and  $L$  they take the form

$$\begin{aligned} \langle \alpha \alpha^* \rangle_s = & \frac{1}{2} (1 + e^{2(L/l)}) + \frac{2}{(2kl)^2} \left[ - \left( 1 + 2 \frac{L}{l} \right) e^{2(L/l)} \right. \\ & \left. + e^{-L/l} \frac{e^{2ikL} + e^{-2ikL}}{2} \right] + O \left( \frac{1}{kl} \right)^3, \end{aligned} \quad (4.9a)$$

$$\begin{aligned} \langle \alpha \beta \rangle_s = & \frac{i}{2kl} (e^{-L/l} - e^{2(L/l)} e^{-2ikL}) + \frac{2}{(2kl)^2} \left[ \frac{5 - 3 \frac{L}{l}}{4} e^{-L/l} \right. \\ & \left. - \left( e^{2(L/l)} e^{-2ikL} + \frac{1}{4} e^{-L/l} e^{-4ikL} \right) \right] + O \left( \frac{1}{kl} \right)^3. \end{aligned} \quad (4.9b)$$

The solutions (4.9) satisfy the differential equations (4.5) together with the initial conditions (4.6) to every order in the expansion in powers of  $1/2kl$ .

Notice that the ansatz made in Eq. (3.71) is verified explicitly in this example, with the result

$$\langle \alpha \alpha^* \rangle_s^{(0)} = \frac{1}{2} (1 + e^{2(L/l)}), \quad (4.10a)$$

$$\langle \alpha \beta \rangle_s^{(0)} = 0, \quad (4.10b)$$

which represents, in this particular case, the SWLA discussed in Sec. III D. The result (4.10a) agrees with what had been obtained earlier as a solution of the diffusion equation of Ref. [16] for  $N=1$ , also known as Melnikov’s equation. Notice that

$$\langle \beta \beta^* \rangle_s^{(0)} = \langle \alpha \alpha^* \rangle_s^{(0)} - 1 = \left\langle \frac{R}{T} \right\rangle_s^{(0)} = \frac{1}{2} (e^{2(L/l)} - 1) \quad (4.11)$$

represents the well known exponential increase of Landauer’s resistance [35].

If, in Eq. (4.9), we further expand the exponentials  $e^{2L/l}$ ,  $e^{-L/l}$ , in powers of  $1/l$ , we end up with an expansion of  $\langle \alpha \alpha^* \rangle_s$ ,  $\langle \alpha \beta \rangle_s$  in powers of  $1/l$ . The result found in Eq.

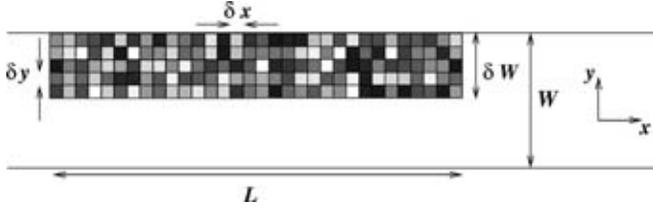


FIG. 5. Schematic representation of the microscopic model based on random potentials. Each square of the plot, or “cell,” represents a region of constant random potential.

(3.50), setting  $L=0$  and interpreting  $\delta L$  as  $L$ , is precisely the term proportional to  $1/l$  in such an expansion; we have verified the consistency of the two results up to  $O(1/l)$ .

### B. Random walk in the transfer matrix space: Numerical simulations

As we have shown, the diffusion equation (3.56) determines the statistical properties of transport for any physical observable and it only depends on the mean free paths  $l_{ab}$ . Once the various  $l_{ab}$  are specified, the statistical distributions are universal, i.e., independent of other details of the microscopic statistics. However, in order to know the exact shape of the distribution of a given observable we have to solve the diffusion equation. This is a challenging problem even in the isotropic case [16] (where all the MFP’s are equivalent,  $l_{ab} = l$ ). Here, instead of a direct solution of the multidimensional diffusion equation we have followed an alternative way that can be seen as a generalization of a random walk in the transfer matrix space (Ref. [36]). The method, based on our previous theoretical description, can be summarized as follows.

(1) We first obtain a set of mean free paths from a given microscopic potential model for the building block or, eventually, from specific experiments on very thin slabs.

(2) We generate an ensemble of transfer matrices having their first and second moments equal to those corresponding to a BB of a certain length  $\delta L$ .

(3) The transfer matrix for a system of length  $L = P\delta L$  is obtained by combining  $P$  building-block matrices randomly chosen from the ensemble. This procedure can be repeated again and again in order to obtain the statistical distribution of any physical quantity. As predicted by the CLT associated with the composition of BB’s explained in Appendix G of Ref. [29], higher order moments of the BB matrix elements play no role in the final statistics.

The statistical distributions of different physical quantities will be shown to be in full agreement with the results of exact microscopic numerical calculations for a model system. This shows that validity of the diffusion equation given in Eq. (3.56) goes beyond the various formal limits discussed in Sec. III.

#### 1. Microscopic potential model and mean free paths

Let us consider the potential model sketched in Fig. 5. In this model, a 2D waveguide with perfectly reflecting walls has a region of length  $L$  which is divided into small “cells” of dimensions  $\delta x \times \delta y$ . The working wavelength is chosen to

be such that  $\delta x, \delta y \ll \lambda$ . In the language of Sec. III A, the potential in the  $r$ th slice, Eq. (3.9), is replaced here, for finite  $\delta x$ , by

$$U_r(x, y) = u_r(y) \frac{\theta_{\delta x}(x - x_r)}{\delta x}, \quad (4.12)$$

where  $\theta_{\delta x}(x - x_r)$  takes the value 1 inside the interval  $(x_r - \delta x/2, x_r + \delta x/2)$  and 0 outside. Should  $\delta x$  tend to zero, the expression in Eq. (4.12) would tend to that of Eq. (3.9a). Inside the  $r$ th slice, the potential is taken to be constant within each cell, i.e.,

$$u_r(y) = \sum_s u_s \theta_{\delta y}(y - y_r), \quad (4.13)$$

so that

$$U_r(x, y) = \sum_s U_s \theta_{\delta x}(x - x_r) \theta_{\delta y}(y - y_r), \quad (4.14)$$

with  $U_s = u_s / \delta x$ . The constant values  $U_s$  of the potential inside each cell located in the region  $W - \delta W < y < W$  is sampled from a uniform distribution within the interval  $[-U_0, U_0]$ . Outside the region defined by  $W - \delta W < y < W$ , the potential is taken to be zero.

In order to get the mfp’s corresponding to our model system, we follow the same steps leading to Eq. (3.36) in Sec. III above. In the limit  $\delta x, \delta y \ll \delta W$ , and neglecting the coupling to evanescent modes, i.e., using the “bare” potential  $u$  instead of the “effective” one  $\hat{u}$  [see text following Eq. (3.16) and Appendix B], we obtain

$$\frac{1}{l_{ab}} = \frac{\langle [v_{ab}]^2 \rangle}{\delta x} = \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a k_b} \int_{W-\delta W}^W \chi_a^2(y) \chi_b^2(y) dy, \quad (4.15)$$

where  $\chi_a(y)$  are the transverse eigenfunctions of the clean waveguide [Eq. (3.3)]. The MFP’s for bulk disordered systems, i.e., when the disordered potential covers the whole section of the waveguide ( $\delta W = W$ ) are simply given by

$$\frac{1}{l_{ab}} \Big|_{\text{bulk}} = \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a k_b} \frac{2 + \delta_{ab}}{2W}. \quad (4.16)$$

In order to analyze a surface disordered waveguide, we shall also consider the limit  $\delta W \ll W$ ,

$$\frac{1}{l_{ab}} \Big|_{\text{surface}} = \frac{U_0^2}{3} \frac{\delta x \delta y}{4k_a k_b} \left( \frac{4\pi^4}{W^2} a^2 b^2 \delta W \right). \quad (4.17)$$

#### 2. Random transfer matrices for a building block

In order to generate an ensemble of random transfer matrices whose first and second moments are given, it is useful to describe the transfer matrix elements of the BB as a function of the  $2N^2 + N$  independent parameters of the Pereyra representation (see Ref. [33]). The matrix  $\varepsilon$  of Eq. (3.25d) can be expressed (in that representation) as

$$\varepsilon^{11} = e^{ih} \sqrt{1 + \eta \eta^*} - 1, \quad (4.18a)$$

$$\varepsilon^{12} = e^{ih} \eta, \quad (4.18b)$$

where  $h$  is an arbitrary  $N \times N$  Hermitian matrix (thus contributing  $N^2$  parameters) and  $\eta$  is an arbitrary  $N \times N$  complex symmetric matrix (thus contributing  $N^2 + N$  parameters).

Applying successive approximations to Eqs. (4.18) it is possible to invert them to express the matrices  $h$  and  $\eta$  as functions of the blocks  $\varepsilon^{ij}$ , i.e.,

$$h = -i\varepsilon^{11} + \frac{i}{2}(\varepsilon^{12}\varepsilon^{21} + \varepsilon^{11}\varepsilon^{11}) + O(\varepsilon^3), \quad (4.19a)$$

$$\eta = \varepsilon^{12} - \varepsilon^{11}\varepsilon^{12} + O(\varepsilon^3). \quad (4.19b)$$

The aim is to derive the statistical properties of the matrices  $h$  and  $\eta$  in terms of those of the blocks  $\varepsilon^{ij}$  which we derived in the previous section; we shall do this in the SWLA (see Sec. III D). We can use Eqs. (4.19), (3.69), and (3.70) to obtain (in powers of  $\delta L$ ) the first and second moments of the matrix elements  $\eta_{ab}$ ,  $h_{ab}$ . For the first moments we obtain

$$\langle h_{ab} \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad (4.20a)$$

$$\langle \eta_{ab} \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad (4.20b)$$

and for the second moments

$$\begin{aligned} \langle h_{ab} h_{cd} \rangle_{\delta L} &= -\langle \varepsilon_{ab}^{11} \varepsilon_{cd}^{11} \rangle_{\delta L} + \dots = \frac{\delta L}{1 + \delta_{ac}} \left[ \delta_{ab} \delta_{cd} \frac{C(aa, cc)}{\sqrt{l_{aa} l_{cc}}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta_{ad} \delta_{bc}}{l_{ab}} \right] + O(\delta L)^2, \end{aligned} \quad (4.21a)$$

$$\begin{aligned} \langle h_{ab} h_{cd}^* \rangle_{\delta L} &= -\langle \varepsilon_{ab}^{11} \varepsilon_{cd}^{22} \rangle_{\delta L} + \dots = \frac{\delta L}{1 + \delta_{ad}} \left[ \delta_{ab} \delta_{cd} \frac{C(aa, cc)}{\sqrt{l_{aa} l_{cc}}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta_{ac} \delta_{bd}}{l_{ab}} \right] + O(\delta L)^2, \end{aligned} \quad (4.21b)$$

$$\langle h_{ab} \eta_{cd} \rangle_{\delta L} = -i \langle \varepsilon_{ab}^{11} \varepsilon_{cd}^{12} \rangle_{\delta L} + \dots = O(\delta L)^2, \quad (4.21c)$$

$$\langle h_{ab} \eta_{cd}^* \rangle_{\delta L} = -i \langle \varepsilon_{ab}^{11} \varepsilon_{cd}^{21} \rangle_{\delta L} + \dots = O(\delta L)^2, \quad (4.21d)$$

$$\langle \eta_{ab} \eta_{cd} \rangle_{\delta L} = \langle \varepsilon_{ab}^{12} \varepsilon_{cd}^{12} \rangle_{\delta L} + \dots = O(\delta L)^2, \quad (4.21e)$$

$$\langle \eta_{ab} \eta_{cd}^* \rangle_{\delta L} = \langle \varepsilon_{ab}^{12} \varepsilon_{cd}^{21} \rangle_{\delta L} + \dots = \frac{\delta_{ac} \delta_{bd} + \delta_{ad} \delta_{bc}}{1 + \delta_{ab}} \frac{\delta L}{l_{ab}} + O(\delta L)^2. \quad (4.21f)$$

To generate the ensemble of random transfer matrices for  $\eta$  and  $h$  in the SWLA, we need to know the statistical properties of the real and imaginary parts of the matrix elements  $\eta_{ab}$  and  $h_{ab}$ , to be denoted as

$$\begin{aligned} \eta_{ab}^R &\equiv \text{Re } \eta_{ab} = \frac{1}{2}(\eta_{ab} + \eta_{ab}^*), \\ \eta_{ab}^I &\equiv \text{Im } \eta_{ab} = \frac{1}{2i}(\eta_{ab} - \eta_{ab}^*), \end{aligned} \quad (4.22a)$$

$$h_{ab}^R \equiv \text{Re } h_{ab} = \frac{1}{2}(h_{ab} + h_{ab}^*), \quad h_{ab}^I \equiv \text{Im } h_{ab} = \frac{1}{2i}(h_{ab} - h_{ab}^*). \quad (4.22b)$$

Using Eqs. (4.20) and (4.21) we find

$$\langle (\eta_{ab}^R)^2 \rangle_{\delta L} = \langle (\eta_{ab}^I)^2 \rangle_{\delta L} = \frac{\delta L}{2l_{ab}} + O(\delta L)^2, \quad \forall a, b, \quad (4.23a)$$

$$\langle (h_{ab}^R)^2 \rangle_{\delta L} = \langle (h_{ab}^I)^2 \rangle_{\delta L} = \frac{\delta L}{2l_{ab}} + O(\delta L)^2, \quad a \neq b, \quad (4.23b)$$

$$\langle (h_{aa})^2 \rangle_{\delta L} = \frac{\delta L}{l_{aa}} + O(\delta L)^2, \quad (4.23c)$$

$$\langle h_{aa} h_{bb} \rangle_{\delta L} = \frac{C(aa, bb)}{\sqrt{l_{aa} l_{bb}}} \delta L + O(\delta L)^2, \quad (4.23d)$$

$$\begin{aligned} \langle h_{ab}^R h_{cd}^R \rangle_{\delta L} &= \langle h_{ab}^I h_{cd}^I \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^R h_{cd}^I \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \\ a \neq b \neq c \neq d, \end{aligned} \quad (4.23e)$$

$$\langle h_{ab}^R h_{ad}^R \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^I h_{ad}^I \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^R h_{ad}^I \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad a \neq b \neq d, \quad (4.23f)$$

$$\langle h_{ab}^R \eta_{cd}^R \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^I \eta_{cd}^I \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^R \eta_{cd}^I \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^I \eta_{cd}^R \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad (4.23g)$$

$$\langle \eta_{ab}^R \eta_{cd}^I \rangle_{\delta L} = \langle h_{ab}^R h_{cd}^I \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad (4.23h)$$

$$\langle \eta_{ab}^R \eta_{cd}^R \rangle_{\delta L} = \langle \eta_{ab}^I \eta_{cd}^I \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad a \neq c, b \neq d, \quad (4.23i)$$

$$\langle \eta_{ab}^R \eta_{ad}^R \rangle_{\delta L} = \langle \eta_{ab}^I \eta_{ad}^I \rangle_{\delta L} = \langle \eta_{ab}^R \eta_{ad}^I \rangle_{\delta L} = O(\delta L)^2, \quad a \neq b \neq d. \quad (4.23j)$$

We recall that the diagonal elements  $h_{aa}$  are real since  $h$  is a Hermitian matrix.

From now on, to generate the ensemble we shall consider a potential which is delta correlated in the transverse direction; in that case we have

$$\frac{C(aa, bb)}{\sqrt{l_{aa} l_{bb}}} = \frac{1}{l_{ab}}, \quad (4.24)$$

which allows rewriting Eqs. (4.23c) and (4.23d) as one equation:

$$\langle h_{aa} h_{bb} \rangle_{\delta L} = \frac{\delta L}{l_{ab}} + O(\delta L)^2. \quad (4.25)$$

Therefore, in the SWLA, real and imaginary parts of the matrix elements of  $\eta$  and off-diagonal matrix elements of  $h$  are, to order  $\delta L$ , uncorrelated, with zero mean, Eq. (4.20),

and with variance  $\delta L/2l_{ab}$ , Eqs. (4.23a) and (4.23b). For these elements we have used two different distributions giving the same variances:

$$P_1(x) = \frac{1}{4\sqrt{3}\sigma} [\theta(x + \sqrt{3}\sigma) - \theta(x - \sqrt{3}\sigma)], \quad (4.26a)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}\delta(x - \sigma) + \frac{1}{2}\delta(x + \sigma), \quad (4.26b)$$

$\theta(x)$  being the usual step function and  $\sigma^2 = \text{var}(x)$ . As we can see from the CLT of Appendix G of Ref. [29], the final results only depend on the coefficients proportional to  $\delta L$ , while the rest of the details of the distributions do not play any role.

In contrast, the diagonal elements of the  $h$  matrices are correlated, Eq. (4.25). In order to generate numerically a set of uncorrelated variables from the diagonal elements of the  $h$  matrices we have performed an orthogonal transformation on the diagonal terms  $h_{aa}$ ,

$$h'_{aa} = \sum_b O_{ab} h_{bb}, \quad (4.27)$$

in such a way that the covariance matrix  $C_{ab} \equiv \langle h_{aa} h_{bb} \rangle = \delta L/l_{ab}$  is diagonalized, to obtain

$$\langle h'_{aa} h'_{bb} \rangle = \delta_{ab} \sigma_a^2. \quad (4.28)$$

Hence we can numerically generate a set of  $N$  uncorrelated variables  $h'_{aa}$  with zero mean and a variance given by the eigenvalues of the  $C_{ab} = \delta L/l_{ab}$  matrix and, after that, obtain, by the change of coordinates (4.27), the  $h_{aa}$  variables which are properly correlated.

### 3. Random walk in the transfer-matrix space: Statistical conductance distributions

Once we have numerically generated an ensemble of transfer matrices with its first and second moments correct up to order  $\delta L$ , we can obtain a transfer matrix corresponding to a system of length  $L = P\delta L$  by multiplying  $P$  transfer matrices of the ensemble of BB's taken at random. Numerically this procedure is unstable because the pseudounitary group, to which the transfer matrices belong, is noncompact [10]. This property leads to numerical instabilities as the norm of the transfer matrix elements can grow without limit. Instead of using the product of transfer matrices, we obtain the scattering matrix associated with each transfer matrix [Eqs. (A5)], and then combine different scattering matrices to obtain the scattering matrix for the system of length  $L$  [Eqs. (A16) of Ref. [29]].

For a given set of mean free paths  $l_{ab}$  we choose the length  $\delta L$  of the BB in such a way that  $\delta L/l_{ab} \ll 1$  for all channels. With this, we generate random transfer matrices as explained above and, for each one, we obtain the corresponding scattering matrix. Applying  $P$  times the Eqs. (A16) of Ref. [29] we obtain the scattering matrix corresponding to a system of length  $L = P\delta L$ . This procedure can be repeated as many times as needed to obtain the desired statistical properties.

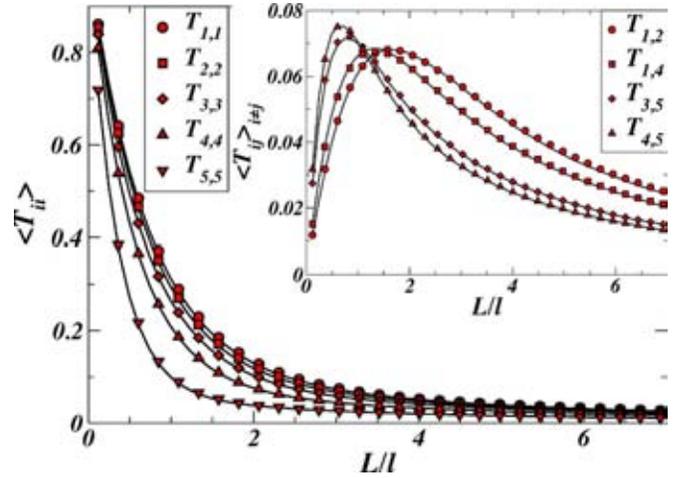


FIG. 6. (Color online) Bulk disordered waveguides. Average transmittances  $\langle T_{ii} \rangle$  (channel in=channel out), as a function of  $L/l$ . The inset shows the equivalent results for  $\langle T_{ij} \rangle$  with  $i \neq j$  for a representative set of indices. The results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation; symbols) and the random walk simulation of the diffusion equation (bold line) in the SWLA overlap.

A detailed numerical analysis of the statistical properties is beyond the scope of the present work and will be discussed elsewhere. Here we just focus on the statistical distribution of the conductance and the intriguing discrepancies between surface and bulk disordered systems [23,24].

*a. Bulk disorder.* The behavior of the average transmittances  $\langle T_{ii} \rangle$  (channel in=channel out), for bulk disordered wires, is plotted in Fig. 6 as a function of  $L/l$ ,  $l$  being the averaged transport mean free path

$$\frac{1}{l} \equiv \frac{1}{N} \sum_{ab} \frac{1}{l_{ab}}. \quad (4.29)$$

The inset shows the equivalent results for  $\langle T_{ij} \rangle$  with  $i \neq j$ . The random-walk simulation was performed in the SWLA. We have also solved numerically the Schrödinger equation for the same model system (sketched in Fig. 5). We followed an implementation of the so-called generalized scattering matrix (GSM) method (see, for example, Ref. [30]). The first step consists in the calculation of the set of transverse eigenfunctions and the scattering matrix for each slice of length  $\delta x$ . The combination of two consecutive slices is done by mode matching at the interface. After that we combine scattering matrices to obtain the scattering matrix of the whole system. It is important to mention that this calculation is performed using both propagating and evanescent modes and hence, this method can be considered as exact. The statistical properties of any transport parameter obtained from  $10^5$  different realizations were found to converge for three evanescent modes. The calculations have been done starting from the set of mean free paths  $l_{ab}$  given by Eq. (4.16) for  $kW = 5.5\pi$  (corresponding to five propagating modes),  $U_0 W^2 = 100$  and  $\delta x/W = \delta y/W = 1/50$ . The exact numerical results

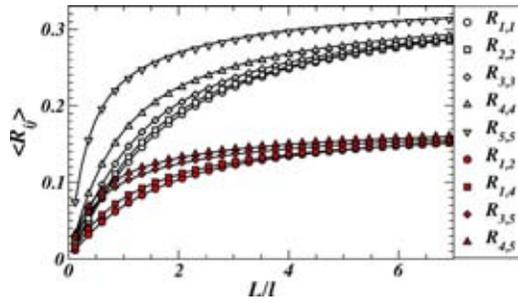


FIG. 7. (Color online) Bulk disordered waveguides. Average reflectance  $\langle R_{ij} \rangle$  as a function of  $L/l$ . The upper curves correspond to  $i=j$  (open symbols) and the lower curves to  $i \neq j$  (filled symbols) for a representative set of indices. The results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation) and the random walk simulation of the diffusion equation (bold line) in the SWLA overlap.

for the average transmission coefficients are indistinguishable from the random-walk simulations.

The random-walk results for the average reflection coefficients  $\langle R_{ij} \rangle$  for bulk disorder (shown in Fig. 7) are also in good agreement with our numerical results as well as with previous numerical work [37] (using a two-dimensional tight-binding model with Anderson disorder). The set of reflection coefficients corresponding to backscattering ( $\langle R_{ii} \rangle$ ) are consistent with an enhanced backscattering factor  $\langle R_{ii} \rangle / \langle R_{ij} \rangle \approx 2$ , as expected from the DMPK equation.

The distribution of the dimensionless conductance,  $P(g)$  [with  $g = \text{tr}(tt^\dagger)$ ], for bulk disordered wires is plotted in Fig. 8 for different conductance averages  $\langle g \rangle$ . The inset shows the average conductance as a function of  $L/l$ .

The exact numerical results for the conductance distribution (histogram lines in Fig. 8) are indistinguishable from the random walk simulations (open circles). For comparison we also plot (continuous line) the exact result of the diffusion equation of Ref. [16] (DMPK equation) obtained from a Monte Carlo simulation [23]. Despite the slight channel anisotropy of transport, the results are compatible with those of the DMPK equation.

*b. Surface disorder.* In the case of surface disorder, the mean free paths are very different from those obtained for a uniform (bulk) distribution of scatterers. In particular, the dependence of  $l_{ab}$  on  $a^2 b^2$  [see Eq. (4.17)] reflects the strong channel anisotropy of transport in surface disordered

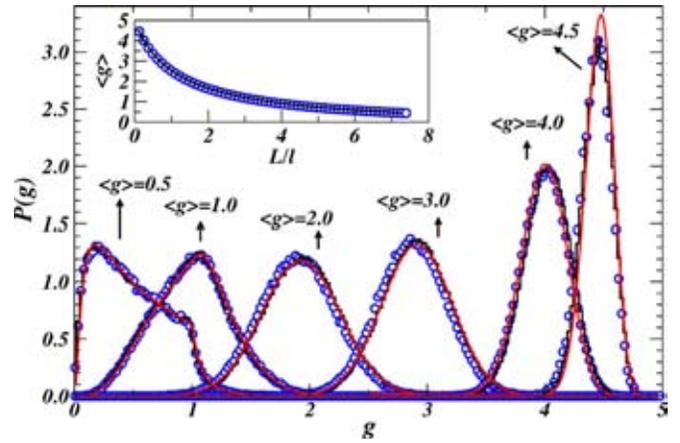


FIG. 8. (Color online) Bulk disordered waveguides. Distribution of the dimensionless conductance  $P(g)$  for different conductance averages  $\langle g \rangle$ . The three different curves based on different approaches overlap. Circles correspond to the random walk simulation of the diffusion equation in the SWLA. The continuous line represents the results of the Monte Carlo simulation of Ref. [23]. The histogram lines are the results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation). The inset shows the average conductance as a function of  $L/l$ .

waveguides [11,38–42]. This could be the origin of the differences between bulk and surface distributions. Previous numerical calculations for surface disordered waveguides, showed that close to the onset of localization, the conductance distributions presented an unexpected sharp cusplike shape [24]. The distribution of the dimensionless conductance for surface disordered wires obtained from the random walk simulation in the SWLA is plotted in Fig. 9 (open circles) for different conductance averages. The exact solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation; histograms) is again in full agreement with the diffusion equation and with previous numerical work [11,24]. The calculations have been done starting from the set of mean free paths  $l_{ab}$  given by Eq. (4.17) for  $\delta W = 0.1W$ ,  $U_0 = 100/W^2$ ,  $kW = 5.5\pi$  ( $N=5$ ),  $\delta x = 10\delta y = W/50$ .

It is worth noticing that when the disordered region is confined close to the surface, the mean free paths can be extremely large (for example, for the present calculation,  $l \approx 1.50 \times 10^4 W$ ). The exact numerical solution of the wave equation is then extremely expensive in terms of computation time compared to the random walk simulations based on the statistical properties of the BB.

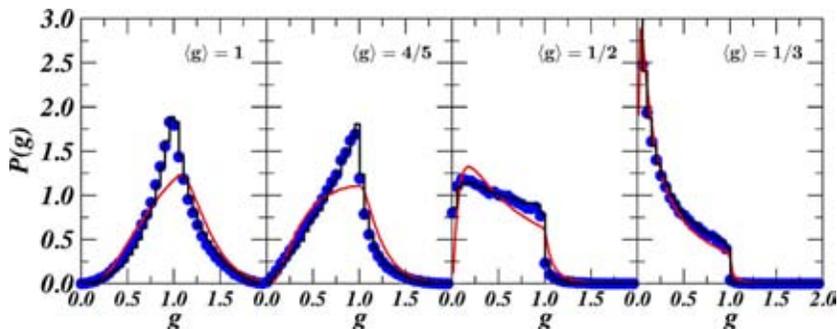


FIG. 9. (Color online) Surface disordered waveguides. Distribution of the dimensionless conductance  $P(g)$  for different conductance averages  $\langle g \rangle$ . Circles correspond to the random walk simulation of the diffusion equation in the SWLA. The histogram lines are the results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation). The equivalent results for bulk disorder (continuous line, DMPK) are also shown for comparison.

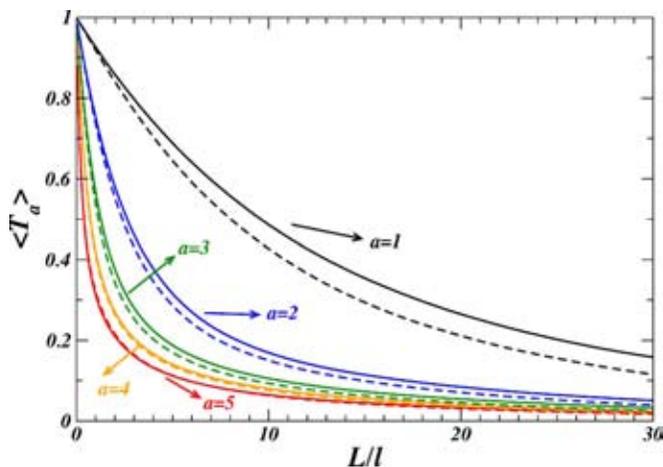


FIG. 10. (Color online) Surface disordered waveguides. Average transmittances  $\langle T_a \rangle$  as a function of  $L/l$ . The agreement between results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation; continuous lines) and the random walk simulation of the diffusion equation in the SWLA (dashed lines) is not as good as for the conductance distributions.

Although the random walk in the SWLA accurately reproduces the exact conductance distributions, it is not in full agreement with the statistical properties of the different transmittances. As an example, Fig. 10 shows the behavior of  $\langle T_a \rangle = \sum_b \langle T_{ba} \rangle$  versus  $L/l$  for both the exact numerical results (continuous lines) and the random walk (dashed lines). The disagreement could be associated to the use of an approximate expression (4.17) for the mean free paths. For small lengths compared to the mean free paths, the average reflectance is given by [see also Eq. (3.34)]

$$\langle R_{ab} \rangle = \frac{L}{l_{ab}} + \dots \quad (4.30)$$

We could then have obtained the different mean free paths  $l_{ab}$  for all modes by performing a linear fitting of the numerical results to Eq. (4.30). However, as long as the energy is not very close to the onset of new propagating channels, we found that the numerical MFP's are well described by Eqs. (4.16) and (4.17) within the numerical accuracy. The discrepancy could then be associated to the limitations of the SWLA. The generalization of the random walk method beyond the SWLA is in progress.

In summary, we have implemented a numerical method to obtain the statistical properties of the transport coefficients using the diffusion equation derived in this work. We have extensive numerical evidence of the suitability of our model to describe the statistics of wave transport in disordered waveguides. It is worth noticing that our model exactly reproduces the conductance distributions obtained from the microscopic model even though this one contains as many evanescent modes as needed to perform the calculation in an exact manner. The only parameters needed to obtain the statistics of any transport coefficient are the mean free paths  $l_{ab}$ ,

as it is implied by the diffusion equation, all the statistical properties being fixed at any length once all  $l_{ab}$  parameters are fixed.

### V. CONCLUSIONS AND DISCUSSION

The central result of the present paper is the Fokker-Planck equation, (2.10), which describes the evolution with the length  $L$  of a disordered waveguide of transport properties which can be expressed in terms of the transfer matrix  $\mathbf{M}$  of the system. Our starting point is a potential model in which the scattering units consist of thin potential slices (taken as delta slices for convenience) perpendicular to the longitudinal direction of the waveguide, the variation of the potential in the transverse direction being arbitrary. A statistical law for the potential slices is specified, as detailed in Sec. III B 1: in particular, the parameters of a given slice are taken to be statistically independent from those of any other slice, so that we are dealing here with the situation of uncorrelated (at least in the longitudinal direction) disorder. Our result is obtained in the so called dense-weak-scattering limit, denoted by DWSL in the text, in which each potential slice is very weak and the linear density of slices is very large, so that the resulting mean free paths (MFP's) are fixed [see Eq. (3.39)]. The statistical properties of a building block (denoted by BB) of length  $\delta L$ , say, are first derived; the BB is then added to a waveguide of length  $L$  to obtain a composition law, from which the diffusion equation is eventually derived. In the DWSL, the statistical properties of the BB, and hence of the full system, depend only on the MFP's which, in turn, depend only on the second moments of the individual delta-potential strengths. Cumulants of the potential higher than the second are irrelevant in the limit, signaling the existence of a generalized central-limit theorem (CLT): once the MFP's are specified, the limiting equation (2.10) is universal, i.e., independent of other details of the microscopic statistics. One important characteristic of the present analysis, compared with previous ones, is that the energy of the incident particle is fully taken into account, a consequence being that the generalized diffusion coefficients appearing in the diffusion equation (2.10) depend on the wavenumber  $k$  of the incident wave and on the length  $L$ .

The diffusion equation (2.10) for expectation values is very difficult to solve, the main reason being explained in the text, right below Eq. (4.6). The original DMPK equation [16] for the probability distribution of certain parameters of the transfer matrix was solved exactly for the unitary symmetry class only [43], whereas for the evolution of expectation values arising from that same equation for a large number of open channels  $N \gg 1$ , an iterative procedure was developed to find the result as an expansion in powers of  $1/N$  [10]. In the present case, in Sec. IV A we have been able to solve Eq. (2.10) exactly for  $N=1$ , but only for a few particular observables: the solution is in excellent agreement with the results of a microscopic calculation. However, not even for  $N \gg 1$  have we been able to develop an analytic iterative procedure like the one we mentioned above; even numerically we have not succeeded in developing a method to solve Eq. (2.10). We have thus tackled the problem of extracting information

from the analysis of the present paper from a different point of view, based on the study of the BB itself, which was shown to have universal statistical properties. First, we should remark that the BB is useful not only as an intermediate step to obtain the diffusion equation; it is interesting as a physical system in itself, i.e., a slab. In the paper we obtained its statistical properties up to order  $\delta L$  only, with some extension to order  $(\delta L)^2$ . In principle, although it represents a tedious task, the procedure could be carried on to at least a few more powers of  $\delta L$ . A similar expansion was performed in an earlier publication [25]. Second, the BB was used in Sec. IV B to develop the method that we called “random walk in the transfer matrix space,” which was essential for the numerical analysis based on the results of the present work. The results reported in that section showed excellent agreement with the corresponding microscopic calculations. Efforts towards an analytical and/or numerical treatment of the diffusion equation (2.10) itself would be very important.

In Sec. III D we develop the short-wavelength approximation, denoted as SWLA in the text, which bears resemblance to the geometrical optics limit studied in optics. The results of this approximation allow us to make a connection with some of our previous work, in which the energy did not appear explicitly in the analysis. We should remark that the numerical results of the random walk in the transfer matrix space reported in Sec. IV B were performed within this approximation.

In the analysis presented in this paper, the presence of evanescent modes for a single slice appears in the effective potential  $(\hat{u}_r)_{ab}$  that occurs in Eq. (3.16) and is used to construct the open-channel transfer matrix; the effective potential takes into account transitions to evanescent modes. Our statistical law is thus postulated for the matrix elements of the effective potential. However, as we mentioned in Sec. II around Eq. (2.2) and in Sec. IV B 3, the transfer matrix for a sequence of scatterers was constructed multiplying open-channel transfer matrices, i.e., ignoring the presence of evanescent modes in the combination law. Nonetheless, the final agreement with microscopic calculations is very good. An important question for future investigation is thus to understand the effect of evanescent modes when combining subsystems to form the whole waveguide.

In the potential model developed here the property of time-reversal invariance is satisfied and the treatment is also restricted to scalar waves. In the language of random-matrix theory, we are dealing with the orthogonal symmetry class, or  $\beta=1$ . For possible applications to electronic systems, it would be interesting to extend the analysis to the unitary and symplectic cases,  $\beta=2$  and  $\beta=4$ , respectively.

As explained in the Introduction, in earlier publications (such as Refs. [10,16]) the notion of maximum entropy in conjunction with a number of physical constraints played an important role in selecting the distribution of the BB: in a way, that selection captured the features arising from a CLT. We think that it would be very interesting to investigate the question whether the results presented here can be obtained within such a framework. Finally, since the results of our model have been compared successfully only with microscopic computer simulations, we think that it would be very challenging to measure these same quantities in the labora-

tory, in order to make comparisons with real-life experiments.

## ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank A. García-Martín, P. García-Mochales, N. Kumar and P. A. Serena for interesting discussions. This work was supported by the Spanish MCyT (Grant No. BFM2003-01167) and the EU Integrated Project “Molecular Imaging” (Contract No. LSHG-CT-2003-503259). P.A.M. acknowledges Conacyt support through Contract No. 42655. M.Y. also thanks Conacyt for its support through Grant No. 179710. We are also grateful to the Max Planck Institut für Physik Komplexer Systeme in Dresden, for supporting a long-term visit of P.A.M. and a short one of L.S.F.P. and J.J.S., during which important progress on this paper was achieved.

## APPENDIX A: SOME PROPERTIES OF THE TRANSFER MATRIX

The  $N$ -dimensional blocks of the  $M$  matrix are related to the reflection and transmission matrices  $r, t$  for left incidence and  $r', t'$  for right incidence as

$$r = -\delta^{-1}\gamma, \quad t' = \delta^{-1} \quad (\text{A1a})$$

$$t = (\alpha^\dagger)^{-1}, \quad r' = \beta\delta^{-1}. \quad (\text{A1b})$$

The physical property of flux conservation (FC) requires the  $M$  matrix to satisfy the pseudounitariness condition

$$M^\dagger \Sigma_z M = \Sigma_z. \quad (\text{A2})$$

This is the only condition that  $M$  satisfies in the unitary, or  $\beta=2$ , case. If, in addition, the system is time-reversal invariant (TRI), i.e., in the orthogonal case  $\beta=1$ , we have the extra condition

$$M^* = \Sigma_x M \Sigma_x, \quad (\text{A3})$$

which implies

$$M^{22} = (M^{11})^*, \quad M^{21} = (M^{12})^*, \quad (\text{A4})$$

so that in Eq. (2.1) only the two blocks  $M^{11}$  and  $M^{12}$ , or  $\alpha$  and  $\beta$ , need be considered. The relation with the reflection and transmission matrices is now

$$r = -(\alpha^*)^{-1}\beta^*, \quad t' = (\alpha^*)^{-1}, \quad (\text{A5a})$$

$$t = (\alpha^\dagger)^{-1}, \quad r' = \beta(\alpha^*)^{-1}. \quad (\text{A5b})$$

If the system is time-reversal invariant the matrix  $\varepsilon$  for the BB, defined in Eq. (2.4), must satisfy the relations

$$\varepsilon^* = \Sigma_x \varepsilon \Sigma_x, \quad (\text{A6})$$

so that

$$\varepsilon^{21} = (\varepsilon^{12})^*, \quad (\text{A7a})$$

$$\varepsilon^{22} = (\varepsilon^{11})^*. \quad (\text{A7b})$$

Introducing the notation

$$\bar{1} = 2, \quad \bar{2} = 1, \quad (\text{A8})$$

the TRI relations (A7b) can be written as

$$\varepsilon_{ab}^{\bar{i}\bar{j}} = (\varepsilon_{ab}^{ij})^*. \quad (\text{A9})$$

## APPENDIX B: EVANESCENT MODES AND THE EFFECTIVE POTENTIAL

In this appendix we define the effective potential for a delta slice that was introduced in Eqs. (3.14) and (3.16). Consider a problem admitting  $N$  open channels and  $N'$  closed ones. We shall eventually be interested in the limit  $N' \rightarrow \infty$ . The total number of channels will be denoted by  $N_T = N + N'$ . It will be convenient to define projection operators  $P$  and  $Q$  (with  $P + Q = I$ ) unto open and closed channels, respectively, i.e.,

$$P = \sum_{a=1}^N |\chi_a\rangle\langle\chi_a|, \quad (\text{B1a})$$

$$Q = \sum_{a=N+1}^{N_T} |\chi_a\rangle\langle\chi_a|, \quad (\text{B1b})$$

where  $|\chi_a\rangle$  represents the “transverse” state defined in Eq. (3.3). The most general solution of the Schrödinger equation on either side of the scattering system contains the following:

(i) Incoming- and outgoing-wave amplitudes for all the open channels. We denote by  $\tilde{a}_P^{(1)}, \tilde{a}_P^{(2)}$  the  $N$ -component vectors of incoming open-channel amplitudes on the left and right of the system, respectively, while  $\tilde{b}_P^{(1)}, \tilde{b}_P^{(2)}$  denote the corresponding outgoing open-channel amplitudes.

(ii) “Outgoing” closed-channel amplitudes, denoted by the  $N'$ -component vectors  $\tilde{b}_Q^{(1)}, \tilde{b}_Q^{(2)}$ , on the left and right of the system, respectively: these are the components that decrease exponentially at infinity. The  $N'$ -component vectors  $\tilde{a}_Q^{(1)}, \tilde{a}_Q^{(2)}$  represent the “incoming” closed-channel amplitudes, i.e., the components that increase exponentially at infinity. In order to have a normalizable (in the Dirac delta-function sense) wave function, closed channels can only give an exponentially vanishing contribution at infinity, so that the components  $\tilde{a}_Q^{(1)}, \tilde{a}_Q^{(2)}$ , which we keep for convenience in the following equation, will eventually be set equal to zero. We shall also use the notation  $\tilde{\alpha}_{PP} \equiv P\alpha P$ , etc. The wave amplitudes on the two sides are then related by the “extended transfer matrix” [10] as follows:

$$\begin{bmatrix} \tilde{b}_P^{(2)} \\ \tilde{b}_Q^{(2)} \\ \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_{PP} & \tilde{\alpha}_{PQ} & \tilde{\gamma}_{PP} & \tilde{\gamma}_{PQ} \\ \tilde{\alpha}_{QP} & \tilde{\alpha}_{QQ} & \tilde{\gamma}_{QP} & \tilde{\gamma}_{QQ} \\ \tilde{\beta}_{PP} & \tilde{\beta}_{PQ} & \tilde{\delta}_{PP} & \tilde{\delta}_{PQ} \\ \tilde{\beta}_{QP} & \tilde{\beta}_{QQ} & \tilde{\delta}_{QP} & \tilde{\delta}_{QQ} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{a}_P^{(1)} \\ \tilde{a}_Q^{(1)} \\ \tilde{b}_P^{(1)} \\ \tilde{b}_Q^{(1)} \end{bmatrix}. \quad (\text{B2})$$

Here we are using the notation of Ref. [10], which was developed in terms of incoming- and outgoing-wave amplitudes, both for the  $S$  matrix and for the  $M$  matrix. This re-

sults in an asymmetry in the notation in the two vectors appearing in Eq. (B2). Perhaps a more common notation expresses the  $M$  matrix in terms of waves that travel to the right and to the left, giving a more symmetric definition.

The extended transfer matrix of Eq. (B2), which will be denoted by  $\tilde{M}$ , contains four  $N_T \times N_T$  matrix blocks. When we set, as we already mentioned, the amplitudes  $a_Q^{(1)} = a_Q^{(2)} = 0$  and consider, as given data, the  $2N$  amplitudes  $a_P^{(1)}, b_P^{(1)}, a_P^{(2)}, b_P^{(2)}, a_Q^{(1)}, b_Q^{(1)}, a_Q^{(2)}, b_Q^{(2)}$ .

The “open-channel transfer matrix” of Eq. (2.1), that relates the open-channel amplitudes on the two sides as

$$\begin{bmatrix} b_P^{(2)} \\ a_P^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_P^{(1)} \\ b_P^{(1)} \end{bmatrix}, \quad (\text{B3})$$

can be obtained from the extended transfer matrix of Eq. (B2) by eliminating the closed-channel amplitudes  $b_Q^{(1)}, b_Q^{(2)}$ , to obtain the four  $N \times N$  blocks

$$\alpha = \tilde{\alpha}_{PP} - \tilde{\beta}_{PQ} \frac{1}{\tilde{\delta}_{QQ}} \tilde{\gamma}_{QP}, \quad (\text{B4a})$$

$$\beta = \tilde{\beta}_{PP} - \tilde{\beta}_{PQ} \frac{1}{\tilde{\delta}_{QQ}} \tilde{\delta}_{QP}, \quad (\text{B4b})$$

$$\gamma = \tilde{\gamma}_{PP} - \tilde{\delta}_{PQ} \frac{1}{\tilde{\delta}_{QQ}} \tilde{\gamma}_{QP}, \quad (\text{B4c})$$

$$\delta = \tilde{\delta}_{PP} - \tilde{\delta}_{PQ} \frac{1}{\tilde{\delta}_{QQ}} \tilde{\delta}_{QP}. \quad (\text{B4d})$$

For a delta slice centered at  $x=0$  and described by the potential of Eq. (3.7), one finds the following extended transfer matrix:

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha} & \tilde{\beta} \\ \tilde{\beta}^* & \tilde{\alpha}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{N_T} + \frac{1}{2i} \frac{1}{\sqrt{K}} u \frac{1}{\sqrt{K}} & \frac{1}{2i} \frac{1}{\sqrt{K}} u \frac{1}{\sqrt{K}} \\ -\frac{1}{2i} \frac{1}{\sqrt{K}} u \frac{1}{\sqrt{K}} & I_{N_T} - \frac{1}{2i} \frac{1}{\sqrt{K}} u \frac{1}{\sqrt{K}} \end{bmatrix}. \quad (\text{B5})$$

In this equation,  $I_{N_T}$  denotes the  $N_T$ -dimensional unit matrix;  $u$  is the  $N_T \times N_T$  matrix constructed from the matrix elements  $u_{ab}$  of Eq. (3.7b);  $K$  is the diagonal  $N_T \times N_T$  matrix  $K_{ab} = k_a \delta_{ab}$ ; for open channels ( $a=1, \dots, N$ ),  $k_a$  is defined as the real positive square root of the RHS of Eq. (3.12); for closed channels ( $a=N+1, \dots, N_T$ ), we define  $k_a = i\kappa_a$ ,  $\kappa_a$  being real and positive. It will be convenient to write

$$K_{PP} \equiv k_P, \quad (\text{B6a})$$

$$K_{QQ} \equiv i\kappa_Q. \quad (\text{B6b})$$

Substituting the extended transfer matrix of Eq. (B5) into Eq. (B4) we find, for the blocks of the open-channel transfer matrix

$$\alpha = I_N + \frac{1}{2i} \frac{1}{\sqrt{k_P}} \hat{u}_{PP} \frac{1}{\sqrt{k_P}}, \quad (\text{B7a})$$

$$\beta = \frac{1}{2i} \frac{1}{\sqrt{k_P}} \hat{u}_{PP} \frac{1}{\sqrt{k_P}}, \quad (\text{B7b})$$

where  $\hat{u}_{PP}$  is the ‘‘effective potential’’ referred to in the text, Eq. (3.16), and defined as

$$\hat{u}_{PP} = u_{PP} - u_{PQ} \frac{1}{\sqrt{2\kappa_Q}} \frac{1}{I_{N'} + \frac{1}{\sqrt{2\kappa_Q}} u_{QQ} \frac{1}{\sqrt{2\kappa_Q}}} \frac{1}{\sqrt{2\kappa_Q}} u_{QP}. \quad (\text{B8})$$

For the present scattering problem associated with the potential of Eq. (3.7), the reflection and transmission amplitudes to open channels are to be obtained from Eq. (A5), where  $\alpha$  and  $\beta$  are given in Eq. (B7) in terms of the effective potential of Eq. (B8).

### APPENDIX C: THE FOURTH-ORDER TERM IN THE SECOND-MOMENT EXPANSION (3.31c)

We go back to the expression for the second moments of  $\varepsilon$  for the BB, Eq. (3.31). The terms in the line (3.31b) vanish, being third order in the individual  $[\varepsilon_r]_{ab}^{ij}$  and hence in the potentials  $(\hat{v}_r)_{ab}$  [see Eq. (3.20)]. The fourth-order terms are given in the line (3.31c): only the first of these three terms survives; in the other two there is no way to pair the scatterer indices so as to get a non-vanishing result (remember that the various  $\varepsilon_r$ 's are statistically independent and have zero average). For the nonvanishing term we have [see Eq. (3.14)]

$$\langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_{\substack{r>s \\ t>u}} \langle [\varepsilon_r \varepsilon_s]_{ab}^{ij} [\varepsilon_t \varepsilon_u]_{cd}^{hl} \rangle \quad (\text{C1a})$$

$$= \sum_{\substack{r>s \\ t>u}} \sum_{\alpha' \beta'} \langle (\hat{v}_r)_{\alpha\alpha'} (\hat{v}_s)_{\alpha'b} (\hat{v}_t)_{c\beta'} (\hat{v}_u)_{\beta'd} \rangle \times \sum_{\lambda' \mu'} [(\vartheta_r)_{\alpha\alpha'}^{\lambda'} (\vartheta_s)_{\alpha'b}^{\lambda'j} (\vartheta_t)_{c\beta'}^{h\mu'} (\vartheta_u)_{\beta'd}^{\mu'l}] \quad (\text{C1b})$$

$$= \sum_{r>s} \sum_{\alpha' \beta'} \langle (\hat{v}_r)_{\alpha\alpha'} (\hat{v}_r)_{c\beta'} \rangle \times \langle (\hat{v}_s)_{\alpha'b} (\hat{v}_s)_{\beta'd} \rangle \sum_{\lambda' \mu'} [(\vartheta_r)_{\alpha\alpha'}^{\lambda'} (\vartheta_s)_{\alpha'b}^{\lambda'j} (\vartheta_r)_{c\beta'}^{h\mu'} (\vartheta_s)_{\beta'd}^{\mu'l}] \quad (\text{C1c})$$

$$= \sum_{\alpha' \beta'} \frac{\mu_2^{(v)}(\alpha\alpha', c\beta')}{d} \frac{\mu_2^{(v)}(\alpha'b, \beta'd)}{d} \cdot \left\{ \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{r>s} [(\vartheta_r)_{\alpha\alpha'}^{\lambda'} (\vartheta_s)_{\alpha'b}^{\lambda'j} (\vartheta_r)_{c\beta'}^{h\mu'} (\vartheta_s)_{\beta'd}^{\mu'l}] d^2 \right\}. \quad (\text{C1d})$$

We now take the DWSL and find [see Eq. (3.33)]

$$\lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} = \sum_{\alpha' \beta'} \frac{C(\alpha\alpha', c\beta')}{\sqrt{l_{\alpha\alpha'}(k) l_{c\beta'}(k)}} \frac{C(\alpha'b, \beta'd)}{\sqrt{l_{\alpha'b}(k) l_{\beta'd}(k)}} \times \sum_{\lambda' \mu'} \Delta_{\alpha\alpha', \alpha'b, c\beta', \beta'd}^{\lambda' \lambda'j, h\mu', \mu'l} [k; \mathcal{R}(\delta L)], \quad (\text{C2})$$

in analogy with Eq. (3.46). We have defined

$$\Delta_{\alpha\alpha', \alpha'b, c\beta', \beta'd}^{\lambda' \lambda'j, h\mu', \mu'l} [k; \mathcal{R}(\delta L)] = \int \int_{\mathcal{R}(\delta L)} \vartheta_{\alpha\alpha'}^{\lambda'}(x) \vartheta_{\alpha'b}^{\lambda'j}(x') \vartheta_{c\beta'}^{h\mu'}(x) \vartheta_{\beta'd}^{\mu'l}(x') dx dx', \quad (\text{C3a})$$

$$= \frac{(-)^{i+h+\lambda'+\mu'}}{iK_2} \left[ \frac{\sin \frac{K_1+K_2}{2} \delta L}{\frac{K_1+K_2}{2}} - e^{-iK_2/2\delta L} \frac{\sin \frac{K_1 \delta L}{2}}{\frac{K_1}{2}} \right]. \quad (\text{C3b})$$

Here,  $\mathcal{R}(\delta L)$  denotes the region of integration  $\{x > x'\}$ , i.e., half a square of size  $\delta L$ . Eqs. (C3a) and (C3b) are analogous to the earlier definitions in Eqs. (3.41) and (3.42). Equation (C3b) is valid for  $K_1 \neq 0$  and  $K_2 \neq 0$ . The other possibilities are

$$\Delta_{\alpha\alpha', \alpha'b, c\beta', \beta'd}^{\lambda' \lambda'j, h\mu', \mu'l} [k; \mathcal{R}(\delta L)] = (-)^{i+h+\lambda'+\mu'} \frac{(\delta L)^2}{2}, \quad K_1 = K_2 = 0 \quad (\text{C3c})$$

$$= (-)^{i+h+\lambda'+\mu'} \frac{1}{iK_2} \left[ \frac{\sin \frac{K_2 \delta L}{2}}{\frac{K_2}{2}} - e^{-iK_2 \delta L/2} \delta L \right], \quad K_1 = 0, \quad K_2 \neq 0 \quad (\text{C3d})$$

$$= (-)^{i+h+\lambda'+\mu'} \frac{1}{iK_1} \left[ e^{iK_1 \delta L/2} \delta L - \frac{\sin \frac{K_1 \delta L}{2}}{\frac{K_1}{2}} \right], \quad K_1 \neq 0, \quad K_2 = 0. \quad (\text{C3e})$$

We have defined

$$K_1 = K_{\alpha\alpha', c\beta'}^{\lambda' \lambda'j, h\mu'}, \quad (\text{C4a})$$

$$K_2 = K_{\alpha'b, \beta'd}^{\lambda' \lambda'j, \mu'l}. \quad (\text{C4b})$$

We see from Eqs. (C3b)–(C3e), or directly from the integral definition (C3a), that in an expansion in powers of  $\delta L$ , the leading term is quadratic in  $\delta L$ , i.e.,

$$\Delta_{\alpha\alpha',\alpha'b,c\beta',\beta'd}^{i\lambda',\lambda'j,h\mu',\mu'l}[k;\mathcal{R}(\delta L)] = (-)^{i+h+\lambda'+\mu'} \frac{(\delta L)^2}{2} + \dots, \quad (\text{C5})$$

so that the leading term, in a similar expansion, of the fourth-order contribution to the second moments of  $\varepsilon$  in the DWSL, Eq. (C2), behaves as

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} &= \sum_{\alpha'\beta'} \frac{C(\alpha\alpha',c\beta')}{\sqrt{l_{\alpha\alpha'}(k)l_{c\beta'}(k)}} \\ &\times \frac{C(\alpha'b,\beta'd)}{\sqrt{l_{\alpha'b}(k)l_{\beta'd}(k)}} \sum_{\lambda'\mu'} (-)^{i+h+\lambda'+\mu'} \\ &\times \left[ \frac{(\delta L)^2}{2} + O(\delta L)^3 \right]. \end{aligned} \quad (\text{C6})$$

This is the result mentioned at the end of Sec. III B 2 b, right above Eq. (3.49).

In the above analysis, the BB lies in the interval  $(-\delta L/2, \delta L/2)$ . If it is shifted to the interval  $(L, L+\delta L)$ , Eq. (C2) is modified as

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{\delta L} &= \sum_{\alpha'\beta'} \frac{C(\alpha\alpha',c\beta')}{\sqrt{l_{\alpha\alpha'}(k)l_{c\beta'}(k)}} \frac{C(\alpha'b,\beta'd)}{\sqrt{l_{\alpha'b}(k)l_{\beta'd}(k)}} \\ &\times \sum_{\lambda'\mu'} \Delta_{\alpha\alpha',\alpha'b,c\beta',\beta'd}^{i\lambda',\lambda'j,h\mu',\mu'l}[k;\mathcal{R}(\delta L)] e^{i(K_1+K_2)(L+\delta L/2)}, \end{aligned} \quad (\text{C7})$$

in analogy with Eq. (3.50), while Eq. (C6) becomes

$$\begin{aligned} \lim_{\text{DWS}} \langle [\varepsilon^{(2)}]_{ab}^{ij} [\varepsilon^{(2)}]_{cd}^{hl} \rangle_{L,\delta L} &= \sum_{\alpha'\beta'} \frac{C(\alpha\alpha',c\beta')}{\sqrt{l_{\alpha\alpha'}(k)l_{c\beta'}(k)}} \frac{C(\alpha'b,\beta'd)}{\sqrt{l_{\alpha'b}(k)l_{\beta'd}(k)}} \\ &\times \sum_{\lambda'\mu'} (-)^{i+h+\lambda'+\mu'} \left[ e^{i(K_1+K_2)L} \frac{(\delta L)^2}{2} + O(\delta L)^3 \right]. \end{aligned} \quad (\text{C8})$$

#### APPENDIX D: ANALYSIS OF THE GENERAL TERM OCCURRING IN THE CALCULATION OF THE $p$ TH MOMENT OF $\varepsilon$ FOR THE BB

Equation (3.31) which gives the expansion of a second moment of  $\varepsilon$  in terms of the  $\varepsilon^{(\mu)}$ 's, and hence to various orders in the individual  $\varepsilon_r$ 's, can be generalized to an arbitrary  $p$ th moment as

$$\langle \varepsilon_{a_1 b_1}^{i_1 j_1} \dots \varepsilon_{a_p b_p}^{i_p j_p} \rangle_{\delta L} = \sum_{\mu_1, \dots, \mu_p}^m \langle [\varepsilon^{(\mu_1)}]_{a_1 b_1}^{i_1 j_1} \dots [\varepsilon^{(\mu_p)}]_{a_p b_p}^{i_p j_p} \rangle_{\delta L}. \quad (\text{D1})$$

In the analysis that follows the BB will be centered at the origin. The term under the summation sign in this last equation is of order  $\mu_1 + \dots + \mu_p$  in the individual  $[\varepsilon_r]_{ab}^{ij}$ 's, and hence of the same order in the potential matrix elements  $(\hat{v}_r)_{ab}$ 's; it survives only if it is of even order in these quantities, i.e., if  $\mu_1 + \dots + \mu_p = 2q$ , say.

Using, for convenience, a simplified notation for the indices, we express the term of order  $2q$  under the summation sign in Eq. (D1) as

$$\begin{aligned} \langle [\varepsilon^{(\mu_1)}]_{ab}^{ij} \dots [\varepsilon^{(\mu_p)}]_{ef}^{mn} \rangle_{\delta L} &= \sum_{\substack{r_1 > \dots > r_{\mu_1} \\ \dots \\ t_1 > \dots > t_{\mu_p}}} \langle [\varepsilon_{r_1} \dots \varepsilon_{r_{\mu_1}}]_{ab}^{ij} \dots [\varepsilon_{t_1} \dots \varepsilon_{t_{\mu_p}}]_{ef}^{mn} \rangle \\ &= \sum_{\substack{r_1, \dots, r_{\mu_1} \\ \dots \\ t_1, \dots, t_{\mu_p}}} \sum_{\substack{\alpha_1, \dots, \alpha_{\mu_1-1} \\ \dots \\ \gamma_1, \dots, \gamma_{\mu_p-1}}} \langle (\hat{v}_{r_1})_{a\alpha_1} \dots (\hat{v}_{r_{\mu_1}})_{\alpha_{\mu_1-1}b} \dots (\hat{v}_{t_1})_{e\gamma_1} \dots (\hat{v}_{t_{\mu_p}})_{\gamma_{\mu_p-1}f} \rangle \\ &\times \sum_{\substack{\lambda_1, \dots, \lambda_{\mu_1-1} \\ \dots \\ \nu_1, \dots, \nu_{\mu_p-1}}} [\vartheta_{r_1}^{\lambda_1}]_{a\alpha_1} \dots [\vartheta_{r_{\mu_1}}^{\lambda_{\mu_1-1}j}]_{\alpha_{\mu_1-1}b} \dots [\vartheta_{t_1}^{m\nu_1}]_{e\gamma_1} \dots [\vartheta_{t_{\mu_p}}^{\nu_{\mu_p-1}n}]_{\gamma_{\mu_p-1}f} \\ &\times h(r_1 - r_2) \dots h(r_{\mu_1-1} - r_{\mu_1}) \dots h(t_1 - t_2) \dots h(t_{\mu_p-1} - t_{\mu_p}) \\ &\equiv \sum_{\substack{\alpha_1, \dots, \alpha_{\mu_1-1} \\ \dots \\ \gamma_1, \dots, \gamma_{\mu_p-1}}} \sum_{\substack{\lambda_1, \dots, \lambda_{\mu_1-1} \\ \dots \\ \nu_1, \dots, \nu_{\mu_p-1}}} F_{a\alpha_1, \dots, \alpha_{\mu_1-1}b; \dots; e\gamma_1, \dots, \gamma_{\mu_p-1}f}^{i\lambda_1, \dots, \lambda_{\mu_1-1}j; \dots; m\nu_1, \dots, \nu_{\mu_p-1}n} \end{aligned} \quad (\text{D2})$$

We have introduced the step function  $h(r-s)$  ( $=1$  for  $r>s$  and  $=0$  for  $r\leq s$ ) to implement the correct range of summation of the scatterer indices. The function  $F$  defined in the last line can be read off from the equation itself; it has  $\mu_1 + \dots + \mu_p = 2q$  pairs of upper and lower indices and has the structure

$$F_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}} = \sum_{r_1, \dots, r_{2q}} \langle (\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} \dots (\hat{v}_{r_{2q}})_{a_{2q} b_{2q}} \rangle \times f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(r_1, \dots, r_{2q}), \quad (\text{D3})$$

where the function  $f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(r_1, \dots, r_{2q})$  is given by

$$f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(r_1, \dots, r_{2q}) = [\vartheta_{r_1}^{i_1 j_1} \dots \vartheta_{r_{2q}}^{i_{2q} j_{2q}}]_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}} \times \prod_{i=1}^{2q-1} h(r_i - r_{i+1}), \quad (\text{D4})$$

where the prime in the product sign means  $i \neq \mu_1, \mu_1 + \mu_2, \dots, \mu_1 + \dots + \mu_{p-1}$ . Two particular examples of the structure (D3) were already encountered earlier, in Eqs. (3.32b) and (C1b) above.

The expectation value appearing in Eq. (D3) can be written in terms of the cumulants of the various blocks of  $(\hat{v}_r)_{ab}$ 's into which one can partition the product  $(\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} \dots (\hat{v}_{r_{2q}})_{a_{2q} b_{2q}}$ . We first give a few examples, and then the general expression.

(i)  $q=1$ . One can write [see Eq. (3.21b)]

$$\langle (\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} (\hat{v}_{r_2})_{a_2 b_2} \rangle = \kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2) \delta_{r_1 r_2}, \quad (\text{D5})$$

where a second cumulant coincides with the corresponding second moment, i.e.,

$$\kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2) = \mu_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2), \quad (\text{D6})$$

due to the vanishing of the first moments [Eq. (3.21a)].

(ii) For  $q=2$  we have

$$\begin{aligned} \langle (\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} (\hat{v}_{r_2})_{a_2 b_2} (\hat{v}_{r_3})_{a_3 b_3} (\hat{v}_{r_4})_{a_4 b_4} \rangle \\ = [\kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2) \kappa_2^{(v)}(a_3 b_3, a_4 b_4) \delta_{r_1 r_2} \delta_{r_3 r_4} \\ + \kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_3 b_3) \kappa_2^{(v)}(a_2 b_2, a_4 b_4) \delta_{r_1 r_3} \delta_{r_2 r_4} \\ + \kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_4 b_4) \kappa_2^{(v)}(a_2 b_2, a_3 b_3) \delta_{r_1 r_4} \delta_{r_2 r_3}] \end{aligned} \quad (\text{D7a})$$

$$+ \kappa_4^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4) \delta_{r_1 r_2 r_3 r_4}, \quad (\text{D7b})$$

where a fourth cumulant is defined in the usual way, i.e.,

$$\begin{aligned} \kappa_4^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4) = \mu_4^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4) \\ - \mu_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2) \mu_2^{(v)}(a_3 b_3, a_4 b_4) \\ - \mu_2^{(v)}(a_1 b_1, a_3 b_3) \mu_2^{(v)}(a_2 b_2, a_4 b_4) \\ - \mu_2^{(v)}(a_1 b_1, a_4 b_4) \mu_2^{(v)}(a_2 b_2, a_3 b_3). \end{aligned} \quad (\text{D8})$$

In Eq. (D7), the three lines ending in (D7a) contain all possible pair contractions, i.e.,  $3!!=3$  terms altogether: this partition of four elements can be represented by the Young diagram

$$\begin{array}{c} \square \square \\ \square \square \end{array} \cdot \quad (\text{D9})$$

The last line (D7b) contains the only possible quartet (the Kronecker delta with more than two indices is defined to be nonzero only when all the indices are equal). It can be represented by the Young diagram

$$\square \square \square \square. \quad (\text{D10})$$

(iii) For  $q=3$  we have

$$\begin{aligned} \langle (\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} (\hat{v}_{r_2})_{a_2 b_2} (\hat{v}_{r_3})_{a_3 b_3} (\hat{v}_{r_4})_{a_4 b_4} (\hat{v}_{r_5})_{a_5 b_5} (\hat{v}_{r_6})_{a_6 b_6} \rangle \\ = [\kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2) \kappa_2^{(v)}(a_3 b_3, a_4 b_4) \\ \times \kappa_2^{(v)}(a_5 b_5, a_6 b_6) \delta_{r_1 r_2} \delta_{r_3 r_4} \delta_{r_5 r_6} \\ + \text{all possible combinations}] \end{aligned} \quad (\text{D11a})$$

$$\begin{aligned} + [\kappa_4^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4) \\ \times \kappa_2^{(v)}(a_5 b_5, a_6 b_6) \delta_{r_1 r_2 r_3 r_4} \delta_{r_5 r_6} \\ + \text{all possible combinations}] \end{aligned} \quad (\text{D11b})$$

$$+ \kappa_6^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4, a_5 b_5, a_6 b_6) \delta_{r_1 r_2 r_3 r_4 r_5 r_6}. \quad (\text{D11c})$$

The three lines ending in Eq. (D11a) of this last equation contain all possible pair contractions, i.e.,  $5!!=15$  terms altogether: this partition of 6 elements can be represented by the Young diagram:

$$\begin{array}{c} \square \square \\ \square \square \cdot \\ \square \square \end{array} \quad (\text{D12})$$

The two lines ending in Eq. (D11b) contain all possible combinations of one quartet plus one-pair contraction, i.e.,  $\binom{6}{2}=15$  terms altogether: this partition of six elements can be represented by the Young diagram

$$\begin{array}{c} \square \square \square \square \\ \square \square \end{array} \cdot \quad (\text{D13})$$

The last line (D11c) contains the only possible sextet. It can be represented by the Young diagram

$$\square \square \square \square \square \square. \quad (\text{D14})$$

It seems plausible that the particular examples given above can be generalized to arbitrary  $q$ , so that we can write  $F_{a_1, \dots, a_{2q}}^{i_1, \dots, i_{2q}}$  of Eq. (D3) as

$$F_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}} = \sum_{r_1, \dots, r_{2q}} \langle (\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} \cdots (\hat{v}_{r_{2q}})_{a_{2q} b_{2q}} \rangle \times f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(r_1, \dots, r_{2q}) \quad (\text{D15a})$$

$$= \sum_{r_1, \dots, r_{2q}} \{ [\kappa_2^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2) \cdots \times \kappa_2^{(v)}(a_{2q-1} b_{2q-1}, a_{2q} b_{2q}) \delta_{r_1 r_2} \cdots \delta_{r_{2q-1} r_{2q}} + \text{all possible combinations}] \quad (\text{D15b})$$

$$+ [\kappa_4^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4) \times \kappa_2^{(v)}(a_5 b_5, a_6 b_6) \cdots \kappa_2^{(v)}(a_{2q-1} b_{2q-1}, a_{2q} b_{2q}) \times \delta_{r_1 r_2 r_3 r_4} \delta_{r_5 r_6} \cdots \delta_{r_{2q-1} r_{2q}} + \text{all possible combinations}] \quad (\text{D15c})$$

$$+ \cdots + \kappa_{2q}^{(v)}(a_1 b_1, a_2 b_2, \dots, a_{2q} b_{2q}) \delta_{r_1 r_2 \cdots r_{2q}} \} \times f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(r_1, \dots, r_{2q}). \quad (\text{D15d})$$

Again, the partition of  $2q$  elements contained inside each square bracket can be represented by a Young diagram. The first square bracket ending in (D15b) contains all possible pair contractions, of which there are  $(2q-1)!!$  altogether.

Equation (D15) shows that we can write  $F_{a_1, \dots, b_{2q}}^{i_1, \dots, j_{2q}}$  [omitting, for simplicity, the lower and upper indices, as well as the index  $(v)$  in the cumulants] as

$$F = \left[ \frac{\kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2)}{d} \cdots \frac{\kappa_2(a_{2q-1} b_{2q-1}, a_{2q} b_{2q})}{d} \times \sum_{r_2 r_4 \cdots r_{2q}} f(r_2, r_2, \dots, r_{2q}, r_{2q}) d^q + \text{all possible combinations} \right] \quad (\text{D16a})$$

$$+ d \left[ \frac{\kappa_4(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4)}{d^2} \times \frac{\kappa_2(a_5 b_5, a_6 b_6)}{d} \cdots \frac{\kappa_2(a_{2q-1} b_{2q-1}, a_{2q} b_{2q})}{d} \times \sum_{r_4 r_6 \cdots r_{2q}} f(r_4, r_4, r_4, r_4, r_6, r_6, \dots, r_{2q}, r_{2q}) d^{q-1} + \text{all possible combinations} \right] \quad (\text{D16b})$$

$$+ \cdots + d^{q-1} \frac{\kappa_{2q}(a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q})}{d^q} \sum_{r_{2q}} f(r_{2q}, \dots, r_{2q}) d. \quad (\text{D16c})$$

The cumulants  $\kappa_{2t}$  appearing in Eq. (D16) are defined, for  $t=1, 2$ , in Eqs. (D6) and (D8), respectively.

At this point we take the DWSL defined by Eqs. (3.39). The various fractions  $\kappa_{2t}/d^t$  appearing in Eq. (D16) are finite

because of the scaling assumed in Eq. (3.40). Also, the various summations in Eq. (D16) tend to finite integrals, and all the terms with factors of  $d$  “left over,” i.e., from Eq. (D16b) up to (D16c), vanish. As a consequence, the cumulants  $\kappa_4, \dots, \kappa_{2q}$ , do not contribute in the DWSL: this is the central-limit theorem (CLT) that was discussed at the end of Sec. II, at the end of Sec. III B and in Sec. III C. The second cumulants  $\kappa_2$  enter through the various mfp’s, as we see from Eq. (3.36).

In the DWSL we thus write Eq. (D3) as

$$\lim_{\text{DWS}} \sum_{r_1, \dots, r_{2q}} \langle (\hat{v}_{r_1})_{a_1 b_1} \cdots (\hat{v}_{r_{2q}})_{a_{2q} b_{2q}} \rangle f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(r_1, \dots, r_{2q}) = \frac{C(a_1 b_1, a_2 b_2) \cdots C(a_{2q-1} b_{2q-1}, a_{2q} b_{2q})}{\sqrt{l_{a_1 b_1} l_{a_2 b_2} \cdots l_{a_{2q-1} b_{2q-1}} l_{a_{2q} b_{2q}}} \times \Delta_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}[k; \mathcal{R}(\delta L); 12, 34, \dots, 2q-1, 2q] + \text{all possible combinations.} \quad (\text{D17})$$

We have used Eq. (3.33) and we have defined

$$\Delta_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}[k; \mathcal{R}(\delta L); 12, \dots, 2q-1, 2q] = \int_{\delta L} \cdots \int_{\delta L} f_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}(x_2, x_2, \dots, x_{2q}, x_{2q}) dx_2 \cdots dx_{2q} = \int \cdots \int_{\mathcal{R} \subset (\delta L)^q} \vartheta_{a_1 b_1}^{i_1 j_1}(x_2) \vartheta_{a_2 b_2}^{i_2 j_2}(x_2) \cdots \vartheta_{a_{2q-1} b_{2q-1}}^{i_{2q-1} j_{2q-1}}(x_{2q}) \times \vartheta_{a_{2q} b_{2q}}^{i_{2q} j_{2q}}(x_{2q}) dx_2 \cdots dx_{2q}. \quad (\text{D18})$$

Here,  $\vartheta_{ab}^{il}(x)$  is the continuous version of the function  $[\vartheta_{r,ab}]^{il}$  of Eq. (3.15). The region of integration  $\mathcal{R} \subset (\delta L)^q$  arises from the appropriate step functions, (D4), that implement the correct range of summation of the scatterer indices, and from the type of pair contraction. We have added, in a symbolic fashion, in the argument of  $\Delta$ , the information about the scatterer indices that have been contracted: in the above cases, the contraction was  $r_1=r_2, r_3=r_4, \dots, r_{2q-1}=r_{2q}$ . Equation (D17) [inserted in Eq. (D2)] and Eq. (D18) generalize the earlier expressions (3.46) and (3.41). One of the “possible combinations,” i.e., the one arising from the contraction  $r_1=r_3, r_2=r_4$ , that would be indicated symbolically as 13, 24, generalizes Eqs. (C2) and (C3). In an expansion of the integral (D18) in powers of  $\delta L$ , the leading term clearly behaves as

$$\Delta_{a_1 b_1, \dots, a_{2q} b_{2q}}^{i_1 j_1, \dots, i_{2q} j_{2q}}[k; \mathcal{R}(\delta L)] \sim (\delta L)^q + \cdots. \quad (\text{D19})$$

Consider now the particular case of an even moment of the BB  $\varepsilon$ . For this purpose we set  $p=2t$  in the above analysis, starting from Eq. (D1). The lowest-order term in the expansion of Eq. (D1) corresponds to  $\mu_1=\dots=\mu_{2t}=1$  and thus to  $2q=2t$ , in the notation introduced right after Eq. (D1) (i.e., this term is of order  $2t$  in the  $\hat{v}_r$ ’s); in the DWSL it is found, by setting  $q=t$  in Eqs. (D17) and (D19), that its leading term in an expansion in powers of  $\delta L$  behaves as  $(\delta L)^t / \sqrt{l_{a_1 b_1} \cdots l_{a_{2t} b_{2t}}}$ . Higher-order terms in the expansion (D1) for the same moment are higher order in  $\delta L$ . The contribution to a second moment obtained above, Eq. (3.49),

represents, for  $t=1$ , a particular case of this general result.

For an odd moment with  $p=2t+1$ , the first term in the expansion of Eq. (D1), i.e., the one with  $\mu_1=\dots=\mu_{2t+1}=1$ , vanishes, because it is of odd order in the  $\hat{v}_r$ 's. The next-order terms in the expansion (D1) have one of the  $\mu_i=2$  and all the other  $\mu_i$ 's equal to 1 [for instance,  $\mu_1=2, \mu_2=\dots=\mu_{2t+1}=1$ ]. For these terms,  $2q=2t+2$ , so that from Eqs. (D17) and (D19) we see that these terms are of order  $(\delta L)^{t+1}/\sqrt{l_{a_1 b_1} \dots l_{a_{2t+2} b_{2t+2}}}$ .

The conclusion of the last two paragraphs is not altered when we translate the BB to the interval  $(L, L+\delta L)$ . We have thus proven, for the moments of  $\varepsilon$ , the behavior that was mentioned at the end of Sec. III B.

#### APPENDIX E: SOME USEFUL DETAILS FOR SEC. IV A

In the one-channel case, the quantity  $K_{ab,cd}^{ij,hl}$  of Eq. (3.43) and the diffusion coefficient  $D_{ab,cd}^{ij,hl}(k,L)$  of Eq. (3.52), to be used in the diffusion equation (3.56), are given by

$$K^{ij,hl} = [(-1)^i + (-1)^{j+1} + (-1)^h + (-1)^{l+1}]k, \quad (\text{E1a})$$

$$D^{ij,hl}(k,L) = \frac{(-1)^{i+h+1}}{2l} e^{iK^{ij,hl}L}, \quad (\text{E1b})$$

respectively. We have omitted the channel indices, which would take the value 1.

We can rewrite the pair of Eqs. (4.5), after multiplying the second one by  $e^{ix_0 s}$ , as

$$\frac{1}{2} \frac{\partial A}{\partial s} = A + 2b_r, \quad (\text{E2a})$$

$$\frac{\partial b_r}{\partial s} + x_0 b_i = -A - 2b_r, \quad (\text{E2b})$$

$$\frac{\partial b_i}{\partial s} - x_0 b_r = 0, \quad (\text{E2c})$$

where

$$A(s) = 2\langle \alpha \alpha^* \rangle - 1, \quad (\text{E3a})$$

$$b(s) = b_r(s) + ib_i(s) = \langle \alpha \beta \rangle_s e^{ix_0 s}. \quad (\text{E3b})$$

The quantities  $p_1, p_2$  and  $p_3$  appearing in Eq. (4.7) are the roots of the third degree polynomial  $P(p) = p^3 + x_0^2 p - 2x_0^2$  and are given by

$$p_1 = u + v, \quad (\text{E4a})$$

$$p_2 = -\frac{1}{2}(u+v) + i\frac{\sqrt{3}}{2}(u-v), \quad (\text{E4b})$$

$$p_3 = -\frac{1}{2}(u+v) - i\frac{\sqrt{3}}{2}(u-v), \quad (\text{E4c})$$

with

$$u = \frac{x_0}{\sqrt{3}} \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right\}^{1/3},$$

$$v = -\frac{x_0}{\sqrt{3}} \left\{ \left[ 1 + \left( \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{3\sqrt{3}}{x_0} \right\}^{1/3}. \quad (\text{E5})$$

When  $x_0 \gg 1$ , we expand  $u$  and  $v$  as

$$u = \frac{x_0}{\sqrt{3}} \left[ 1 + \frac{\sqrt{3}}{x_0} + \frac{3}{2x_0^2} - \frac{4\sqrt{3}}{x_0^3} - \frac{105}{8x_0^4} + \dots \right], \quad (\text{E6a})$$

$$v = -\frac{x_0}{\sqrt{3}} \left[ 1 - \frac{\sqrt{3}}{x_0} + \frac{3}{2x_0^2} + \frac{4\sqrt{3}}{x_0^3} - \frac{105}{8x_0^4} + \dots \right], \quad (\text{E6b})$$

and the roots are given approximately by

$$p_1 \approx 2 - \frac{8}{x_0^2} + O\left(\frac{1}{x_0^4}\right), \quad (\text{E7a})$$

$$p_2 \approx (-1 + ix_0) + \left( \frac{4}{x_0^2} + i\frac{3}{2x_0} \right) + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right), \quad (\text{E7b})$$

$$p_3 = p_2^*. \quad (\text{E7c})$$

We can thus write the exact solution (4.7) as a power series in  $1/x_0$  as

$$A(s) = e^{2s} + \frac{4}{x_0^2} [- (1+2s)e^{2s} + e^{-s} \cos x_0 s] + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right), \quad (\text{E8a})$$

$$b_r(s) = -\frac{1}{x_0} e^{-s} \sin x_0 s + \frac{2}{x_0^2} \left[ \left( 1 - \frac{3s}{4} \right) e^{-s} \cos x_0 s - e^{2s} \right]$$

$$+ O\left(\frac{1}{x_0^3}\right), \quad (\text{E8b})$$

$$b_i(s) = \frac{1}{x_0} [-e^{2s} + e^{-s} \cos x_0 s] - \frac{3}{x_0^2} (s-1) e^{-s} \sin x_0 s + O\left(\frac{1}{x_0^3}\right). \quad (\text{E8c})$$

[1] A. Ishimaru, *Waves Propagation and Scattering in Random Media* (Academic Press, New York, 1978).

[2] S. M. Rytov, Y. A. Kravtsov, and V. I. Tatarskii, *Principles of Statistical Radiophysics* (Springer, Berlin, 1989).

[3] *Scattering in Volumes and Surfaces*, edited by M. Nieto-

Vesperinas and J. C. Dainty (North Holland, Amsterdam, 1990).

[4] *Mesoscopic Phenomena in Solids*, edited by B. L. Al'tshuler, P. A. Lee, and R. A. Webb (North Holland, Amsterdam, 1991).

[5] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization and*

- Mesoscopic Phenomena* (Academic Press, New York, 1995).
- [6] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 731 (1997).
- [7] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1997).
- [8] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [9] Y. Alhassid, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 895 (2000).
- [10] P. A. Mello and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems. Complexity and Statistical Fluctuations* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
- [11] A. García-Martín and J. J. Sáenz, *Waves Random Complex Media* **15**, 229 (2005).
- [12] Y. V. Fyodorov, D. V. Savin, and H. J. Sommers, *J. Phys. A* **38**, 10731 (2005).
- [13] P. A. Mello and B. Shapiro, *Phys. Rev. B* **37**, 5860 (1988).
- [14] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [15] P. A. Mello, *J. Math. Phys.* **27**, 2876 (1986).
- [16] P. A. Mello, P. Pereyra, and N. Kumar, *Ann. Phys. (N.Y.)* **181**, 290 (1988).
- [17] O. N. Dorokhov, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **36**, 259 (1982) [*JETP Lett.* **36**, 318 (1982)].
- [18] V. I. Oseledec, *Trans. Mosc. Math. Soc.* **19**, 197 (1968).
- [19] K. Efetov and A. I. Larkin, *Sov. Phys. JETP* **58**, 444 (1983).
- [20] K. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [21] Y. V. Fyodorov and A. D. Mirlin, *Int. J. Mod. Phys. B* **8**, 3795 (1994).
- [22] P. W. Brouwer and K. Frahm, *Phys. Rev. B* **53**, 1490 (1996).
- [23] L. S. Froufe-Pérez, P. García-Mochales, P. A. Serena, P. A. Mello, and J. J. Sáenz, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 246403 (2002).
- [24] A. García-Martín and J. J. Sáenz, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 116603 (2001).
- [25] P. A. Mello and S. Tomsovic, *Phys. Rev. B* **46**, 15963 (1992).
- [26] P. A. Mello, in *Mesoscopic Quantum Physics*, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, and J.-L. Pichard, Les Houches Summer School, Session LXI (Elsevier, Amsterdam, 1995).
- [27] P. A. Mello, M. Yépez, L. S. Froufe-Pérez, and J. J. Sáenz, *Physica A* **372**, 203 (2006).
- [28] F. J. Dyson, *J. Math. Phys.* **3**, 140 (1962).
- [29] L. S. Froufe-Pérez, M. Yépez, P. A. Mello, and J. J. Sáenz, *cond-mat/0610669*.
- [30] J. A. Torres and J. J. Sáenz, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 2182 (2004).
- [31] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 1 (1943). [Reprinted in *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*, edited by N. Wax (Dover, New York, 1954), p. 3].
- [32] See, for example, J. M. Ziman, *Electrons and Phonons* (Oxford University Press, Oxford, 2001), p. 269.
- [33] P. Pereyra, *J. Math. Phys.* **36**, 1166 (1995).
- [34] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, 7th ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1999), pp. 116–120.
- [35] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).
- [36] L. S. Froufe-Pérez, Ph.D. Thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2006.
- [37] P. García-Mochales, P. A. Serena, N. García and J. L. Costa-Krämer, *Phys. Rev. B* **53**, 10268 (1996).
- [38] A. García-Martín, J. A. Torres, J. J. Sáenz, and M. Nieto-Vesperinas, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 1912 (1997); *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4165 (1998).
- [39] J. A. Sánchez-Gil, V. Freilikher, I. Yurkevich, and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 948 (1998); J. A. Sánchez-Gil, V. Freilikher, A. A. Maradudin, and I. Yurkevich, *Phys. Rev. B* **59**, 5915 (1999).
- [40] F. M. Izrailev, G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez, and M. Rendón, *Prog. Solid State Chem.* **0**, 3032 (2003).
- [41] F. M. Izrailev, N. M. Makarov, and M. Rendón, *Phys. Status Solidi B* **242**, 1224 (2005); *Phys. Rev. B* **72**, 041403(R) (2005).
- [42] M. Rendón, Ph.D. Thesis, Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, 2006.
- [43] C. W. J. Beenakker and B. Rejaei, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3689 (1993); *Phys. Rev. B* **49**, 7499 (1994).

# Transport of waves in disordered waveguides: A potential model

P.A. Mello<sup>a,\*</sup>, M. Yépez<sup>a</sup>, L.S. Froufe-Pérez<sup>b</sup>, J.J. Sáenz<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 01000 México, Distrito Federal, Mexico*

<sup>b</sup>*Laboratoire d’Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion, Ecole Centrale Paris, Centre National de la Recherche Scientifique, 92295 Châtenay-Malabry Cedex, France*

<sup>c</sup>*Departamento de Física de la Materia Condensada and Instituto “Nicolás Cabrera”, Universidad Autónoma de Madrid, E-28049 Madrid, Spain*

Available online 14 September 2007

---

## Abstract

We study the statistical properties of wave transport in a disordered waveguide. We first derive the properties of a “building block” (BB) of length  $\delta L$  starting from a potential model consisting of thin potential slices. We then find a diffusion equation—in the space of transfer matrices that describe our system—which governs the evolution with the length  $L$  of the disordered waveguide of the transport properties of interest. The latter depend only on the mean free paths and on no other property of the slice distribution. The *universality* that arises demonstrates the existence of a *generalized central-limit theorem*. We have developed a numerical simulation in which the universal statistical properties of the BB found analytically are first implemented numerically, and then the various BBs are combined to construct the full waveguide. The reported results thus obtained are in good agreement with microscopic calculations, for both bulk and surface disorder.

© 2007 Elsevier B.V. All rights reserved.

PACS: 05.60.Gg; 73.23.-b; 05.40.-a; 84.40.Az

Keywords: Disordered waveguides; Quantum transport; Random processes

---

## 1. Introduction

The complexity of the wave interference phenomena that occur when a wave propagates through a disordered medium containing a random distribution of scatterers is of considerable interest in many fields of physics. The problem has seen a revived interest in relation to the phenomenon of localization [1].

Remarkable *statistical regularities* have been found in such systems, in the sense that the probability distribution for various macroscopic quantities involves a rather small number of relevant physical parameters only. In Ref. [2] it was shown that a limiting distribution of physical quantities indeed arises in the so-called *dense-weak-scattering limit* (DWSL) and within a particular class of models, the relevant physical parameter being the mean free path. This result constitutes a *generalized central-limit theorem* (CLT) and coincides with that of the maximum-entropy model of Ref. [3], which gives rise to a diffusion equation known as the DMPK

---

\*Corresponding author.

E-mail address: [mello@fisica.unam.mx](mailto:mello@fisica.unam.mx) (P.A. Mello).

equation (after Dorokhov [4] and Mello et al. [3]). The maximum-entropy approach can thus be interpreted as capturing the features arising from a CLT. For waveguides with bulk disorder the statistical description of the conductance given by DMPK is excellent, whereas for waveguides with surface disorder it is not satisfactory [5]. An alternative approach to the study of disordered conductors is the supersymmetry method [6]. This method is able, in principle, to deal with problems with surface disorder; however, not much has been done in this direction.

The motivation of this presentation is to review recent work in which the statistical properties of a “building block” (BB) of length  $\delta L$  are derived starting from a potential model and are then used to find the “evolution” with length of the expectation value of physical quantities. As we shall see, in the analysis to be presented the energy appears explicitly, in contrast to earlier publications. Our model is also suitable to study wave-transport problems in which the physics of the various modes is relevant, as is the case of waveguides with surface disorder, instead of bulk disorder. We shall also find a good description of the statistical properties of quantities that involve phases, which were not described at all in previous models. The reader is referred to Ref. [7] for a detailed discussion of the model presented here.

The paper is organized as follows. In the next section we find the statistical properties of a BB using, as a potential model, thin slices perpendicular to the direction of the waveguide, admitting an arbitrary variation of the potential in the transverse direction. In Section 3 these results are used to find a Fokker–Planck equation for the “evolution” with the waveguide length  $L$  of the expectation value of the physical quantities of interest. It turns out that the cumulants of the potential higher than the second are irrelevant in the end. This signals the existence of a generalized CLT: once the mean free paths are specified, the limiting diffusion equation is universal, i.e., independent of other details of the microscopic statistics. The results obtained for a BB have an intrinsic interest as well, since they can be used to describe the statistical scattering properties of thin slabs. We indicate in Section 4 a numerical procedure that was developed to simulate numerically the diffusion process in transfer-matrix space. We present some of the results that we have been able to obtain so far and compare them with microscopic solutions of the Schrödinger equation. The conclusions of this work are given in Section 5.

## 2. Statistical properties of the building block

We construct the BB as a sequence of  $m \gg 1$   $\delta$ -potential “slices” which are assumed to be equidistant, their separation being  $d$ , while their strength obeys some statistical distribution, as will be explained below. The physical regime in which we shall work is such that the separation  $d$  between slices is much smaller than the wavelength  $\lambda$  of the incident wave, the thickness  $\delta L$  of the BB and the mean free path  $\ell$ , i.e.,

$$d \ll \{\lambda, \delta L, \ell\}, \quad (1)$$

as shown schematically in Fig. 1. The  $r$ th  $\delta$ -slice potential is defined as

$$U_r(x, y) = u_r(y)\delta(x - x_r). \quad (2)$$

Since the Schrödinger equation has to be solved with Dirichlet boundary conditions at the lateral boundaries, we introduce the “transverse” states

$$\chi_a(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \frac{\pi a y}{W}, \quad (3)$$

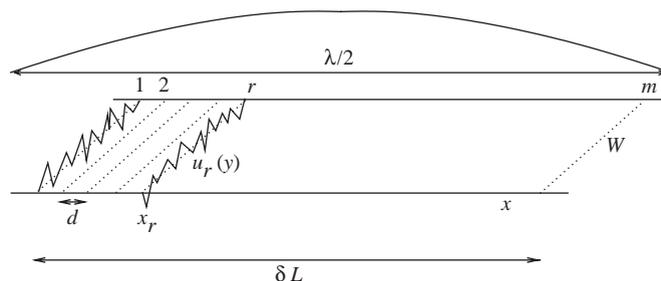


Fig. 1. Construction of the BB using  $\delta$ -potential slices in the regime defined by inequality (1).

which vanish for  $y = 0$  and  $W$  if the “channel” or “mode” index  $a$  is an integer. The potential of Eq. (2) has matrix elements with respect to channels given by

$$[U_r(x)]_{ab} = (u_r)_{ab} \delta(x - x_r). \tag{4}$$

The scattering properties of the system will be described by means of its transfer matrix which, by definition, relates the wave amplitudes (traveling to the right and to the left) on the right-hand side (r.h.s.) of the system to those on the left-hand side (l.h.s.). If the number of open channels, or traveling modes, is  $N$ , the transfer matrix has dimensionality  $2N$ . In particular, the transfer matrix of the  $r$ th  $\delta$  slice is given by

$$M_r = I_{2N} + \epsilon_r = I_{2N} + \begin{bmatrix} \epsilon_r^{11} & \epsilon_r^{12} \\ (\epsilon_r^{12})^* & (\epsilon_r^{11})^* \end{bmatrix}, \tag{5}$$

with

$$(\epsilon_r)_{ab}^{11} = -i \frac{(\hat{u}_r)_{ab}}{2\sqrt{k_a k_b}} e^{-i(k_b - k_a)x_r}, \quad (\epsilon_r)_{ab}^{12} = -i \frac{(\hat{u}_r)_{ab}}{2\sqrt{k_a k_b}} e^{-i(k_b + k_a)x_r}, \tag{6}$$

where  $a, b = 1, \dots, N$  label the open channels;  $(\hat{u}_r)_{ab}$  is an “effective” potential strength that takes into account transitions to closed channels (see Ref. [7, Appendix B]). The quantity  $k_a$  denotes the “longitudinal” wave number in channel  $a$ , i.e.,

$$k_a^2 = k^2 - \left(\frac{\pi a}{W}\right)^2. \tag{7}$$

The transfer matrix of the BB can be written in terms of the transfer matrices of the individual slices as

$$\begin{aligned} M' &= M_m \cdots M_2 M_1 = (I_{2N} + \epsilon_m) \cdots (I_{2N} + \epsilon_1) \\ &\equiv I_{2N} + \epsilon, \end{aligned} \tag{8}$$

$$\epsilon = \sum_r \epsilon_r + \sum_{r_1 > r_2} \epsilon_{r_1} \epsilon_{r_2} + \cdots. \tag{9}$$

In terms of the  $(\hat{u}_r)_{ab}$  we specify the statistical model. The  $m$  potential matrix elements  $(\hat{u}_r)_{ab}$ ,  $r = 1, \dots, m$ , are assumed to be *statistically independent, identically distributed, with zero average* and, for simplicity, *zero odd moments*, so that, for example,

$$\langle (\hat{u}_r)_{ab} \rangle = 0, \tag{10}$$

$$\langle (\hat{u}_{r_1})_{a_1 b_1} (\hat{u}_{r_2})_{a_2 b_2} \rangle = \kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2) \delta_{r_1 r_2}, \tag{11}$$

$$\begin{aligned} \langle (\hat{u}_{r_1})_{a_1 b_1} (\hat{u}_{r_2})_{a_2 b_2} (\hat{u}_{r_3})_{a_3 b_3} (\hat{u}_{r_4})_{a_4 b_4} \rangle \\ = \kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2) \kappa_2(a_3 b_3, a_4 b_4) \delta_{r_1 r_2} \delta_{r_3 r_4} + \kappa_2(a_1 b_1, a_3 b_3) \kappa_2(a_2 b_2, a_4 b_4) \delta_{r_1 r_3} \delta_{r_2 r_4} \\ + \kappa_2(a_1 b_1, a_4 b_4) \kappa_2(a_2 b_2, a_3 b_3) \delta_{r_1 r_4} \delta_{r_2 r_3} + \kappa_4(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4) \delta_{r_1 r_2 r_3 r_4}, \end{aligned} \tag{12}$$

where  $\kappa_2(a_1 b_1, a_2 b_2)$ ,  $\kappa_4(a_1 b_1, a_2 b_2, a_3 b_3, a_4 b_4)$ , etc., denote the second, fourth, etc., cumulants of  $(\hat{u}_r)_{ab}$ .

From these expressions we can calculate the various moments of  $\epsilon$  for the BB. These will be evaluated in the so-called DWSL, in which the various scatterers are assumed to be very weak, their linear density  $\nu = 1/d$  very large, in such a way that the quantities  $\ell_{ab}$ , which can be identified with channel-dependent mean free paths, are fixed, i.e.,

$$\frac{1}{\ell_{ab}} = \frac{\langle (\hat{u}_r)_{ab}^2 \rangle}{4k_a k_b d} \approx \nu \langle (r_r)_{ab}^2 \rangle. \tag{13}$$

One readily finds (even without the DWSL) that the first moment of  $\epsilon$  vanishes

$$\langle \epsilon \rangle_{\delta L} = 0. \tag{14}$$

The second moments of  $\varepsilon$  are given by (the upper indices designate the matrix blocks, as in Eq. (5), and the lower indices denote the channels)

$$\lim_{DWS} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} = 2D_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L)\delta L + \left[ iK_{ab,cd}^{ij,hl} D_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L) + 2 \sum_{\alpha' \beta', \lambda' \mu'} D_{\alpha\alpha', c\beta'}^{i\lambda', h\mu'}(k, L) D_{\alpha'b, \beta'd}^{\lambda'j, \mu'l}(k, L) \right] (\delta L)^2 + O(\delta L)^3, \tag{15}$$

where we have defined the “diffusion coefficients”

$$D_{ab,cd}^{ij,hl}(k, L) = (-)^{i+h+1} \frac{C(ab, cd)}{2\sqrt{\ell_{ab}(k)\ell_{cd}(k)}} e^{iK_{ab,cd}^{ij,hl}L}, \tag{16}$$

in analogy with the behavior of the spatial increment of a Brownian particle during a time interval  $\delta t$  [8]. Here, the diffusion coefficients depend on the mean free paths, they are energy dependent and also length dependent. In Eqs. (15) and (16) we have used the symbol  $K_{ab,cd}^{ij,hl} = (-1)^i k_a + (-1)^{j+1} k_b + (-1)^h k_c + (-1)^{l+1} k_d$ , and the quantity  $C(ab, cd)$  in Eq. (16) is the correlation coefficient of the matrix elements  $(\hat{u}_r)_{ab}$  and  $(\hat{u}_r)_{cd}$ .

In the DWSL, the moments of arbitrary order have the structure

$$\langle \varepsilon_{a_1 b_1}^{i_1 j_1} \cdots \varepsilon_{a_{2t} b_{2t}}^{i_{2t} j_{2t}} \rangle_{\delta L} \sim \left( \frac{\delta L}{\ell_{ab}} \right)^t + \left( \frac{\delta L}{\ell_{ab}} \right)^{t+1} + \cdots, \tag{17}$$

$$\langle \varepsilon_{a_1 b_1}^{i_1 j_1} \cdots \varepsilon_{a_p b_p}^{i_{2t+1} j_{2t+1}} \rangle_{\delta L} \sim \left( \frac{\delta L}{\ell_{ab}} \right)^{t+1} + \left( \frac{\delta L}{\ell_{ab}} \right)^{t+2} + \cdots. \tag{18}$$

The very important result emerges that *the dependence on the cumulants of the potential higher than the second drops out in the DWSL*. The diffusion coefficients depend only on the second cumulants  $\kappa_2$  of the potential through the mean free paths  $\ell_{ab}$ ; higher-order cumulants  $\kappa_4$ , etc., do not contribute in the DWSL. This is a *generalized CLT*.

### 3. Transport in q-1D disordered systems: the diffusion equation

We first present a general way of expressing the expectation value of an observable when we add a BB to an already existing waveguide of length  $L$ , as shown in Fig. 2.

The transfer matrix of the two pieces, with transfer matrices  $M''$  and  $M'$ , respectively, can be written as

$$M = M'' + \delta M = M'' + \varepsilon M'', \tag{19}$$

where  $\varepsilon$  is related to the transfer matrix  $M'$  of the BB as in Eq. (8). Consider now a function  $F(M)$  of the transfer matrix  $M$ , whose statistical properties we want to study: it might be, for instance, the conductance  $G$  studied earlier, the transmission coefficient  $T_{ab}$ , or any other quantity of physical interest. Its average for the enlarged piece can be written in terms of that for the original one as

$$\langle F(M) \rangle_{L+\delta L} = \langle F(M) \rangle_L + \sum_{\substack{ij\lambda \\ ab\alpha}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \rangle_{L, \delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} \frac{\partial F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda}} \right\rangle_L + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{ijhl\lambda\mu \\ abcd\alpha\beta}} \langle \varepsilon_{ab}^{ij} \varepsilon_{cd}^{hl} \rangle_{L, \delta L} \left\langle M_{b\alpha}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{a\alpha}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L + \cdots. \tag{20}$$

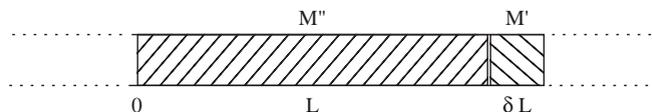


Fig. 2. A waveguide of length  $L$  and a BB added to it.

When the moments of the BB, evaluated in the previous section in the DWSL, are substituted in Eq. (20), we obtain, on the r.h.s. of that equation, a power series in  $\delta L$ . We also perform, on the l.h.s. of Eq. (20), a Taylor expansion of  $\langle F(M) \rangle_{L+\delta L}$  in powers of  $\delta L$  around the “initial” value  $\langle F(M) \rangle_L$ . We can then identify the coefficients of the various powers of  $\delta L$  on the two sides of the equation. In particular, the coefficients of  $\delta L$  give the *diffusion equation*

$$\frac{\partial \langle F(M) \rangle_L}{\partial L} = \sum_{\substack{ijkl\mu \\ abcd\alpha\beta}} D_{ab,cd}^{ij,hl} (k, L) \left\langle M_{bx}^{j\lambda} M_{d\beta}^{l\mu} \frac{\partial^2 F(M)}{\partial M_{ax}^{i\lambda} \partial M_{c\beta}^{h\mu}} \right\rangle_L. \tag{21}$$

Eq. (21) represents the central result of the present paper. Once the mean free paths are specified, the limiting equation (21) is *universal*, i.e., independent of other details of the microscopic statistics.

#### 4. Applications of the diffusion equation

One of the main difficulties in solving the diffusion equation (21), both analytically and numerically, is that it involves averages of different quantities on the l.h.s. and on the r.h.s. So far, that equation has been solved analytically for the one-open-channel case ( $N = 1$ ) and the “observables”

$$M^{11} M^{22} = \frac{1}{tt^*}, \tag{22}$$

$$M^{11} M^{12} = -\frac{r^*}{t^2}, \tag{23}$$

which we have also written in terms of the more familiar reflection ( $r$ ) and transmission ( $t$ ) amplitudes. The evolution with  $L$  of  $\langle M^{11} M^{22} \rangle_L$  only involves  $\langle M^{11} M^{22} \rangle_L$  itself and  $\langle M^{11} M^{12} \rangle_L$  and its complex conjugate, and similarly for the evolution of the latter: we thus obtain a triplet of coupled equations which “close”, in the sense that the quantities occurring on the r.h.s. are the same as those on the l.h.s. These equations can be solved using the method of Laplace transforms, with the initial conditions  $\langle M^{11} M^{22} \rangle_{L=0} = 1$ ,  $\langle M^{11} M^{12} \rangle_{L=0} = 0$ . The results are plotted in Fig. 3 as continuous lines. The dots represent the numerical solutions of the Schrödinger equation, obtained using a one-dimensional version of the delta-slice model discussed below and sketched in the inset of the left panel of Fig. 3. We see that the analytical results are in excellent quantitative agreement with those obtained from microscopic calculations (for more details, see Ref. [7]).

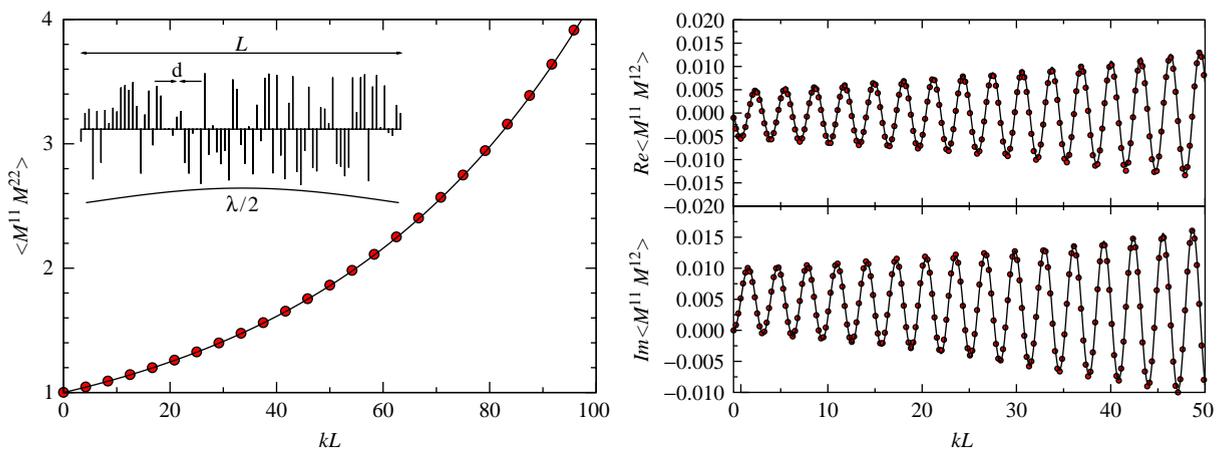


Fig. 3. Left panel:  $\langle M^{11} M^{22} \rangle$  versus  $kL$ . Right panel: real (top) and imaginary (bottom) parts of  $\langle M^{11} M^{12} \rangle$  as a function of  $kL$ . Numerical results (circles) from the one-dimensional model sketched in the inset of the left panel are indistinguishable from the analytical results (bold line). The results correspond to  $2k\ell = 200$  and  $d/\ell = 10^{-3}$ .

Numerically, we have found no “direct” way of solving the diffusion equation (21). Recently, we implemented a numerical algorithm which was called “random walk in transfer-matrix space” [7,9]. It can be summarized as follows: (i) we first obtain a set of mean free paths from a given microscopic potential model (like the one described below) for the BB or, eventually, from experiments on very thin slabs; (ii) we generate an ensemble of transfer matrices having their first and second moments equal to those corresponding to a BB of length  $\delta L$ , in accordance with Eqs. (14) and (15); (iii) the transfer matrix for a waveguide of finite length  $L = P\delta L$  is obtained by combining  $P$  BB matrices randomly chosen from the ensemble. The procedure is repeated in order to obtain the statistical distribution of the physical quantities of interest. The results have been compared with those arising from microscopic solutions of the Schrödinger equation. The latter have been obtained from the potential model sketched in Fig. 4. In this model, a two-dimensional waveguide of length  $L$  and width  $W$  and with perfectly reflecting walls has a region of width  $\delta W$  which is divided into small “cells” of dimensions  $\delta x \cdot \delta y$ , with  $\delta x, \delta y \ll \lambda, W$ . The potential across one individual cell is constant and randomly chosen in an interval of energies  $[-U_0, U_0]$ . This model was solved numerically using propagating and evanescent modes, so that the solution can be considered essentially exact.

For situations in which we have bulk disorder ( $\delta W = W$ ) the comparison is excellent, even for quantities that are not described properly by DMPK. As an example, the behavior of the average transmittances  $\langle T_{ij} \rangle$

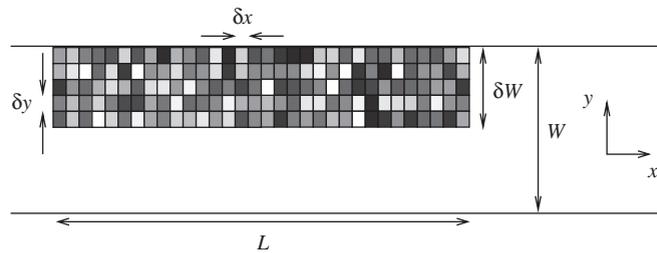


Fig. 4. Schematic representation of the microscopic random potential model described in the text. Each square of the plot, or “cell”, represents a region of constant potential.

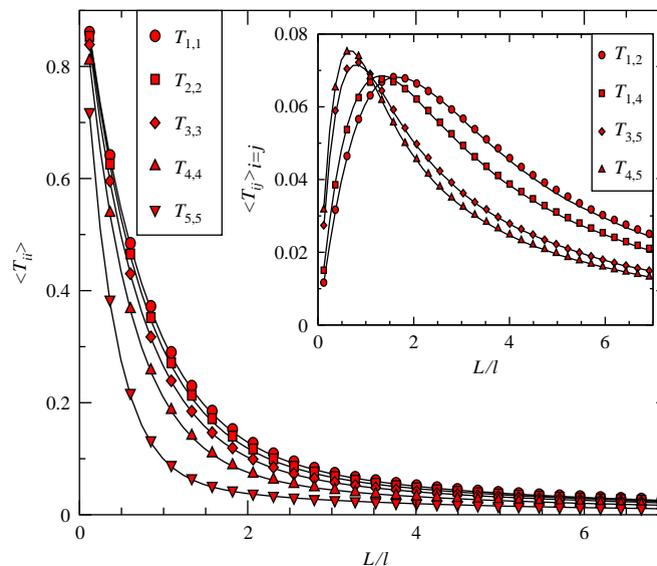


Fig. 5. Bulk disordered waveguides. Average transmittances  $\langle T_{ij} \rangle$  (channel in = channel out), as a function of  $L/l$ . The inset shows the equivalent results for  $\langle T_{ij} \rangle$  with  $i \neq j$  for a representative set of indices. The results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation; symbols) and the random-walk simulation of the diffusion equation (bold line) in the short-wavelength approximation overlap (after Ref. [7]).

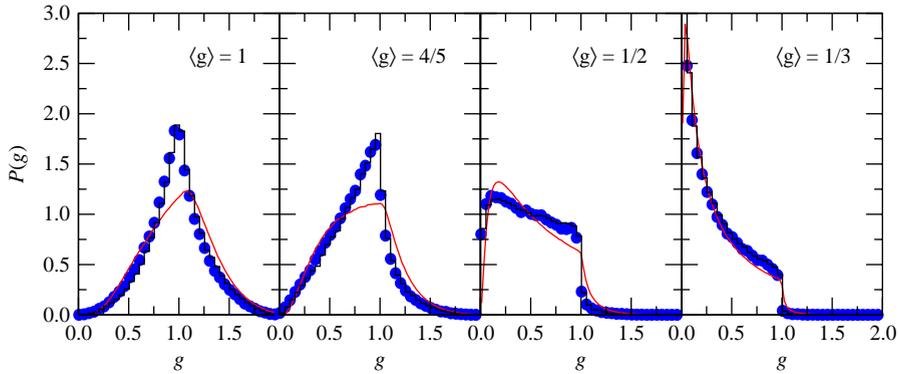


Fig. 6. Surface disordered waveguides. Distribution of the dimensionless conductance,  $P(g)$ , for different conductance averages,  $\langle g \rangle$ . Circles correspond to the random-walk simulation of the diffusion equation in the short-wavelength approximation. The histogram lines are the results based on the numerical solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation). The equivalent results for bulk disorder (continuous line, DMPK) are also shown for comparison [7].

(channel in = channel out), for bulk disordered wires, is plotted in Fig. 5 as a function of  $L/\ell$ ,  $\ell$  being the averaged transport mean free path

$$\frac{1}{\ell} \equiv \frac{1}{N} \sum_{ab} \frac{1}{\ell_{ab}}. \tag{24}$$

The inset shows the equivalent results for  $\langle T_{ij} \rangle$  with  $i \neq j$ . The random-walk simulation was performed in the short-wavelength approximation: in this approximation, which is analogous to the geometrical optics limit studied in optics, we essentially assume that we can fit many wavelengths inside a BB, i.e.,  $\lambda \ll \delta L$  (for details, see Ref. [7]). The exact numerical (microscopic) results for the average transmission coefficients are indistinguishable from the random-walk simulations.

In the case of surface disorder, the mean free paths are very different from those obtained for a uniform (bulk) distribution of scatterers [10,11]. The distribution of the dimensionless conductance for surface disordered wires obtained from the random-walk simulation in the short-wavelength approximation is plotted in Fig. 6 (circles) for different conductance averages. The exact solution of the Schrödinger equation (microscopic calculation; histograms) is again in full agreement with the diffusion equation.

### 5. Conclusions

The central result of the present paper is the Fokker–Planck equation (21), which describes the evolution with the length  $L$  of a disordered waveguide of those transport properties which can be expressed in terms of the transfer matrix  $M$  of the system.

Our starting point is a potential model in which the scattering units consist of delta-potential slices (perpendicular to the longitudinal direction of the waveguide) for which a statistical law is specified. Our result is obtained in the so-called dense-weak-scattering limit (DWSL), in which each potential slice is very weak and the linear density of slices is very large, so that the resulting mean free paths are fixed (see Eq. (13)). The energy of the incident particle is fully taken into account in our analysis.

The statistical properties of a building block (BB) of length  $\delta L$  are first derived. These results have an interest of their own, because they describe the properties of a slab, which can be measured in the laboratory. The BB is then added to a waveguide of length  $L$  to obtain a composition law, from which the diffusion equation is eventually derived. In the DWSL, the statistical properties of the BB, and hence of the full system, depend only on the mean free paths which, in turn, depend only on the second moments of the individual delta-potential strengths. Cumulants of the potential higher than the second are irrelevant in the limit, signaling the existence of a *generalized central-limit theorem* (CLT): once the mean free paths are specified, the limiting equation (21) is *universal*, i.e., independent of other details of the microscopic statistics.

We have been able to solve Eq. (21) exactly for  $N = 1$  and a few particular observables, the solution being in excellent agreement with microscopic calculations.

For other cases, a BB was constructed with the properties that were derived analytically and then combined with successive BBs to construct a waveguide of finite length  $L$ . The results reported in Section 4 show excellent agreement with microscopic calculations for waveguides with bulk disorder. For waveguides with surface disorder the conductance distribution is also described very well by our diffusion equation. The agreement for average transmittances is not as good, probably because of the use of the short-wavelength approximation; this point has to be investigated further. Efforts toward an analytical and/or numerical treatment of the diffusion equation (21) itself would be certainly very important.

Finally, since the results of our model have been compared successfully only with microscopic computer simulations, we think that it would be very challenging to measure these same quantities in the laboratory, in order to make comparisons with real-life experiments.

## Acknowledgments

This work was supported by the Spanish MCyT (Ref. no. BFM2003-01167) and the EU Integrated Project “Molecular Imaging” (Contract no. LSHG-CT-2003-503259). P.A.M. acknowledges Conacyt support through Contract no. 42655. M.Y. also thanks Conacyt for its support through Scholarship no. 179710.

## References

- [1] A. Ishimaru, *Waves Propagation and Scattering in Random Media*, Academic Press, New York, 1978; B.L. Al'tshuler, P.A. Lee, R.A. Webb (Eds.), *Mesoscopic Phenomena in Solids*, North-Holland, Amsterdam, 1991; P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization and Mesoscopic Phenomena*, Academic Press, New York, 1995; C.W.J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* 69 (1997) 731; Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press, Oxford, 1997; S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997; Y. Alhassid, *Rev. Mod. Phys.* 72 (2000) 895; A. García-Martín, J.J. Sáenz, *Waves in Random and Complex Media* 15 (2005) 229.
- [2] P.A. Mello, B. Shapiro, *Phys. Rev. B* 37 (1988) 5860.
- [3] P.A. Mello, P. Pereyra, N. Kumar, *Ann. Phys. (N.Y.)* 181 (1988) 290; P.A. Mello, N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems. Complexity and Statistical Fluctuations*, Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [4] O.N. Dorokhov, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 36 (1982) 259 [*JETP Lett.* 36 (1982) 318].
- [5] L.S. Froufe-Pérez, P. García Mochales, P.A. Serena, P.A. Mello, J.J. Sáenz, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 246403; A. García-Martín, J.J. Sáenz, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 116603.
- [6] K. Efetov, A.I. Larkin, *Sov. Phys. JETP* 58 (1983) 444; K. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997; Y.V. Fyodorov, D.V. Savin, H.J. Sommers, *J. Phys. A* 38 (2005) 10731.
- [7] L.S. Froufe-Pérez, M. Yépez, P.A. Mello, J.J. Sáenz, *Phys. Rev. E* 75 (2007) 031113.
- [8] S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* 15 (1943) 1 [Reprinted in *Selected Papers on Noise and Stochastic Processes*, N. Wax (Ed.), Dover Publications, New York, 1954, p. 3].
- [9] L.S. Froufe-Pérez, Ph.D. Thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2006.
- [10] A. García-Martín, J.A. Torres, J.J. Sáenz, M. Nieto-Vesperinas, *Appl. Phys. Lett.* 71 (1997) 1912; A. García-Martín, J.A. Torres, J.J. Sáenz, M. Nieto-Vesperinas, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 4165.
- [11] J.A. Sánchez-Gil, V. Freilikher, I.V. Yurkevich, A.A. Maradudin, *Phys. Rev. Lett.* 80 (1998) 948; J.A. Sánchez-Gil, V. Freilikher, I.V. Yurkevich, A.A. Maradudin, *Phys. Rev. B* 59 (1999) 5915; F.M. Izrailev, G.A. Luna-Acosta, J.A. Méndez-Bermúdez, M. Rendón, *Phys. Stat. Sol. (c)* 0 (2003) 3032; F.M. Izrailev, N.M. Makarov, M. Rendón, *Phys. Stat. Sol. (b)* 242 (2005) 1224; F.M. Izrailev, N.M. Makarov, M. Rendón, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 041403 (R); M. Rendón, Ph.D. Thesis, Universidad Autónoma de Puebla, 2006.