

Mecánica Estadística

Tarea 6: Mecánica estadística fuera del equilibrio

Iván Mauricio Burbano Aldana

1 de mayo de 2018

1. Relaciones de Kramers-Kronig

1. Considere $z = x + iy \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \subseteq \mathbb{C}$ en el plano complejo superior. Entonces

$$\hat{\chi}(z) = \int_0^\infty \chi(t) e^{izt} dt = \int_0^\infty \chi(t) e^{-yt} e^{ixt} dt = \int_0^\infty \chi(t) e^{ixt} e^{-yt} dt \quad (1)$$

existe ya que para todo $y \in \mathbb{R}^+ := (0, \infty)$

$$\int_0^\infty |\chi(t) e^{-yt}| dt = \int_0^\infty |\chi(t)| |e^{-yt}| dt \leq \int_0^\infty |\chi(t)| dt < \infty. \quad (2)$$

En efecto, por hipótesis χ es medible, por continuidad la exponencial es medible y la transformada de Fourier de una función en $L^1(\mathbb{R})$ siempre existe[1]. Por otra parte, es claro que

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \hat{\chi}(z) &= \int_0^\infty \chi(t) e^{-yt} \cos(xt) dt, \\ \operatorname{Im} \hat{\chi}(z) &= \int_0^\infty \chi(t) e^{-yt} \sin(xt) dt. \end{aligned} \quad (3)$$

Por una cota análoga a (2) vemos que podemos intercambiar el proceso de derivación con el de integración y las ecuaciones de Cauchy-Riemann se satisfacen[1]. Por lo tanto $\hat{\chi}$ es analítico.

2. Ya que $\hat{\chi}$ es analítica, el único polo del integrando es ω_0 . Ya que el camino está contenido en el conjunto donde el integrando es analítico $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \setminus \{\omega_0\}$ y no encierra al polo se concluye

$$\int_C \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = 0 \quad (4)$$

por el teorema de Cauchy.

3. Se tiene si R es el radio de Γ

$$\int_{\Gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = \int_0^\pi \frac{\hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0)}{Re^{i\theta}} iRe^{i\theta} d\theta = i \int_0^\pi \hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0) d\theta. \quad (5)$$

Ahora bien, si $\theta \in (0, \pi)$ entonces $Re^{i\theta} + \omega_0 \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ y

$$\begin{aligned} |\hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0)| &= \left| \int_0^\infty \chi(t) e^{i(R \cos(\theta) + \omega_0)t} e^{-R \sin(\theta)t} dt \right| \\ &\leq \int_0^\infty |\chi(t) e^{i(R \cos(\theta) + \omega_0)t} e^{-R \sin(\theta)t}| dt \\ &= \int_0^\infty |\chi(t)| e^{-R \sin(\theta)t} dt \end{aligned} \quad (6)$$

La desigualdad es un resultado estándar de la teoría de la medida[2]. Además, $|\chi| \geq |\chi(t)| e^{-R \sin(\theta)t}$ e integrable. Entonces por el teorema de convergencia dominada[2] como $|\chi(t)| e^{-R \sin(\theta)t} \rightarrow 0$ se tiene que

$$|\hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0)| \rightarrow 0 \quad (7)$$

cuando $R \rightarrow \infty$. La positividad de la función medible $(t, \theta) \mapsto |\chi(t)| e^{-R \sin(\theta)t}$ permite la aplicación del teorema de Fubini[1]. Esto hace evidente que la cota (6) es integrable como función de θ . Aplicando entonces una vez más el teorema de convergencia dominada se obtiene

$$\left| \int_{\Gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \right| \leq \int_0^\pi |\hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0)| d\theta \rightarrow 0 \quad (8)$$

cuando $R \rightarrow \infty$. Por lo tanto

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = 0. \quad (9)$$

Por otra parte, si el radio de γ es ϵ

$$\int_{\gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = i \int_{\pi}^0 \hat{\chi}(\epsilon e^{i\theta} + \omega_0) d\theta \quad (10)$$

Con una cota análoga a (6) podemos utilizar el teorema de convergencia dominada de manera que la continuidad de $\hat{\chi}$ heredada al ser analítica garantiza que

$$\int_{\gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \rightarrow i \int_{\pi}^0 \hat{\chi}(\omega_0) d\theta = -i\pi \hat{\chi}(\omega_0) \quad (11)$$

cuando $\epsilon \rightarrow 0$.

4. Se tiene que

$$\begin{aligned}
& P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega = \\
& \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left(\int_{-\infty}^{\omega_0 - \epsilon} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega + \int_{\omega_0 + \epsilon}^{\infty} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \right) = \\
& \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow \infty} \left(\int_C \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega - \int_{\Gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega - \int_{\gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega \right) = \quad (12) \\
& \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \lim_{R \rightarrow \infty} \left(0 - \int_{\Gamma} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega + i\pi \hat{\chi}(\omega_0) \right) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i\pi \hat{\chi}(\omega_0) = \\
& \quad i\pi \hat{\chi}(\omega_0)
\end{aligned}$$

5. Se deduce que

$$\hat{\chi}(\omega_0) = -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega. \quad (13)$$

Note que la integral respeta suma y multiplicación por escalares, las operaciones necesarias para separar un número complejo en su parte real e imaginaria. Además, tenemos las relaciones

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}(-i(x + iy)) &= \operatorname{Re}(y - ix) = y = \operatorname{Im}(x + iy), \\
\operatorname{Im}(-i(x + iy)) &= \operatorname{Im}(y - ix) = -x = -\operatorname{Re}(x + iy)
\end{aligned} \quad (14)$$

para todo $x, y \in \mathbb{R}$. De estas observaciones se hacen evidentes las relaciones de Kramers-Kronig

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re} \hat{\chi}(\omega_0) &= \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im} \hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega, \\
\operatorname{Im} \hat{\chi}(\omega_0) &= -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re} \hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0} d\omega.
\end{aligned} \quad (15)$$

2. Teorema de fluctuación-disipación cuántico

1. Tenemos la ecuación de von Neumann

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t}(t) &= \frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] = \frac{1}{i\hbar} [H_0 + H_1(t), \rho_{\text{eq}} + \rho_1(t)] \\
&= \frac{1}{i\hbar} ([H_0, \rho_{\text{eq}}] + [H_0, \rho_1(t)] + [H_1(t), \rho_{\text{eq}}] + [H_1(t), \rho_1(t)]) \quad (16) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{\partial \rho_{\text{eq}}}{\partial t}(t) + [H_0, \rho_1(t)] + [H_1(t), \rho_{\text{eq}}] + [H_1(t), \rho_1(t)] \right).
\end{aligned}$$

Recordando que ρ_{eq} es independiente del tiempo e ignorando como demasiado pequeños a los términos de orden 2 en operadores dependientes del tiempo

$$\frac{\partial \rho_{\text{eq}}}{\partial t}(t) = 0 = [H_1(t), \rho_1(t)]. \quad (17)$$

Se obtiene entonces la ecuación diferencial

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(t) - [H_0, \rho_1(t)] = \frac{1}{i\hbar} [H_1(t), \rho_{\text{eq}}]. \quad (18)$$

Esta induce una ecuación diferencial sobre los valores esperados.

Referencias

- [1] W. Rudin, *Real and Complex Analysis*. McGraw-Hill, Inc., 3 ed., 1987.
- [2] W. Rudin, *Principles of Mathematical Analysis*. International Series in Pure and Applied Mathematics, 3 ed., 1976.