Mecánica Estadística

Tarea 6: Mecánica estadística fuera del equilibrio

Iván Mauricio Burbano Aldana

29 de abril 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

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

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

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

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].

2. Ya que $\hat{\chi}$ es analítica, el único polo del integrado 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

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega-\omega_0}\,\mathrm{d}\omega = 0 \tag{3}$$

por el teorema de Cauchy.

3. Se tiene si R es el radio de Γ

$$\int_\Gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega-\omega_0}\,\mathrm{d}\omega = \int_0^\pi \frac{\hat{\chi}(Re^{i\theta}+\omega_0)}{Re^{i\theta}} iRe^{i\theta}\,\mathrm{d}\theta = i\int_0^\pi \hat{\chi}(Re^{i\theta}+\omega_0)\,\mathrm{d}\theta\,. \tag{4}$$

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

$$\begin{aligned} \left|\hat{\chi}(Re^{i\theta}+\omega_0)\right| &= \left|\int_0^\infty \chi(t)e^{i(R\cos(\theta)+\omega_0)t}e^{-R\sin(\theta)t}\,\mathrm{d}t\right| \\ &\leq \int_0^\infty \left|\chi(t)e^{i(R\cos(\theta)+\omega_0)t}e^{-R\sin(\theta)t}\right|\mathrm{d}t \\ &= \int_0^\infty |\chi(t)|\,e^{-R\sin(\theta)t}\,\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{5}$$

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 $|\chi(t)|\, e^{-R\sin(\theta)t} \to 0$ se tiene que

$$\left|\hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0)\right| \to 0 \tag{6}$$

cuando $R \to \infty$. La positividad de la función medible $(t, \theta) \mapsto |\chi(t)|\, e^{-R\sin(\theta)t}$ permite la aplicación del teorema de Fubini[3]. Esto hace evidente que la cota (5) es integrable como función de θ. Aplicando entonces una vez más el teorema de convergencia dominada se obtiene

$$\left|\int_\Gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega\right| \leq \int_0^\pi \left|\hat{\chi}(Re^{i\theta} + \omega_0)\right| \mathrm{d}\theta \to 0 \tag{7}$$

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

$$\lim_{R\to\infty} \int_\Gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega = 0. \tag{8}$$

Por otra parte, si el radio de γ es ϵ

$$\int_\gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega = i \int_\pi^0 \hat{\chi}(\epsilon e^{i\theta} + \omega_0)\, \mathrm{d}\theta \tag{9}$$

Con una cota análoga a (5) podemos utilizar el teorema de convergencia dominada de manera que la continuidad de $\hat{\chi}$ heredada al ser analítica garantiza que

$$\int_\gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega \to i \int_\pi^0 \hat{\chi}(\omega_0)\, \mathrm{d}\theta = -i\pi\hat{\chi}(\omega_0) \tag{10}$$

cuando $\epsilon \to 0$.

4. Se tiene que

$$\begin{aligned} P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega &= \\ \lim_{\epsilon\to 0^+}\left(\int_{-\infty}^{\omega_0-\epsilon} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega + \int_{\omega_0+\epsilon}^{\infty} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega\right) &= \\ \lim_{\epsilon\to 0^+}\lim_{R\to\infty}\left(\int_{\mathcal{C}} \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega - \int_\Gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega - \int_\gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega\right) &= \\ \lim_{\epsilon\to 0^+}\lim_{R\to\infty}\left(0 - \int_\Gamma \frac{\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega + i\pi\hat{\chi}(\omega_0)\right) = \lim_{\epsilon\to 0^+} i\pi\hat{\chi}(\omega_0) &= \\ i\pi\hat{\chi}(\omega_0) \end{aligned} \tag{11}$$

5. Se deduce que

$$\hat{\chi}(\omega_0) = -\frac{1}{\pi} P\int_{-\infty}^{\infty} \frac{i\hat{\chi}(\omega)}{\omega - \omega_0}\, \mathrm{d}\omega\,. \tag{12}$$

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

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}(-i(x+iy)) =& \operatorname{Re}(y-ix) = y = \operatorname{Im}(x+iy),\\ \operatorname{Im}(-i(x+iy)) =& \operatorname{Im}(y-ix) = -x = -\operatorname{Re}(x+iy)\end{aligned} \tag{13}$$

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

$$\begin{aligned}\operatorname{Re}\hat{\chi}(\omega_0) =& \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Im}\hat{\chi}(\omega)}{\omega-\omega_0}\,\mathrm{d}\omega\,,\\ \operatorname{Im}\hat{\chi}(\omega_0) =& -\frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{Re}\hat{\chi}(\omega)}{\omega-\omega_0}\,\mathrm{d}\omega\,.\end{aligned} \tag{14}$$

2. Teorema de fluctuación-disipación cuántico

1. Tenemos la ecuación de von Neumann

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t}(t) =& \frac{1}{i\hbar}[H(t),\rho(t)] = \frac{1}{i\hbar}[H_0 + H_1(t), \rho_e q + \rho_1(t)]\\ =& \frac{1}{i\hbar}([H_0,\rho_{\mathrm{eq}}] + [H_0,\rho_1(t)] + [H_1(t),\rho_{\mathrm{eq}}] + [H_1(t),\rho_1(t)])\\ =& \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\partial\rho_{\mathrm{eq}}}{\partial t}(t) + [H_0,\rho_1(t)] + [H_1(t),\rho_{\mathrm{eq}}] + [H_1(t),\rho_1(t)]\right).\end{aligned} \tag{15}$$

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

$$\frac{\partial\rho_{\mathrm{eq}}}{\partial t}(t) = 0 = [H_1(t),\rho_1(t)]. \tag{16}$$

Se obtiene entonces la ecuación diferencial

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}(t) - [H_0,\rho_1(t)] = \frac{1}{i\hbar}[H_1(t),\rho_{\mathrm{eq}}]. \tag{17}$$

Esta induce una ecuación diferencial sobre los valores esperados

Referencias

[1] W. Rudin, *Functional Analysis.* McGraw-Hill, Inc., 2nd ed., 1991.

[2] W. Rudin, *Principles of Mathematical Analysis.* International Series in Pure and Applied Mathematics, 3 ed., 1976.

[3] W. Rudin, *Real and Complex Analysis.* McGraw-Hill, Inc., 3 ed., 1987.