

Mecánica Estadística

Tarea 6: Mecánica estadística fuera del equilibrio

Iván Mauricio Burbano Aldana

7 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

Para evitar exceso de formalismo, vamos a asumir que todos los operadores involucrados son acotados. La existencia de una norma permite hablar de continuidad y convergencia de manera simple. En particular, la exponencial de un operador está dada por su serie de Taylor.

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

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

En analogía con lo hecho en clase, definimos el operador de Liouville

$$\mathcal{L}_0(O) = \frac{1}{i\hbar}[H_0, O]. \quad (19)$$

Entonces la ecuación se vuelve

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t}(t) - \mathcal{L}_0(\rho_1(t)) = \frac{1}{i\hbar}[H_1(t), \rho_{\text{eq}}] = -\frac{F(t)}{i\hbar}[B, \rho_{\text{eq}}] \quad (20)$$

con la solución

$$\rho_1(t) = -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] \quad (21)$$

donde t_0 es el instante donde empieza la perturbación. En efecto se satisface la condición inicial y mediante el uso de diferenciación bajo el signo de integración

$$\begin{aligned} \rho_1(t_0) &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^{t_0} dt' F(t') e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] = 0, \\ \frac{\partial \rho_1}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar} F(t) e^{(t-t)\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] - \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \mathcal{L}_0 e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} F(t) [B, \rho_{\text{eq}}] - \mathcal{L}_0 \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} F(t) [B, \rho_{\text{eq}}] + \mathcal{L}_0(\rho_1(t)). \end{aligned} \quad (22)$$

Por lo tanto, el valor esperado de un operador A en esta aproximación es

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\rho(t)} &= \text{tr}(\rho(t)A) = \text{tr}((\rho_{\text{eq}} + \rho_1(t))A) = \text{tr}(\rho_{\text{eq}}A) + \text{tr}(\rho_1(t)A) \\ &= \langle A \rangle_{\rho_{\text{eq}}} - \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \text{tr}\left(e^{(t-t')\mathcal{L}_0} ([B, \rho_{\text{eq}}])A\right) \end{aligned} \quad (23)$$

donde se utilizó la linealidad de la traza junto con su continuidad para sacar la integral. Ahora bien, recordamos la ecuación de Heisenberg

$$B'(t) = -\frac{1}{i\hbar}[H_0, B(t)] = -\mathcal{L}_0(B(t)) \quad (24)$$

cuya solución es

$$B(t) = e^{-t\mathcal{L}_0} B(0) = e^{-t\mathcal{L}_0} B \quad (25)$$

donde $B(t)$ está en la representación de Heisenberg del sistema en equilibrio y B en la de Schrödinger. Entonces, ya que en la representación de Heisenberg los estados no evolucionan

$$\begin{aligned} e^{(t-t')\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] &= e^{t\mathcal{L}_0} e^{-t'\mathcal{L}_0} [B, \rho_{\text{eq}}] = e^{t\mathcal{L}_0} [e^{-t'\mathcal{L}_0} B, \rho_{\text{eq}}] \\ &= e^{t\mathcal{L}_0} [B(t'), \rho_{\text{eq}}] \text{tr} \left(\frac{d\rho}{dt} H + \rho \frac{dH}{dt} \right), \rho_{\text{eq}}]. \end{aligned} \quad (26)$$

Luego la respuesta a la perturbación es

$$\langle A \rangle_{\rho(t)} - \langle A \rangle_{\rho_{\text{eq}}} = -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \text{tr}(e^{t\mathcal{L}_0} ([B(t'), \rho_{\text{eq}}]) A). \quad (27)$$

Recordando (25) se tiene

$$e^{t\mathcal{L}_0} C = C(-t) = e^{-itH_0/\hbar} C e^{itH_0/\hbar} \quad (28)$$

y por lo tanto haciendo uso de la ciclicidad de la traza

$$\begin{aligned} &\langle A \rangle_{\rho(t)} - \langle A \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \text{tr} \left(e^{-itH_0/\hbar} [B(t'), \rho_{\text{eq}}] e^{itH_0/\hbar} A \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \text{tr} \left([B(t'), \rho_{\text{eq}}] e^{itH_0/\hbar} A e^{-itH_0/\hbar} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \text{tr}([B(t'), \rho_{\text{eq}}] A(t)) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') (\text{tr}(B(t') \rho_{\text{eq}} A(t)) - \text{tr}(\rho_{\text{eq}} B(t') A(t))) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') (\text{tr}(\rho_{\text{eq}} A(t) B(t')) - \text{tr}(\rho_{\text{eq}} B(t') A(t))) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \left(\langle A(t) B(t') \rangle_{\rho_{\text{eq}}} - \langle B(t') A(t) \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \langle [A(t), B(t'),] \rangle_{\rho_{\text{eq}}}. \end{aligned} \quad (29)$$

Como las distribuciones de equilibrio son invariantes bajo traslaciones temporales

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{\rho(t)} - \langle A \rangle_{\rho_{\text{eq}}} &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' F(t') \langle [A(t-t'), B(0)] \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \\ &= \int_{t_0}^t dt' F(t') \chi_{AB}(t-t') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') \Theta(t-t') \chi_{AB}(t-t'). \end{aligned} \quad (30)$$

donde Θ es la función Heaviside si la perturbación siempre ha estado. Denotando por $\langle \hat{A}(\cdot) \rangle$ a la transformada de Fourier de $\langle A \rangle_{\rho(\cdot)} - \langle A \rangle_{\rho_{\text{eq}}}$ se tiene por el teorema de convolución que

$$\langle \hat{A}(\omega) \rangle = \chi_{AB}(\omega) \hat{F}(\omega) \quad (31)$$

ya que

$$\hat{\chi}_{AB}(\omega) = \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \chi_{AB}(t) = \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \Theta(t) \chi_{AB}(t). \quad (32)$$

1. Se tiene

$$\begin{aligned} C_{AB}(t) &= \frac{\text{tr}(e^{-\beta H_0} A(t) B)}{\text{tr}(e^{-\beta H_0})} \\ &= \sum_m \langle m | \frac{e^{-\beta H_0}}{\text{tr}(e^{-\beta H_0})} e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} B | m \rangle \\ &= \sum_m \langle m | \frac{e^{-\beta E_m}}{\text{tr}(e^{-\beta H_0})} e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} B | m \rangle \\ &= \sum_m \rho_m \langle m | e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} B | m \rangle \\ &= \sum_m \rho_m \langle m | e^{iE_m t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar} B | m \rangle \\ &= \sum_m \rho_m e^{iE_m t/\hbar} \langle m | A \sum_n | n \rangle \langle n | e^{-iH_0 t/\hbar} B | m \rangle \\ &= \sum_{mn} \rho_m e^{iE_m t/\hbar} \langle m | A | n \rangle \langle n | e^{-iE_n t/\hbar} B | m \rangle \\ &= \sum_{mn} \rho_m e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \langle m | A | n \rangle \langle n | B | m \rangle \\ &= \sum_{mn} \rho_m e^{-i\omega_{nm} t} A_{mn} B_{nm}. \end{aligned} \quad (33)$$

2. Haciendo uso de la representación del delta de Dirac en términos de ondas planas

$$\begin{aligned} \hat{C}_{AB}(\omega) &= \int_{-\infty}^\infty dt e^{i\omega t} \sum_{mn} \rho_m e^{-i\omega_{nm} t} A_{mn} B_{nm} \\ &= \sum_{mn} \rho_m A_{mn} B_{nm} \int_{-\infty}^\infty dt e^{i(\omega - \omega_{nm})t} \\ &= 2\pi \sum_{mn} \rho_m A_{mn} B_{nm} \delta(\omega - \omega_{nm}). \end{aligned} \quad (34)$$

3. Note que

$$\chi_{AB}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \text{tr}(\rho_{\text{eq}}[A(t), B]) = -\frac{1}{i\hbar}(C_{AB}(t) - \text{tr}(\rho_{\text{eq}}BA(t))). \quad (35)$$

Mediante una traslación temporal se tiene

$$\chi_{AB}(t) = -\frac{1}{i\hbar}(C_{AB}(t) - \text{tr}(\rho_{\text{eq}}B(-t)A)) = -\frac{1}{i\hbar}(C_{AB}(t) - C_{BA}(-t)). \quad (36)$$

Haciendo uso de los resultados del punto 1 se tiene

$$\begin{aligned} \chi_{AB}(t) &= -\frac{1}{i\hbar} \left(\sum_{mn} \rho_m e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} - \sum_{mn} \rho_n e^{i\omega_{mn}t} B_{nm} A_{mn} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} (\rho_m e^{-i\omega_{nm}t} - \rho_n e^{i\omega_{mn}t}) A_{mn} B_{nm} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} \rho_m \left(1 - \frac{\rho_n e^{i\omega_{mn}t}}{\rho_m e^{-i\omega_{nm}t}} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} \rho_m \left(1 - \frac{e^{i\omega_{mn}t - \beta E_n}}{e^{-i\omega_{nm}t - \beta E_m}} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} \rho_m \left(1 - \frac{e^{i\omega_{mn}t - \beta E_n}}{e^{i\omega_{mn}t - \beta E_m}} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} \rho_m \left(1 - e^{-\beta(E_n - E_m)} \right) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}). \end{aligned} \quad (37)$$

4. Note que la transformada es formalmente

$$\begin{aligned} \hat{\chi}_{AB}(\omega) &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} e^{-i\omega_{nm}t} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \int_0^\infty dt e^{i(\omega - \omega_{nm})t}. \end{aligned} \quad (38)$$

Si $\omega \in \mathbb{R}$ la integral es oscilatoria y no converge. Sin embargo, al considerar $\omega = \omega_0 + i\epsilon$ con $\epsilon > 0$ y $\omega_0 \in \mathbb{R}$ se tiene

$$-\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \int_0^\infty dt e^{i(\omega_0 - \omega_{nm})t} e^{-\epsilon t}. \quad (39)$$

El termino $e^{-\epsilon t}$ asegura la convergencia de esta integral.

5. Se tiene

$$\begin{aligned}
\hat{\chi}_{AB}(\omega) &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \int_0^\infty dt e^{i(\omega - \omega_{nm})t} \\
&= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \times \\
&\quad \frac{1}{i(\omega - \omega_{nm})} \left[e^{i(\omega_0 - \omega_{nm})t} e^{-\epsilon t} \right]_0^\infty \\
&= \frac{1}{i\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \frac{1}{i(\omega - \omega_{nm})} \\
&= -\frac{1}{\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m \frac{1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}}{\omega - \omega_{nm}}.
\end{aligned} \tag{40}$$

6. Se calcula recordando que $\rho_e q$ es autoadjunto

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2i} (\hat{\chi}_{AB}(\omega_0) - \overline{\hat{\chi}_{B^\dagger A^\dagger}(\omega_0)}) \\
&= \frac{1}{2i} \left(-\frac{1}{\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \times \right. \\
&\quad \left(P \frac{1}{\omega_0 - \omega_{nm}} - i\pi\delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \right) + \\
&\quad \frac{1}{\hbar} \sum_{mn} B_{nm}^* A_{mn}^* \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \times \\
&\quad \left. \overline{\left(P \frac{1}{\omega_0 - \omega_{nm}} - i\pi\delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \right)} \right) \\
&= \frac{1}{2i} \left(-\frac{1}{\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \times \right. \\
&\quad \left(P \frac{1}{\omega_0 - \omega_{nm}} - i\pi\delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \right) + \\
&\quad \frac{1}{\hbar} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} \rho_m (1 - e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}) \times \\
&\quad \left. \left(P \frac{1}{\omega_0 - \omega_{nm}} + i\pi\delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \right) \right)
\end{aligned} \tag{41}$$

Es claro que los coeficientes de $P \frac{1}{\omega_0 - \omega_{nm}}$ se cancelan y por lo tanto

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2i} (\hat{\chi}_{AB}(\omega_0) - \overline{\hat{\chi}_{B^\dagger A^\dagger}(\omega_0)}) \\
&= \frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta \hbar \omega_{nm}}) \delta(\omega_0 - \omega_{nm}) + \right. \\
& \quad \left. \frac{1}{\hbar} \sum_{mn} B_{nm} A_{mn} \rho_m (1 - e^{-\beta \hbar \omega_{nm}}) \delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \right) \\
&= \left(\frac{\pi}{\hbar} \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m (1 - e^{-\beta \hbar \omega_{nm}}) \delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \right) \quad (42) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} (1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}) \sum_{mn} A_{mn} B_{nm} \rho_m \delta(\omega_0 - \omega_{nm}) \\
&= \frac{\pi}{\hbar} (1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}) \frac{1}{2\pi} \hat{C}_{AB}(\omega_0) \\
&= \frac{1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}}{2\hbar} \hat{C}_{AB}(\omega_0).
\end{aligned}$$

7. Poniendo $A = B = B^\dagger = A^\dagger$ en la ecuación anterior, se observa que se está calculando $\text{Im } \hat{\chi}_{BB}(\omega_0)$ y por lo tanto

$$\text{Im } \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) = \frac{1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}}{2\hbar} \hat{C}_{BB}(\omega_0) \quad (43)$$

8. Cuando \hbar es pequeño se tiene al ignorar términos $\mathcal{O}(\hbar^2)$

$$\text{Im } \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) = \frac{1 - 1 + \beta \hbar \omega_0}{2\hbar} \hat{C}_{BB}(\omega_0) = \frac{\beta \omega_0}{2} \hat{C}_{BB}(\omega_0). \quad (44)$$

9. Se tiene con la ecuación de von Neumann y la ciclicidad de la traza

$$\begin{aligned}
\frac{dU}{dt}(t) &= \text{tr} \left(\frac{d\rho}{dt}(t) H(t) + \rho(t) \frac{dH}{dt}(t) \right) \\
&= \text{tr} \left(\frac{1}{i\hbar} [H(t), \rho(t)] H(t) + \rho(t) \frac{dH}{dt}(t) \right) \\
&= \frac{1}{i\hbar} (\text{tr}(H(t) \rho(t) H(t)) - \text{tr}(\rho(t) H(t)^2)) + \text{tr} \left(\rho(t) \frac{dH}{dt}(t) \right) \quad (45) \\
&= \frac{1}{i\hbar} (\text{tr}(\rho(t) H(t)^2) - \text{tr}(\rho(t) H(t)^2)) + \text{tr} \left(\rho(t) \frac{dH}{dt}(t) \right) \\
&= \text{tr} \left(\rho(t) \frac{dH}{dt}(t) \right) = -\frac{dF}{dt} \text{tr}(\rho(t) B) = -\frac{dF}{dt} \langle B \rangle_{\rho(t)}.
\end{aligned}$$

10. Utilizando (30) se tiene

$$\begin{aligned}
\frac{dU}{dt} &= F_0 \omega_0 \sin(\omega_0 t) \left(\int_{-\infty}^t dt' \chi_{BB}(t-t') F_0 \cos(\omega_0 t') + \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \right) \\
&= F_0 \omega_0 \sin(\omega_0 t) \int_{-\infty}^t dt' \chi_{BB}(t-t') \frac{F_0}{2} (e^{i\omega_0 t'} + e^{-i\omega_0 t'}) \\
&\quad + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t) \\
&= -F_0 \omega_0 \sin(\omega_0 t) \int_{\infty}^0 dt' \chi_{BB}(t') \frac{F_0}{2} (e^{i\omega_0(t-t')} + e^{-i\omega_0(t-t')}) \\
&\quad + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t) \\
&= \frac{F_0^2 \omega_0}{2} \sin(\omega_0 t) \int_0^{\infty} dt' \chi_{BB}(t') (e^{i\omega_0 t} e^{-i\omega_0 t'} + e^{-i\omega_0 t} e^{i\omega_0 t'}) \\
&\quad + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t) \\
&= \frac{F_0^2 \omega_0}{2} \sin(\omega_0 t) (\hat{\chi}_{BB}(-\omega_0) e^{i\omega_0 t} + \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) e^{-i\omega_0 t}) \\
&\quad + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t) \\
&= \frac{F_0^2 \omega_0}{4i} (e^{i\omega_0 t} - e^{-i\omega_0 t}) (\hat{\chi}_{BB}(-\omega_0) e^{i\omega_0 t} + \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) e^{-i\omega_0 t}) \\
&\quad + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t) \\
&= \frac{F_0^2 \omega_0}{4i} (\hat{\chi}_{BB}(-\omega_0) e^{2i\omega_0 t} + \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) e^{-2i\omega_0 t}) \\
&\quad - \hat{\chi}_{BB}(-\omega_0) - \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) e^{-2i\omega_0 t} + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t).
\end{aligned} \tag{46}$$

Notando que para $\omega_0 \in \mathbb{R}$ como χ_{BB} es real se tiene que $\hat{\chi}(-\omega_0) = \overline{\hat{\chi}(\omega_0)}$. Por lo tanto

$$\begin{aligned}
\frac{dU}{dt}(t) &= \frac{F_0^2 \omega_0}{4i} (\hat{\chi}_{BB}(\omega_0) - \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) e^{-2i\omega_0 t} \\
&\quad - \overline{\hat{\chi}_{BB}(\omega_0) - \hat{\chi}_{BB}(\omega_0) e^{-2i\omega_0 t}}) + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t) \\
&= \frac{F_0^2 \omega_0}{2} \text{Im}(\hat{\chi}_{BB}(\omega_0)(1 - e^{-2i\omega_0 t})) \\
&\quad + F_0 \langle B \rangle_{\rho_{\text{eq}}} \omega_0 \sin(\omega_0 t).
\end{aligned} \tag{47}$$

Notando que

$$\begin{aligned}
\frac{\omega_0}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega_0}} dt e^{-2i\omega_0 t} &= \frac{\omega_0}{2\pi} \frac{1}{-2i\omega_0} [e^{-2i\omega_0 t}]_{t=0}^{\frac{2\pi}{\omega_0}} = 0 \\
\frac{\omega_0}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega_0}} dt \sin(\omega_0 t) &= \frac{\omega_0}{2\pi} \frac{1}{\omega_0} [-\cos(\omega_0 t)]_{t=0}^{\frac{2\pi}{\omega_0}} = 0,
\end{aligned} \tag{48}$$

obtenemos que el promedio temporal es

$$\frac{dU}{dt} = \frac{F_0^2 \omega_0}{2} \text{Im} \hat{\chi}_{BB}(\omega_0). \tag{49}$$

Recordando (43) se obtiene

$$\frac{dU}{dt} = \frac{F_0^2 \omega_0}{4\hbar} (1 - e^{-\beta \hbar \omega_0}) \hat{C}_{BB}(\omega_0) \quad (50)$$

11. Al lado izquierdo de (50) tenemos la disipación de la energía. Al lado derecho, sin embargo, tenemos la amplitud de la correlación de B con sí mismo bajo oscilaciones de frecuencia ω_0 . Esto corresponde a las fluctuaciones debido la fuerza interactuante H_1 . De esta manera se relaciona la disipación de energía con fluctuaciones debidas a un agente externo.

3. Marcha aleatoria sobre red hipercúbica

1. Tenemos que la probabilidad de que la partícula salte de \mathbf{r} a \mathbf{r}' está dada por

$$W(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{2d} & \text{existe } \mu \in \{1, \dots, d\} \text{ tal que } \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu \\ 0 & \text{de lo contrario.} \end{cases} \quad (51)$$

Es obvio que esta es simétrica. Ya que los intervalos de tiempo están a distancia 1, las derivadas en la ecuación desarrollada en clase se reemplazan por diferencias. Así mismo, ya que el codominio de la variable aleatoria de posición es discreto, se equipa con la medida de contar y las integrales se vuelven sumas. Por lo tanto la ecuación maestra toma la forma

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r}, t+1) - P(\mathbf{r}, t) &= \\ \sum_{\mathbf{r}' \in \mathbb{Z}^d} (W(\mathbf{r}'|\mathbf{r})P(\mathbf{r}', t) - W(\mathbf{r}|\mathbf{r}')P(\mathbf{r}, t)) &= \\ \sum_{\mathbf{r}' \in \mathbb{Z}^d} W(\mathbf{r}'|\mathbf{r})(P(\mathbf{r}', t) - P(\mathbf{r}, t)) &= \\ \frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) - P(\mathbf{r}, t) + P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t) - P(\mathbf{r}, t)) &= \\ \frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) + P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t) - 2P(\mathbf{r}, t)) &= \\ \frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) + P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t)) - P(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (52)$$

Se concluye que

$$P(\mathbf{r}, t+1) = \frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) + P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t)). \quad (53)$$

2. Podemos tomar la función generatriz de $P(\mathbf{r}, \cdot + 1)$

$$\begin{aligned}
\sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t+1) &= \sum_{t=0}^{\infty} \frac{1}{z} z^{t+1} P(\mathbf{r}, t+1) = \frac{1}{z} \sum_{t=0}^{\infty} z^{t+1} P(\mathbf{r}, t+1) \\
&= \frac{1}{z} \sum_{t=1}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{z} \left(\sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t) - P(\mathbf{r}, 0) \right) \\
&= \frac{1}{z} \left(\hat{P}(\mathbf{r}, z) - P(\mathbf{r}, 0) \right).
\end{aligned} \tag{54}$$

donde $\hat{P}(\mathbf{r}, \cdot)$ es la función generatriz de $P(\mathbf{r}, \cdot)$. Tomando la transformada de Fourier de la función generatriz de $P(\mathbf{r}, \cdot + 1)$ obtenemos

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t+1) &= \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \left(\frac{1}{z} (\hat{P}(\mathbf{r}, z) - P(\mathbf{r}, 0)) \right) = \\
\frac{1}{z} \left(\sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{P}(\mathbf{r}, z) - \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \delta_{\mathbf{r}, 0} \right) &= \frac{1}{z} (\tilde{\hat{P}}(\mathbf{k}, z) - 1).
\end{aligned} \tag{55}$$

donde $\tilde{\hat{P}}(\cdot, z)$ es la transformada de Fourier de $\hat{P}(\cdot, z)$ y se utilizaron las condiciones iniciales $P(\mathbf{r}, 0) = \delta_{\mathbf{r}, 0}$. Note que

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{t=0}^{\infty} z^t \frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) + P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t)) &= \\
\frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \left(\sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) \right. \\
\left. + \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t) \right) &= \\
\frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \left(\sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{P}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, z) + \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{P}(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, z) \right) &= \\
\frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \left(\sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu)} \hat{P}(\mathbf{r}, z) + \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu)} \hat{P}(\mathbf{r}, z) \right) &= \\
\frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \left(e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu} \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{P}(\mathbf{r}, z) + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu} \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{P}(\mathbf{r}, z) \right) &= \\
\frac{1}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu}) \sum_{\mathbf{r} \in \mathbb{Z}^d} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{P}(\mathbf{r}, z) &= \\
\frac{1}{d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_\mu) \tilde{\hat{P}}(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \cos(\mathbf{k}_\mu) \tilde{\hat{P}}(\mathbf{k}, z).
\end{aligned} \tag{56}$$

Entonces por (53) se tiene que

$$\frac{1}{z} \left(\tilde{P}(\mathbf{k}, z) - 1 \right) = \frac{1}{d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \cos(\mathbf{k}_\mu) \tilde{P}(\mathbf{k}, z). \quad (57)$$

Esta ecuación es lineal en $\tilde{P}(\mathbf{k}, z)$ y su respuesta es sencillamente

$$\tilde{P}(\mathbf{k}, z) = \frac{1}{1 - \frac{z}{d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \cos(\mathbf{k}_\mu)}. \quad (58)$$

3. Ver (57).

4. Se tiene que

$$\begin{aligned} \Delta g(\mathbf{r}) &= \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (g(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu) + g(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu) - 2g(\mathbf{r})) \\ &= \lim_{z \rightarrow 1} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \left(-\hat{P}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, z) - \hat{P}(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, z) + 2\hat{P}(\mathbf{r}, z) \right) \\ &= \lim_{z \rightarrow 1} \left(2d\hat{P}(\mathbf{r}, z) - \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (\hat{P}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, z) + \hat{P}(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, z)) \right). \end{aligned} \quad (59)$$

Ahora bien

$$\begin{aligned} \hat{P}(\mathbf{r}, z) &= \sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t) = P(\mathbf{r}, 0) + \sum_{t=1}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t) \\ &= P(\mathbf{r}, 0) + \sum_{t=0}^{\infty} z^{t+1} P(\mathbf{r}, t+1) \\ &= P(\mathbf{r}, 0) + z \sum_{t=0}^{\infty} z^t P(\mathbf{r}, t+1). \end{aligned} \quad (60)$$

En vista de (53) y las condiciones iniciales se tiene

$$\begin{aligned} \hat{P}(\mathbf{r}, z) &= \delta_{\mathbf{r}, 0} + \frac{z}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \sum_{t=0}^{\infty} z^t (P(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, t) + P(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, t)) \\ &= \delta_{\mathbf{r}, 0} + \frac{z}{2d} \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (\hat{P}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, z) + \hat{P}(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, z)). \end{aligned} \quad (61)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \Delta g(\mathbf{r}) &= \lim_{z \rightarrow 1} \left(2d\delta_{\mathbf{r}, 0} + z \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (\hat{P}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, z) + \hat{P}(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, z)) \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} (\hat{P}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu, z) + \hat{P}(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu, z)) \right) = 2d\delta_{\mathbf{r}, 0} \end{aligned} \quad (62)$$

5. Note que

$$\Delta g(\mathbf{r}) = \sum_{\mu \in \{1, \dots, d\}} \frac{\frac{g(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\mu) - g(\mathbf{r})}{1} - \frac{g(\mathbf{r}) - g(\mathbf{r} - \mathbf{e}_\mu)}{1}}{1} \quad (63)$$

es una versión discreta del Laplaciano. Si $\|\mathbf{r}\|$ es mucho mayor al espaciamiento entre cada sitio, podemos aproximar al caso continuo obteniendo $\Delta g(\mathbf{r}) = 2d\delta(\mathbf{r})$, donde Δ es el Laplaciano. La solución de esta ecuación es bien conocida de la teoría del electromagnetismo. Se tiene

$$g(\mathbf{r}) \propto \begin{cases} \|\mathbf{r}\| & d = 1 \\ \ln(\|\mathbf{r}\|) & d = 2 \\ \frac{1}{r^{d-2}} & d \geq 3. \end{cases} \quad (64)$$

6. Tomando $z = 1$ en la definición de la función generatriz de F significa sumar todos los valores de F . En el caso de $P(\mathbf{r}, \cdot)$ esto corresponde a la probabilidad de que la partícula pase por \mathbf{r} en algún momento.

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.