

DONACION POR: 070115

M. ENC. ANDRES HERNANDEZ A.
C. B. I.

✓ SOBRE LA ECUACION DE LANGEVIN GENERALIZADA
TRATAMIENTO CLASICO Y CUANTICO.

TESIS QUE PRESENTA EL SR.

✓ EMILIO CORTES REYNA,

PARA LA OBTENCION DEL GRADO DE

✓ DOCTOR EN CIENCIAS

ABRIL 1986 ✓

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA-IZTAPALAPA
✓ DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA.

22.III-88 *Man. M.*

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mi mas sincero agradecimiento a la Dr Katja Lindenberg por el gran interes y estimulo que me brindo para la elaboracion de este trabajo

Deseo ademas dar mi reconocimiento a las siguientes personas:

Eliezer Braun Guitler

Rosa Maria Velazco Belmont

Magdaleno Medina Noyola

Rosalio Rodriguez

Pier A Mello Picco

por sus valiosos comentarios y sugerencias

DEDICATORIA

CON CARÍÑO PARA

ELISA

YURIRIA

AIDA

DAVID

- I INTRODUCCION
- II SISTEMAS CLASICOS CON ACOPLAMIENTO BILINEAL
- III SISTEMAS CLASICOS CON ACOPLAMIENTO CUADRATICO EN EL BAÑO
 Y LINEAL EN EL SISTEMA
- IV SISTEMAS CLASICOS CON ACOPLAMIENTO ARBITRARIO EN EL BAÑO
 Y LINEAL EN EL SISTEMA
- V SISTEMAS CUANTICOS CON ACOPLAMIENTO BILINEAL
- VI SISTEMAS CUANTICOS CON ACOPLAMIENTO CUADRATICO EN EL BAÑO
 Y LINEAL EN EL SISTEMA
- VII ECUACIONES DE LANGEVIN CUANTICAS
- VIII CONCLUSIONES
- IX APENDICE

INTRODUCCION

El estudio del relajamiento térmico de sistemas que interaccionan con un baño de calor, ha sido un tema de gran interés en la mecánica estadística en los últimos años (1-20). Para la descripción matemática de la evolución de dichos sistemas, se utilizan en ocasiones ecuaciones diferenciales estocásticas, donde los términos propiamente estocásticos representan, junto con un término de fricción, el efecto del baño sobre el sistema.

En la mayoría de los casos estas ecuaciones se han establecido de manera fenomenológica, y en algunos casos de sistemas sencillos, se han hecho derivaciones a partir de modelos microscópicos.

Las primeras ecuaciones fenomenológicas propuestas son las llamadas ecuaciones de Langevin que describen el movimiento browniano de una partícula pesada en un fluido. Para el caso de una partícula browniana en una dimensión se plantea como ecuación estocástica

$$m \ddot{u}(t) = - m \gamma \dot{u} + f(t) \quad (1.1)$$

donde m es la masa de la partícula, u su velocidad y γ un coeficiente de fricción.

El primer término del lado derecho representa la fuerza de fricción que experimenta la partícula y $f(t)$ es una fuerza

aleatoria debida a las múltiples colisiones aleatorias que sufre la partícula con las partículas del fluido.

Con el objeto de simplificar e idealizar la situación, se asume que $f(t)$ satisface dos condiciones:

(i) $f(t)$ es gaussiana

(ii) el tiempo de correlación de $f(t)$ es infinitamente corto, es decir que la función de autocorrelación de $f(t)$ tiene la forma:

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = 2\pi c \delta(t - \tau) \quad (1.2)$$

donde c es una constante y el promedio $\langle \rangle$ está tomado de acuerdo con una función de distribución de la forma

$$P(f) \sim e^{-f^2/kT} \quad (1.3)$$

Condición de equilibrio:

Ahora bien, si el movimiento browniano se lleva a cabo en equilibrio térmico a temperatura T , esto determina el valor de la constante c mediante la relación

$$c = k T m \gamma / \pi \quad (1.4)$$

de tal forma que obtenemos:

$$\int_0^\infty dz \langle f(t+z) f(t) \rangle = k T m \gamma \quad (1.5)$$

La relación (1.5) es una condición de equilibramiento del sistema con el baño térmico y se le conoce como relación de fluctuación disipación. Es una relación entre la parte sistemática de la ecuación (1.1), que representa una fuerza

de fricción. y la correlación de la fuerza aleatoria. Es decir, ambos términos representan efectos del baño sobre el sistema y deben satisfacer la ecuación de balance (1.5) para que el sistema se equilibre.

Hay otros modelos de movimiento browniano que pueden consistir por ejemplo en colocar la partícula en un campo externo, o considerar mayor número de grados de libertad, etc.; pero todos ellos con las suposiciones básicas de que el proceso sea gaussiano y markoviano.

Una generalización de estos problemas ha sido el liberar las restricciones de gaussianidad y markovianidad. Kubo (21) establece la llamada ecuación de Langevin generalizada. en la forma

$$\dot{\mathbf{x}}(t) + V(\mathbf{x}) + \int_0^t d\tau K(t-\tau) \mathbf{x}(\tau) = F(t) \quad (1.6)$$

donde estamos denotando por $\mathbf{x}$ un conjunto de variables del sistema, $V(\mathbf{x})$ una fuerza sistemática, reversible, $F(t)$ una variable fluctuante y $K(t-\tau)$ es un "kernel disipativo de memoria".

De esta manera el término de fricción ya no es una disipación instantánea, tiene una memoria que dependerá de los parámetros del baño y de la interacción. La variable estocástica $F(t)$ ya no es ruido blanco, es decir su tiempo de autocorrelación en general será finito.

A esta ecuación de Langevin generalizada debe corresponder una relación de fluctación disipación que asegure el

equilibrio; para sistemas clásicos tal relación tiene la forma:

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = k T K(t-\tau) \quad (1.7)$$

La ecuación de Langevin generalizada expresada en la ecuación (1.6) es una ecuación estocástica donde las fluctuaciones aparecen en forma aditiva y la disipación en forma lineal. Ecuaciones con fluctuaciones multiplicativas y su correspondiente disipación no lineal (22) representan otro tipo de situaciones físicas en los que la fluctuación depende del estado del sistema; la evolución de estos sistemas es en principio muy diferente de la que corresponde a sistemas con fluctuaciones aditivas y no nos ocuparemos de ellos.

Como mencionamos antes, la mayoría de estas ecuaciones de Langevin generalizadas se proponen fenomenológicamente. Se asumen propiedades estadísticas para la función $F(t)$, generalmente del tipo:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (1.8)$$

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = \phi(t-\tau) \quad (1.9)$$

lo cual implica una distribución estacionaria y se impone además la condición de equilibrio (en el caso clásico)

$$\phi(t-\tau) = k T K(t-\tau) \quad (1.10)$$

que es la relación de fluctuación disipación.

Derivacion de ecuaciones:

Existen algunas derivaciones explícitas de ecuaciones de Langevin a partir de modelos hamiltonianos microscópicos. Algunas de ellas son derivaciones muy formales (1,2,23) que llevan a ecuaciones de la forma (1.6), en donde $F(t)$ y $K(t)$ son expresiones complicadas en terminos de operadores, cuya forma explícita y dependencia en X no es fácil obtener.

En el régimen clásico se han hecho derivaciones explícitas para modelar el movimiento browniano de una partícula de masa grande M en un fluido de masas pequenas m_i (3-7). La ecuación de Langevin que se obtiene describe el movimiento de la masa M dentro del llamado límite " $\lambda^2 t$ ", lo que implica, entre otras condiciones que $m_i / M \rightarrow 0$.

Ford, Kac y Mazur (5) derivan la ecuación de Langevin para un oscilador armónico que interacciona bilinealmente con un baño de osciladores armónicos. En este trabajo obtienen las condiciones sobre los parámetros del baño y coeficientes de acoplamiento, bajo las cuales se obtiene para la evolución del sistema un comportamiento markoviano.

Recientemente hemos derivado la ecuación de Langevin en el límite de acoplamiento débil para un oscilador armónico en un baño de osciladores armónicos, en el caso en el que la interacción es lineal en la coordenada del sistema y cuadrática en las coordenadas del baño (24).

En el régimen cuántico nos encontramos con varios trabajos en los que se derivan ecuaciones estocásticas a partir de modelos microscópicos (25-28,30). Sin embargo aún falta mucho por

entender sobre los procesos de relajación de sistemas cuánticos en baños térmicos, los que en rigor, también deben ser descritos en forma cuántica.

El gran interés en los sistemas cuánticos, además del aspecto formal que encierran, está en lograr interpretar experimentos en diversas áreas como son la relajación vibracional de moléculas poliatómicas (17-20) y transporte de excitones a temperaturas bajas (29).

OBJETIVOS

Nuestro propósito en el presente trabajo es el tratar de derivar ecuaciones de Langevin generalizadas, a partir de hamiltonianos microscópicos, para distintos modelos de interacción entre sistema y baño térmico. Para el caso de interacción bilineal se han hecho este tipo de derivaciones en los regímenes clásico y cuántico, y se han obtenido las ecuaciones estocásticas, así como la relación de fluctuación disipación en forma exacta

Con la idea de explorar la posible generalización de este resultado a órdenes mas altos en la interacción, derivaremos ecuaciones estocásticas para un sistema que interacciona con un baño a distintos órdenes en las variables del baño. Estas derivaciones las haremos dentro de los regímenes clásico y cuántico. Aunque en el caso mas general de interacción que analizamos las ecuaciones se derivan en forma aproximada mediante desarrollos perturbativos, en el caso clásico podremos identificar dentro de la expresion aproximada una relación de fluctuación disipación de forma idéntica a la del caso bilineal (exacto). En el caso cuántico en cambio no se encuentra este tipo de resultado general; en general se encuentran dificultades que obscurecen la interpretación de ecuaciones de Langevin cuánticas.

Aunque este análisis sobre la derivación de ecuaciones estocásticas deba restringirse a sistemas simples, es

importante señalar que los resultados que se obtengan podrán ser de mucha utilidad en planteamientos fenomenológicos de sistemas e interacciones mas complejos

Método:

Esbozaremos el formalismo que seguiremos para la derivación de las ecuaciones

De la expresión

$$H = H_S(Q,P) + H_B(q, p) + H_{SB}(Q, \Gamma(\tilde{q}_j)) \quad (1.11)$$

queremos ir a la ecuación

$$\dot{P}(t) + V(Q) + \int_0^t dz K(t-z) P(z) = F(t) \quad (1.12)$$

donde Q y P representan cooredenadas y momentos del sistema q_j y p_j representan cooredenadas y momentos del baño y $\Gamma(\tilde{q}_j)$ es alguna función de las coordenadas del baño. En la ecuación (1,11) que representa la función hamiltoniana el primer término corresponde al sistema de interés, el segundo término corresponde al baño y el tercero es un término de interacción entre ambos. La ecuación (1 12) corresponde exactamente a la ecuación (1 6)

Para ir de (1 11) a (1 12) estamos haciendo de alguna manera, una proyección de variables a un subespacio en el que se eliminan explícitamente las variables del baño y el efecto de éste sobre el sistema queda representado por las funciones $F(t)$ y $K(t-z)$ en la ecuación estocástica

El método que seguiremos para llevar a cabo este objetivo puede plantearse mediante los pasos siguientes:

(i) Derivar las ecuaciones de movimiento para las variables del baño y resolverlas formalmente en términos de sus valores iniciales.

(ii) Derivar la ecuación de movimiento para las variables del sistema y reemplazar en ella las soluciones del baño. Así esta ecuación para el sistema contendrá las variables del baño solamente en sus valores iniciales.

(iii) Suponer que las coordenadas y momentos iniciales del baño están distribuidos de acuerdo con una distribución estadística por ejemplo la del ensamble canónico: entonces tendremos que probar que la ecuación de movimiento para las variables del sistema representa un proceso estocástico cuyas propiedades estadísticas pueden determinarse.

Lindenberg y Seshadri (22) obtuvieron el siguiente resultado para el caso de un oscilador en un baño de osciladores dentro del régimen clásico:

Si la interacción es lineal en las coordenadas del sistema se obtiene una ecuación de Langevin con fluctuaciones aditivas y disipación lineal, y si la interacción es de orden cuadrático o superior en las coordenadas del sistema entonces la ecuación de Langevin tiene fluctuaciones multiplicativas y disipación no lineal. Este resultado general se aplica igualmente al régimen cuántico.

Nuestro propósito concreto en este trabajo será investigar el comportamiento de sistemas cuya interacción con el baño sea lineal en las coordenadas del sistema y distintos órdenes en las coordenadas del baño y tratar de averiguar en que forma la ecuación de Langevin depende de los detalles de la interacción microscópica

Como los regímenes clásico y cuántico dan algunos resultados esencialmente diferentes, los trataremos por separado.

En las secciones II, III y IV consideramos el caso clásico con interacciones lineal, cuadrática y cualquier función analítica, respectivamente en las coordenadas del baño. En las secciones V y VI consideramos el caso cuántico con interacciones lineal y cuadrática, respectivamente en las coordenadas del baño. En la sección VII analizamos propiedades de las ecuaciones de Langevin cuánticas y por último en la sección VIII hacemos las conclusiones generales del presente trabajo.

II. SISTEMAS CLASICOS CON ACOPLAMIENTO BILINEAL

Hay un gran interés en los modelos microscópicos de interacción bilineal debido a que además de tener ecuaciones mas manejables, que las que corresponden a interacciones más complejas, estos modelos representan en forma adecuada interacciones débiles, es decir interacciones cuyos potenciales pueden describirse con buena aproximación expandiendo a primer orden. Este es el tipo de interacción que se tiene en la teoría de respuesta lineal.

Consideremos aquí como modelo microscópico un sistema mecánico (podría ser un oscilador) en interacción con un baño de osciladores armónicos. Este problema ha sido analizado por varios autores (5,7) y vamos a presentar aquí el desarrollo que se sigue para obtener las ecuaciones de movimiento, de acuerdo con el formalismo presentado en la introducción.

Partimos de un hamiltoniano de la forma

$$H = H_s(Q,P) + \sum_j \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} q_j^2 \right] - \lambda Q \sum_j c_j q_j \quad (2.1)$$

El primer término representa el hamiltoniano del sistema, Q y P son su coordenada y momento respectivos y estamos considerando un problema unidimensional solamente por claridad. El segundo término representa el hamiltoniano del baño, el cual consiste de un conjunto de osciladores armónicos. El subíndice j , que va desde 1 hasta N

identifica los N osciladores del baño térmico. La masa y la frecuencia de cada oscilador del baño están representados por m_j y ω_j y q_j y p_j son las coordenadas y momentos, respectivamente de cada uno de ellos. El tercer término representa la interacción entre el sistema y el baño, Γ_j son los coeficientes de acoplamiento, y λ es un parámetro arbitrario que solamente se usará para identificar los órdenes con los que interviene este término y más tarde dicho parámetro lo igualaremos a 1.

Usamos las ecuaciones de Hamilton de la mecánica y tenemos para el sistema:

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P} = P \quad (2.2)$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q} = -\frac{\partial H_s}{\partial Q} + \lambda \sum_j \Gamma_j q_j \quad (2.3)$$

y para las ecuaciones del baño:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = p_j / m_j \quad (2.4)$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} = -m_j \omega_j^2 q_j + \lambda \Gamma_j Q \quad (2.5)$$

Aquí hacemos notar que al ser el acoplamiento, lineal en las coordenadas del baño, las ecuaciones de movimiento que resultan son lineales y pueden integrarse formalmente:

$$q_j(t) = q_j(\omega) \cos \omega_j t + [p_j(\omega) / m_j \omega_j] \sin \omega_j t + \lambda \int_0^t d\tau \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j} \sin \omega_j (t-\tau) Q(\tau) \quad (2.6)$$

Ahora bien, en el término integral hacemos una integración por partes y queda el integrando proporcional a P (al final de la derivación quedará clara la necesidad de este paso).

Hecho ésto se sustituye la solución (2.6) en la ecuación de movimiento (2.3) y resulta,

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \int_0^t dz K(t-z) P(z) = F(t) \quad (2.7)$$

donde definimos

$$H^{(m)} = H_s - \lambda^2 \sum_j \frac{3}{2} \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^3} Q^2 \quad (2.8)$$

$$K(t-z) = \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^3} \cos \omega_j (t-z) \quad (2.9)$$

$$F(t) = \sum_j \Gamma_j^2 \left\{ [q_j(0) - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^3} Q(0)] \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t \right\} \quad (2.10)$$

En la expresión (2.8) si el hamiltoniano del sistema es de la forma

$$H_s = (P^2/2M) + \frac{1}{2} M \omega^2 Q^2 + \text{términos anarmónicos}$$

vemos que el nuevo término en λ^2 puede quedar incorporado como un corrimiento en la frecuencia del sistema

$$\omega' = \left[\omega^2 - \frac{3\lambda^2}{M} \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^3} \right]^{1/2}$$

La función $K(t-z)$ se identifica como el "kernel disipativo de memoria" y vemos que en este caso depende solamente de parámetros del baño y de los coeficientes de acoplamiento. Como veremos después, bajo ciertas condiciones sobre estos parámetros, la función $K(t-z)$ puede tener las propiedades de ser positiva definida y con decaimiento rápido.

Las variables del baño, que aparecen solamente en la función $F(t)$, son los valores iniciales de las coordenadas y momentos. Debido a la incertidumbre que tenemos sobre dichos valores iniciales y al gran número de esas variables, tomamos

el punto de vista de la mecánica estadística, que es el considerar un ensamble con el mismo valor de $Q(0)$ y $P(0)$, y con distintos valores $q_s(0)$ y $p_s(0)$. La manera de determinar $F(t)$ es entonces suponer una distribución inicial de los valores del baño, la cual es una distribución en el ensamble.

Ahora bien, entre las diferentes posibilidades que existen para preparar las condiciones iniciales del baño, hay dos cuyas diferencias comparamos en el apéndice (A). Una de ellas es considerar que el baño se encuentra en equilibrio inicial en ausencia del sistema y la otra, que dicho equilibrio es en presencia del sistema.

Con el objeto de lograr alguna mayor claridad en los resultados de este primer caso que analizamos, supongamos que a $t=0$ el baño está en equilibrio en presencia del sistema de acuerdo con una distribución canónica, a una temperatura T .

Por lo tanto tenemos para la distribución inicial de las variables del baño la función

$$W[\vec{q}(0), \vec{p}(0)] = Z^{-1} \exp - (H_0^{(m)}/kT) \quad (2.11)$$

donde Z es la función de partición y

$$H_0^{(m)} = \sum_s \left[\frac{p_s^2}{2m_s} + \frac{m_s \omega_s^2}{2} \left(q_s - \frac{\lambda \Gamma_s Q}{m_s \omega_s^2} \right)^2 \right] \quad (2.12)$$

Notar que en las ecuaciones (2.8) y (2.12) hemos sustraído en una y añadido en otra el término en 0, lo cual no altera

el hamiltoniano. El hamiltoniano modificado del baño puede considerarse como una transformación de coordenadas (ver apéndice), donde las nuevas coordenadas quedan referidas a las coordenadas del sistema. Notar que ésto es equivalente a reescribir el hamiltoniano en la forma

$$H = H_s^{(m)} + H_b^{(m)}$$

expresión que tiene la apariencia de estar diagonalizada. Sin embargo en las ecuaciones de movimiento estamos manejando las mismas variables sin transformar, por lo tanto las dos partes de este hamiltoniano no son independientes entre sí, y entonces no se trata de una diagonalización.

La única conveniencia de esta modificación al hamiltoniano H es el aclarar el uso de la expresión H para la distribución inicial del baño.

Mediante la función de distribución (2.11) podemos calcular promedios sobre un ensamble de diferentes condiciones iniciales del baño. Se obtienen para $F(t)$ las siguientes propiedades estadísticas:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (2.13)$$

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = kT \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos \omega_j (t - \tau) \quad (2.14)$$

donde $\langle \rangle$ denotan promedios sobre el ensamble cuya función de distribución es (2.11).

En este caso $F(t)$ es gaussiana ya que es una combinación lineal de procesos gaussianos mutuamente independientes.

Observamos también que la función de correlación depende solamente de la diferencia $t-\tau$. Esto se debe a que como el baño está en equilibrio inicial, $F(t)$ debe tener una distribución estacionaria.

De esta manera $F(t)$ se interpreta como una fuerza fluctuante, y por ser gaussiana, el proceso estocástico queda determinado completamente por las expresiones (2.13) y (2.14).

Relacion de fluctuación disipación:

De las ecuaciones (2.9) y (2.14) observamos que

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = kT K(t-\tau) \quad (2.15)$$

Notar que esta relación es válida aún si el kernel $K(t-\tau)$ no es una función positiva definida ni una función que decae. Ford, Kac y Mazur (5) establecieron las condiciones, en un modelo similar, bajo las cuales $K(t-\tau)$ se comporta como una función delta (disipación instantánea). Pueden establecerse condiciones menos restrictivas que lleven a un decaimiento rápido, además de que la función sea positiva definida.

En primer lugar, si suponemos que las frecuencias de los osciladores del baño tienen un espectro ancho y denso, podemos reemplazar la suma en la ecuación (2.9) por una integral sobre frecuencias,

$$K(t-\tau) = \int_0^\infty d\omega D(\omega) \frac{\Gamma^2(\omega)}{m\omega^2} \quad (2.16)$$

donde $D(\omega)$ es la densidad de estados.

Si ahora se escoge, por ejemplo, esta función $D(\omega)$ tal que

$$\frac{D(\omega) \Gamma^2(\omega)}{m \omega^2} = \frac{\gamma^2}{\pi (\gamma^2 + \omega^2)} \quad (2.17)$$

donde γ es una constante positiva, entonces la función $K(t-\tau)$ es positiva definida y decae en la forma

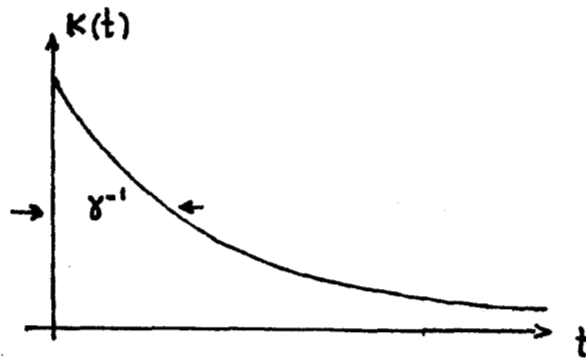
$$K(t-\tau) = \gamma e^{-\gamma|t-\tau|} \quad (2.18)$$

La constante γ en este modelo tiene el orden de magnitud de la frecuencia de Debye del baño de osciladores, es decir es un ancho de frecuencia que se introduce por el hecho de que el espectro del baño térmico decae a altas frecuencias. Es posible escoger otras formas distintas que la ecuación (2.17) para $D(\omega)$ y se obtienen entonces diferentes comportamientos para la función $K(t-\tau)$, dentro de las condiciones de que sea positiva definida y que decaiga. Sin embargo la relación (2.17) es conveniente matemáticamente. Para modelos específicos podrían requerirse otras relaciones apropiadas del tipo de (2.17).

En el límite cuando $\gamma \rightarrow \infty$ la expresión (2.18) se transforma en una función delta, lo que representa un decaimiento instantáneo.

$$K(t-\tau) = 2 \delta(t-\tau) \quad (2.18')$$

De la ecuación (2.18) vemos que γ^{-1} representa el tiempo de decaimiento de la función positiva $K(t)$, ver figura



Por lo tanto concluimos que si el kernel $K(t)$ tiene un comportamiento del tipo que se muestra en la ecuación (2.18), entonces podemos identificar la expresión (2.15) como la relación de fluctuación disipación para este sistema.

Queremos resumir los resultados de esta sección haciendo énfasis en que las relaciones (2.7) y (2.15) que reescribimos

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \int_0^t dz K(t-z) P(z) = \lambda F(t)$$

$$\langle F(t) F(z) \rangle = kT K(t-z)$$

representan la ecuación de Langevin generalizada y su correspondiente relación de fluctuación disipación, las cuales en este caso de interacción bilineal resultan ser exactas, independientes del valor del parámetro λ ; habiendo establecido la ecuación buscada, podemos ahora igualar a 1 el valor de dicho parámetro.

Es importante hacer notar, sobre todo para posteriores comparaciones con otros modelos de interacción, que en este desarrollo exacto el término fluctuante es proporcional a λ y el término disipativo es proporcional a λ^2 .

III. SISTEMAS CLASICOS CON ACOPLAMIENTO CUADRATICO EN EL BAÑO Y LINEAL EN EL SISTEMA

Este modelo de interacción tiene importancia per se en la descripción de sistemas físicos cuyo acoplamiento a un baño térmico causa dispersión (en vez de absorción o emisión) de las excitaciones del baño.

Este tipo de interacción es también de interés en la teoría de respuesta no lineal que se usa para modelar sistemas fuera de equilibrio.

Como veremos, para una interacción de esta forma aún es posible integrar las variables del baño y así eliminarlas explícitamente en la expresión para la ecuación de movimiento del sistema, siguiendo hasta ahí el mismo formalismo del caso bilineal.

Comenzamos por definir un hamiltoniano cuya diferencia con el correspondiente al caso bilineal, está en el término de interacción.

$$H = H_s(Q, P) + \sum_j \left[\frac{P_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 q_j^2}{2} \right] - \frac{\lambda}{2} Q \sum_{\mu\nu} B_{\mu\nu} q_\mu q_\nu \quad (3.1)$$

donde $B_{\mu\nu}$ son coeficientes de acoplamiento y se está usando la misma notación que en el caso bilineal. Es conveniente en este caso escalar las variables del baño, así como las constantes de acoplamiento en la forma:

$$\xi_j = P_j / \sqrt{m_j}, \quad X_j = \sqrt{m_j} \omega_j q_j, \quad \Gamma_{\mu\nu} = \frac{B_{\mu\nu}}{(m_\mu m_\nu \omega_\mu^2 \omega_\nu^2)^{1/2}} \quad (3.2)$$

el hamiltoniano en las nuevas variables queda

$$H = H_s(Q,P) + \sum_j \frac{1}{2} (\xi_j^2 + x_j^2) - \frac{\lambda}{2} Q \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} x_\mu x_\nu \quad (3.3)$$

Ecuaciones de movimiento del sistema:

$$\dot{Q} = P \quad (3.4)$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial H_s}{\partial Q} + \frac{\lambda}{2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} x_\mu x_\nu \quad (3.5)$$

Ecuaciones de movimiento para el baño:

$$\dot{x}_j = \sqrt{m_j} \omega_j \dot{q}_j = \sqrt{m_j} \omega_j \frac{\partial \xi_j}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial \xi_j} = \omega_j \xi_j \quad (3.6)$$

$$\dot{\xi}_j = \frac{\dot{p}_j}{\sqrt{m_j}} = -\frac{1}{\sqrt{m_j}} \frac{\partial x_j}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial x_j} = -\omega_j x_j + \lambda \omega_j Q \sum_{\mu} \Gamma_{j\mu} x_\mu \quad (3.7)$$

estas ecuaciones son lineales en x_j y ξ_j , como en el caso anterior, pero ahora son homogéneas y acopladas. Aunque el sistema de ecuaciones es mas complicado, puede integrarse, para lo cual definimos las matrices siguientes:

$\vec{Y}$ como una matriz columna $2N \times 1$ con elementos

$$\vec{Y} = \begin{bmatrix} x_j \\ \vdots \\ \xi_j \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

A , una matriz simétrica $N \times N$ con elementos $\Gamma_{\mu\nu}$ y $\mathcal{A}$, una matriz $2N \times 2N$ con elementos

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

$\mathbf{0}$ es la matriz CERO $N \times N$ y finalmente la matriz $\mathbf{K}$ de $2N \times 2N$

$$\bar{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\omega} \\ -\boldsymbol{\omega} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (3.10)$$

donde $\boldsymbol{\omega}$ es la matriz diagonal $N \times N$ con elementos $\omega_{\mu\nu} = \omega_{\mu} \delta_{\mu\nu}$.

En términos de estas matrices el sistema de ecuaciones (3.6) y (3.7) puede escribirse en la forma

$$\dot{\vec{Y}} = \bar{\mathbf{K}} [1 - \lambda \mathbf{A} \mathbf{Q}] \vec{Y} \quad (3.11)$$

cuya solución es

$$\vec{Y}(t) = e^{\bar{\mathbf{K}}t} \exp_{\tau} \left\{ -\lambda \int_0^t d\tau \bar{\mathbf{K}} e^{-\bar{\mathbf{K}}\tau} \mathbf{A} e^{\bar{\mathbf{K}}\tau} \mathbf{Q}(\tau) \right\} \vec{Y}(0) \quad (3.12)$$

y T denota ordenamiento en el tiempo.

Escribimos las ecuaciones para el sistema (3.4) y (3.5), en términos de estas matrices

$$\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{P} \quad (3.13)$$

$$\dot{\mathbf{P}} = -\frac{\partial H_S}{\partial \mathbf{Q}} + \lambda \mathbf{M}(t) \quad (3.14)$$

donde

$$\mathbf{M}(t) = \frac{1}{2} \vec{Y}^{\dagger}(t) \mathbf{A} \vec{Y}(t) \quad (3.15)$$

donde $\dagger$ indica traspuesta conjugada.

Sustituyendo la solución (3.12) en la ecuación (3.14) se obtiene la ecuación de movimiento, la cual es una representación exacta de la dinámica del sistema. Los valores iniciales de las variables del baño aparecen en el vector $Y(0)$.

Sin embargo esta ecuación de movimiento es complicada por dos razones. En primer lugar es una ecuación altamente no lineal en las coordenadas del sistema debido a la presencia de Q en el exponente de la ecuación (3.12). En segundo lugar, la razón de cambio de las variables del sistema al tiempo t depende de toda la historia previa del sistema. En particular resulta difícil identificar las contribuciones fluctuante y disipativa en esta ecuación de movimiento.

Para seguir adelante es necesario llevar esta ecuación a una forma aproximada que se obtiene cuando el acoplamiento entre sistema y baño es débil.

Hagamos una expansión del segundo término de la ecuación (3.14) en potencias de λ y consideremos los dos primeros términos. Identificaremos el término a orden λ como una fluctuación y veremos que el término a orden λ^2 contiene una parte disipativa proporcional a P . En efecto, probaremos que entre estos términos, se cumple una relación de fluctuación disipación al orden mas bajo en λ . Si observamos la ecuación exacta obtenida en el caso bilineal, notamos que dicha relación (RFD) se cumple entre la fluctuación, proporcional a λ , y la disipación, proporcional a λ^2 . Esto se debe obviamente a que es la

correlación de la fluctuación y no la fluctuación misma la que debe ser proporcional a la disipación.

La expansión de $M(t)$ es de la forma:

$$\lambda M(t) = \lambda M_0(t) + \lambda^2 M_1(t) + \dots \quad (3.16)$$

donde $M_0(t) \equiv \frac{1}{2} \vec{Y}^{\dagger}(0) F_0(t) \vec{Y}(0)$ (3.17)

y $M_1(t) \equiv \frac{1}{2} \vec{Y}^{\dagger}(0) [F_0(t) \chi(t) + \chi^{\dagger}(t) F_0(t)] \vec{Y}(0)$ (3.18)

En (3.17) y (3.18)

$$F_0(t) = e^{-\bar{\kappa}t} A e^{\bar{\kappa}t} \quad y \quad (3.19)$$

$$\chi(t) = - \int_0^t d\tau \bar{\kappa} F_0(\tau) Q(\tau) \quad (3.20)$$

Escribimos la ecuación de movimiento (3.14) en forma aproximada, hasta orden mas bajo en λ (consistente con el equilibrio térmico) como:

$$\dot{p} = - \frac{\partial H_s}{\partial Q} + \lambda \langle M_0(t) \rangle + \lambda [M_0(t) - \langle M_0(t) \rangle] + \lambda^2 M_1(t) + \dots \quad (3.21)$$

En la ecuación (3.21), el término $\lambda \langle M_0(t) \rangle$ lo identificaremos, al calcular el promedio, como un término dependiente de la temperatura que puede incorporarse al potencial del sistema.

Definimos

$$f(t) = M_0(t) - \langle M_0(t) \rangle \quad (3.22)$$

y lo identificamos como una fuerza fluctuante centrada en cero, cuyas propiedades estadísticas pueden determinarse. Por último $M(t)$ veremos que contiene la contribución disipativa.

Para evaluar los promedios debemos especificar el ensamble de coordenadas y momentos iniciales del baño. Escogemos entonces para la distribución inicial del baño la distribución canónica

$$P[\{x_s(0), \dot{x}_s(0)\}] = Z^{-1} \exp - (H_0/kT) \quad (3.23)$$

con esta distribución, el promedio de $M_0(t)$ es

$$\langle M_0(t) \rangle = \frac{kT}{2} \text{Tr} A \quad (3.24)$$

Por lo tanto el término $\langle M_0(t) \rangle$ que depende de la temperatura, puede en efecto incorporarse al hamiltoniano del sistema

$$H_s^{(m)} = H_s - \frac{1}{2} \lambda kT \text{Tr} A Q(t) \quad (3.25)$$

Para calcular la función de correlación usamos la propiedad siguiente:

si B es una matriz simétrica entonces, para cualquier matriz A

$$\langle \vec{Y}^+(0) A \vec{Y}(0) \vec{Y}^+(0) B \vec{Y}(0) \rangle = (kT)^2 [(\text{Tr} A)(\text{Tr} B) + 2 \text{Tr}(AB)] \quad (3.26)$$

$$\langle f(t) f(z) \rangle = \frac{1}{2} (kT)^2 \text{Tr} [F(t) F(z)] \quad (3.27)$$

Ahora bien, integremos por partes la ecuación (3.20) y obtendremos un integrando proporcional a P

$$\chi(t) = - \left[\bar{K} G(z) Q(z) \right]_0^t + \int_0^t dz \bar{K} G(z) P(z) \quad (3.28)$$

donde definimos $G(z)$ tal que,

$$F_0(z) = \frac{dG(z)}{dz} \quad (3.29)$$

con lo cual $M(t)$ se puede escribir en la forma

$$M_1(t) = H(t) + \frac{1}{2} \int_0^t dz K_f(t, z) P(z) \quad (3.30)$$

donde

$$H(t) = \frac{1}{2} \vec{Y}^{\dagger}(0) \left\{ -F_0(t) \bar{K} [G(z) Q(z)]_0^t + [G(z) Q(z)]_0^t \bar{K} F_0(t) \right\} \vec{Y}(0) \quad (3.31)$$

la identificamos como una fluctuación a orden λ^2 , y

$$K_f(t, z) = \vec{Y}^{\dagger}(0) [F_0(t) \bar{K} G(z) - G(z) \bar{K} F_0(t)] \vec{Y}(0) \quad (3.32)$$

lo identificamos como un "kernel fluctuante", ya que depende de las condiciones iniciales del baño. Promediando este kernel podemos escribir para $M_1(t)$

$$M_1(t) = \frac{1}{2} \int_0^t dz \langle K_f(t, z) \rangle P(z) + H(t) + \frac{1}{2} \delta \int_0^t dz K_f(t, z) P(z) \quad (3.33)$$

donde $\delta \int_0^t dz K_f(t, z) P(z)$

es también una fluctuación a orden λ^2 .

Finalmente se demuestra la relación

$$\langle M_0(t) M_0(z) \rangle = kT \langle K_f(t, z) \rangle \quad (3.34)$$

que es la relación de fluctuación disipación al orden más bajo en λ .

Resumimos los resultados de esta sección:

$$\dot{Q}(t) = P(t)$$

$$\dot{P}(t) = -\frac{\partial H_s^{(m)}}{\partial Q} + \lambda f(t) - \lambda^2 \int_0^t d\tau K(t-\tau) P(\tau) \quad (3.35)$$

$$f(t) = \frac{1}{2} \vec{Y}^*(0) F_0(t) \vec{Y}(0) - \frac{kT}{2} \text{Tr } A$$

$$K(t-) = \langle K_f(t, \tau) \rangle$$

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = kT K(t-\tau) \quad (3.36)$$

Hemos obtenido en (3.35) y (3.36) una ecuación de Langevin generalizada aproximada y su correspondiente relación de fluctuación disipación para un sistema que interacciona con un baño, en forma cuadrática en las coordenadas del baño, lineal en el sistema y dentro del régimen de acoplamiento débil.

Finalmente, de las ecuaciones obtenidas, bajo condiciones apropiadas en las frecuencias del baño térmico y en los coeficientes de acoplamiento (similares a las del caso bilineal), la disipación puede ser instantánea y por lo tanto las fluctuaciones tener correlación delta,

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = 2 kT \lambda \delta(t-\tau)$$

y entonces la ecuacion (3.35) toma la forma usual que describe al movimiento browniano

$$\dot{P}(t) = -\frac{\partial H_s}{\partial Q} - \lambda P(t) + f(t) .$$

IV. SISTEMAS CLASICOS CON ACOPLAMIENTO ARBITRARIO EN EL BAÑO Y LINEAL EN EL SISTEMA

Con el propósito de generalizar el análisis de la sección anterior para incluir en el acoplamiento potencias mas altas en las coordenadas del baño, queremos considerar aquí un término de interacción que ahora sea cualquier función analítica del conjunto de coordenadas del baño, y al igual que en los otros casos, lineal en la coordenada del sistema. En este caso las ecuaciones para el baño no pueden integrarse en forma cerrada y emplearemos entonces un desarrollo perturbativo, lo que nos obligará a restringirnos a un régimen de acoplamiento débil.

Consideremos el hamiltoniano

$$H = H_s(Q,P) + \sum_j \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 q_j^2}{2} \right] - \lambda Q \Gamma(\tilde{q}) \quad (4.1)$$

En este caso λ es otra vez un parámetro de intensidad de acoplamiento, y $\Gamma(\tilde{q})$ suponemos que es una función analítica del conjunto de coordenadas q_j . A este conjunto lo denotamos mediante $\tilde{q}$.

Ecuaciones del sistema:

$$\dot{Q} = P \quad (4.2)$$

$$\dot{P} = - \frac{\partial H_s}{\partial Q} + \lambda \Gamma(\tilde{q}) \quad (4.3)$$

Ecuaciones del baño:

$$\dot{q}_j = p_j / m_j \quad (4.4)$$

$$\dot{p} = -m_j \omega_j^2 q_j + \lambda Q \Gamma_j(\tilde{q}) \quad (4.5)$$

donde $\Gamma_j(\tilde{q})$ denota $\frac{d}{dq_j} \Gamma(\tilde{q})$.

La integración formal de las ecuaciones (4.4) y (4.5) nos da

$$q_j(t) = q_j(0) \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t + \lambda \int_0^t dz \sin \omega_j(t-z) \Gamma_j(\tilde{q}) Q(z) \quad (4.6)$$

Esta es una ecuación integral que para resolverla consideraremos, como en el caso cuadrático, un régimen de "acoplamiento débil" y emplearemos aquí un desarrollo perturbativo en λ .

Definimos

$$q_j^0 = q_j(0) \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t \quad (4.7)$$

como la función $q_j(t)$ a orden cero en λ .

Por lo tanto escribimos

$$q_j(t) \approx q_j^0(t) + \lambda \int_0^t dz \frac{\sin \omega_j(t-z)}{m_j \omega_j} \Gamma_j(\tilde{q}^0(z)) Q(z) \quad (4.8)$$

y puesto que $\Gamma(\tilde{q})$ es función analítica, podemos expandirla en serie de Taylor:

$$\Gamma(\tilde{q}) \approx \Gamma(\tilde{q}^0) + \lambda \sum_j \Gamma_j(\tilde{q}^0) \int_0^t dz \frac{\sin \omega_j(t-z)}{m_j \omega_j} \Gamma_j(\tilde{q}^0(z)) Q(z) \quad (4.9)$$

Sustituimos la expresión (4.9) en la ecuación (4.3) y obtenemos

$$\dot{P} = -\frac{\partial H_s}{\partial Q} + \lambda \Gamma(\tilde{q}^0) + \lambda^2 \sum_j \Gamma_j(\tilde{q}^0) \int_0^t \frac{\sin \omega_j(t-z)}{m_j \omega_j} \Gamma_j(\tilde{q}^0(z)) Q(z) + \dots \quad (4.10)$$

Notamos aquí que los valores iniciales de las variables del baño aparecen en todos los términos, en las distintas potencias de λ ; por tanto debemos analizar cuidadosamente los distintos términos para identificar apropiadamente la parte fluctuante y la parte disipativa.

$$\text{Definimos } F(t) \equiv \Gamma(\tilde{q}^0) \quad (4.11)$$

y esta $F(t)$ es desde luego una fluctuación a orden λ . Retendremos fluctuaciones hasta este orden, en la misma forma que lo hicimos para el acoplamiento cuadrático.

Definimos mediante $M(t)$ el otro término de la ecuación (4.10),

$$M(t) = \sum_j \Gamma_j(\tilde{q}^0) \int_0^t \frac{\sin \omega_j(t-z)}{m_j \omega_j} \Gamma_j(\tilde{q}^0(z)) Q(z) \quad (4.12)$$

Este término contiene la contribución disipativa, así como otras partes fluctuantes, todos ellos de orden λ^2 .

Definamos la función

$$G(t, z) = \int_0^z dz' \Gamma_j(\tilde{q}^0(z')) \frac{\sin \omega_j(t-z')}{m_j \omega_j} \quad (4.13)$$

por lo tanto podemos escribir

$$M(t) = \sum_j \Gamma_j(\tilde{q}^0(t)) \int_0^t dz \frac{dG(t, z)}{dz} Q(z) =$$

$$= \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma}(\tilde{q}^0(t)) G(t, z) \Big|_0^t - \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma}(\tilde{q}^0(t)) \int_0^t dz G(t, z) P(z) \quad (4.14)$$

el término integral podemos escribirlo en la forma

$$\sum_{\gamma} \int_0^t dz \langle \Gamma_{\gamma}(\tilde{q}^0(t)) G(t, z) \rangle P(z) + \delta \sum_{\gamma} \int_0^t dz \Gamma_{\gamma}(\tilde{q}^0(t)) G(t, z) P(z) \quad (4.15)$$

donde

$$K_{\gamma}(t, z) \equiv \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma}(\tilde{q}^0(t)) G(t, z) \quad (4.16)$$

es un "kernel fluctuante" ya que depende de las condiciones iniciales del baño. Los otros términos de la ecuación (4.14), así como el segundo término del lado derecho de la ecuación (4.15) representan fluctuaciones de orden λ^2 .

Para calcular promedios suponemos una distribución canónica inicial para el baño, en ausencia del sistema

$$P[\tilde{q}(0), \tilde{p}(0)] = Z^{-1} \exp - (H_0/kT) \quad (4.17)$$

Es posible que en este caso obtengamos

$$\langle F(t) \rangle \neq 0 \quad (4.18)$$

dependiendo de la función $\Gamma(\tilde{q}^0)$. Si ello ocurre podemos redefinir la fluctuación.

$$Y(t) = F(t) - \langle F(t) \rangle \quad (4.19)$$

para hacerla centrada en cero.

Finalmente se demuestra que la función de correlación de (4.11) esta relacionada con el promedio de (4.16) mediante la expresión

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = kT \langle K_f(t, \tau) \rangle \quad (4.20)$$

que es la relación de fluctuación disipación a orden mas bajo.

Lo que hemos obtenido aquí es una generalización del caso de interacción cuadrática. En este caso la ecuación (4.10) representa la ecuación de Langevin aproximada para una interacción que es un polinomio en las coordenadas del baño. Este resultado nos permite hacer la conjetura de que en el régimen clásico la ecuación de Langevin generalizada de la forma (1.6) representa toda una familia de interacciones entre sistema y baño de la forma lineal en las coordenadas del sistema y cualquier función analítica en las coordenadas del baño dentro de un régimen de "acoplamiento debil".

Hacemos notar que en este desarrollo perturbativo no podemos garantizar que la ecuación de Langevin aproximada a primer orden en las fluctuaciones y segundo orden en la disipación, describe efectivamente la evolución del sistema; para ello tendríamos que hacer una estimación de la magnitud de los términos desechados; hemos demostrado sin embargo la existencia de una relación de fluctuación disipación al orden mas bajo en el parámetro de acoplamiento para un tipo de interacción general, manteniendo la linealidad en las coordenadas del sistema.

V SISTEMAS CUANTICOS CON ACOPLAMIENTO BILINEAL

Consideremos un hamiltoniano similar al del caso clásico correspondiente, que en el caso cuántico tiene la forma:

$$H = H_s(a^\dagger, a) + \sum_j \hbar \omega_j b_j^\dagger b_j - \lambda (a^\dagger + a) \sum_j \Gamma_j (b_j^\dagger + b_j) \quad (5.1)$$

donde ahora $a^\dagger$ y a son operadores de creación y aniquilación que representan al sistema; $b_j^\dagger$ y b_j son operadores de creación y aniquilación que satisfacen la estadística de Bose-Einstein y que representan al baño de osciladores. Todos estos operadores satisfacen las reglas de conmutación siguientes:

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad ; \quad [b_j, b_{j'}^\dagger] = \delta_{jj'} \quad (5.2)$$

De nuevo Γ_j son coeficientes de acoplamiento y λ es un parámetro de intensidad de acoplamiento.

Como en los casos clásicos el baño también está representado por un conjunto de osciladores armónicos y por ser otra vez un sistema mecánico consideramos un término de interacción bilineal en las coordenadas. La coordenada del sistema esta representada por el operador $a^\dagger + a$ y las coordenadas del baño por los operadores $b_j^\dagger + b_j$.

De acuerdo con la representación de Heisenberg establecemos las ecuaciones de movimiento para los distintos operadores

Ecuaciones para el sistema:

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar} [H, a] = \frac{i}{\hbar} [H_s, a] + \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_j \Gamma_j (b_j^+ + b_j) \quad (5.3)$$

y una ecuación similar para a^+

Ecuaciones para el baño:

$$\dot{b}_j^+ = i\omega_j b_j^+ - \frac{i}{\hbar} \lambda (a^+ + a) \Gamma_j \quad (5.4)$$

$$\dot{b}_j = -i\omega_j b_j + \frac{i}{\hbar} \lambda (a^+ + a) \Gamma_j \quad (5.5)$$

La solución formal de estas ecuaciones es

$$b_j^+(t) = e^{i\omega_j t} \left[b_j^+(\omega) - \frac{i}{\hbar} \lambda \Gamma_j \int_0^t dt' e^{-i\omega_j t'} [a^+(t') + a(t')] \right] \quad (5.6)$$

$$b_j(t) = e^{-i\omega_j t} \left[b_j(\omega) + \frac{i}{\hbar} \lambda \Gamma_j \int_0^t dt' e^{i\omega_j t'} [a^+(t') + a(t')] \right] \quad (5.7)$$

sumando ambas expresiones obtenemos el operador:

$$B_j = b_j^+ + b_j = e^{i\omega_j t} b_j^+(\omega) + e^{-i\omega_j t} b_j(\omega) + \frac{2\lambda \Gamma_j}{\hbar} \int_0^t dt' [a^+(t') + a(t')] \sin \omega_j (t-t') \quad (5.8)$$

El operador $a^+ + a$ es la coordenada del sistema: si integramos por partes en la misma forma en que se hizo en los otros casos tendremos la derivada de la coordenada en el integrando

$$\ddot{a} + a = \frac{i}{\hbar} [H_s, (a^+ + a)]$$

Integrando por partes se obtiene

$$B_v = f_v(t) + \frac{2\lambda\Gamma_v}{\hbar\omega_v} [a^\dagger(t) + a(t)] - \frac{2\lambda\Gamma_v}{\hbar\omega_v} [a^\dagger(\omega) + a(\omega)] \cos \omega_v t \\ - (2\lambda\Gamma_v/\hbar\omega_v) \int_0^t dt' [\dot{a}^\dagger(t') + \dot{a}(t')] \cos \omega_v (t-t') \quad (5.9)$$

con el operador

$$f_v(t) = e^{i\omega_v t} b_v^+(\omega) + e^{-i\omega_v t} b_v(\omega) \quad (5.10)$$

Es importante hacer notar aquí que esta variable que será identificada como la fluctuación, es un operador que no conmuta con los operadores del sistema es decir

$$[f(t), a(t)] \neq 0, \quad t \neq 0 \quad (5.11)$$

Sustituimos ahora la ecuación (5.9) en la ecuación (5.3) y se tiene:

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar} [H_0, a] + \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_v \Gamma_v f_v(t) + \frac{2i}{\hbar} \lambda^2 \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{\omega_v} [a^\dagger(t) + a(t)] \\ - \frac{2i}{\hbar} \lambda^2 \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{\omega_v} [a^\dagger(\omega) + a(\omega)] \cos \omega_v t \\ - \frac{2i}{\hbar} \lambda^2 \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{\omega_v} \int_0^t dt' [\dot{a}^\dagger(t') + \dot{a}(t')] \cos \omega_v (t-t') \quad (5.12)$$

El término en $\lambda^2 (a^\dagger + a)$ puede incorporarse como en el caso clásico, al hamiltoniano del sistema. Definimos el operador

$$F(t) = \sum_v \Gamma_v f_v(t) \quad (5.13)$$

y corresponde a la fluctuación

El siguiente término puede escribirse en la forma

$$\sum_v \frac{\Gamma_v^2}{\omega_v} \cos \omega_v t [a^\dagger(\omega) + a(\omega)] \equiv K(t) [a^\dagger(\omega) + a(\omega)] \quad (5.14)$$

$$\text{donde } K(t-z) = \sum_v \frac{\Gamma_v^2}{\omega_v} \cos \omega_v (t-z) \quad (5.15)$$

y la ecuación para a queda en la forma

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar} [H_0^{(m)}, a] + \frac{i}{\hbar} \lambda F(t) - \frac{2i}{\hbar^2} \lambda^2 K(t) [a^\dagger(t) + a(t)] - \frac{2i}{\hbar^2} \lambda^2 \int_0^t dt' K(t-t') [\dot{a}^\dagger(t') + \dot{a}(t')] \quad (5.16)$$

Ahora bien si $K(t)$ es una función que decae rápidamente entonces la contribución del término $\int_0^t dt' K(t-t') [\dot{a}^\dagger(t') + \dot{a}(t')]$ representa un corrimiento en las condiciones iniciales de la solución de la ecuación (5.16) (ver apéndice B) y la dinámica del sistema será esencialmente la misma si eliminamos este término y escribimos la ecuación de movimiento en la forma:

$$\dot{a}(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0^{(m)}, a] + \frac{i}{\hbar} \lambda F(t) - \frac{2i}{\hbar^2} \lambda^2 \int_0^t dt' K(t-t') [\dot{a}^\dagger(t') + \dot{a}(t')] \quad (5.17)$$

Para elegir la condición inicial de equilibrio del baño ya sea en ausencia o en presencia del sistema es importante hacer notar aquí que en el caso cuántico si queremos elegir la segunda posibilidad nos encontramos con dificultades de interpretación de ciertos términos debido a que ahora estamos manejando operadores. Es decir podemos definir en principio como se hizo en el caso clásico equivalente el operador que representa la fluctuación en la forma:

$$F'(t) = \sum_j \Gamma_j \left\{ [b_j^\dagger(t) - \frac{i\lambda}{\hbar^2} \Gamma_j [a^\dagger(t) + a(t)]] e^{i\omega_j t} + [b_j(t) - \frac{i\lambda}{\hbar^2} \Gamma_j [a^\dagger(t) + a(t)]] e^{-i\omega_j t} \right\} \quad (5.18)$$

donde estamos incorporando a la fluctuación el término en $a^\dagger(t) + a(t)$ de la ecuación (5.16). Sin embargo no es claro el significado de este corrimiento en los operadores iniciales

del baño. Tomaremos entonces como condición inicial el equilibrio del baño en ausencia del sistema

Por lo tanto suponemos para el baño una distribución inicial canónica y calculamos valores de espectación de operadores a temperatura T mediante la expresión:

$$\langle F \rangle = \text{Tr} \{ F \exp -\beta H_0 \} / \text{Tr} \{ \exp -\beta H_0 \} \quad (5.19)$$

Calculando los momentos resulta:

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (5.20)$$

$$\langle F(t) F(z) + F(z) F(t) \rangle = \sum_v \phi_v(t-z) \quad (5.21)$$

con

$$\phi_v(t-z) = \frac{2\Gamma_v^2}{\hbar^2} \cos \omega_v(t-z) \coth \frac{\hbar \omega_v}{2kT} \quad (5.22)$$

En la expresión (5.21) estamos usando la forma simetrizada con la cual obtenemos un valor real para el promedio; además como $F(t)$ y $F(z)$ no conmutan la función de autocorrelación simetrizada es independiente del orden de los operadores

Se obtiene además la relación siguiente:

$$\sum_v \phi_v(t-z) \frac{\tanh(\hbar \omega_v/2kT)}{\hbar \omega_v} = K(t-z) \quad (5.23)$$

esta relación que es exacta para este caso de acoplamiento bilineal es un balance entre la correlación $\phi(t-z)$ y el kernel $K(t-z)$ aún antes de añadir otras suposiciones sobre

las funciones K y ϕ como son las condiciones para decaimiento rápido

De esta forma la ecuación (5.23) es la expresión general para la relación de fluctuación disipación para este modelo hamiltoniano. Sin embargo tanto esta relación como las condiciones de decaimiento de la función de correlación muestran características diferentes de las observadas en sistemas clásicos

Es importante senalar que dichas diferencias con el regimen clásico se ponen de manifiesto aún en este caso de interacción bilineal

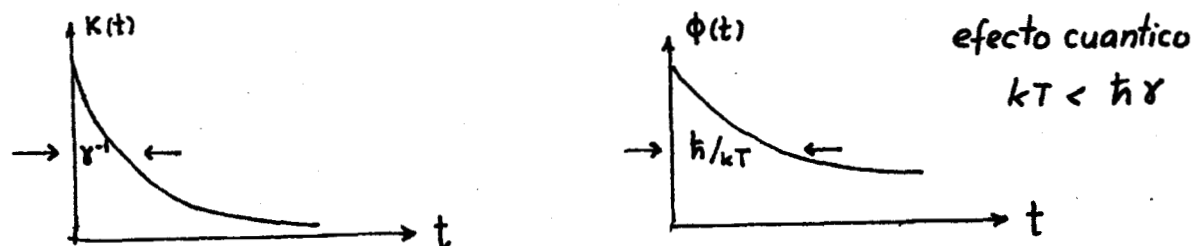
En primer lugar se observa que la relación cuántica de fluctuación disipación, ecuación (5.22) requiere un conocimiento explícito del espectro de frecuencias del baño mientras que en el régimen clásico solamente la temperatura del baño aparece explícitamente

Por otro lado a temperaturas no muy altas en general aparecen distintas escalas de tiempo para las fluctuaciones y para la disipación. A temperaturas muy altas si $kT \gg \hbar\omega$ o bien si $\hbar \rightarrow 0$ se obtiene de las ecuaciones (5.15) y (5.22)

$$\phi(t-\tau) = \sum_j \phi_j(t-\tau) = kT K(t-\tau) \quad (5.24)$$

que es precisamente el límite clásico. En este caso ambos $\phi(t-\tau)$ y $K(t-\tau)$ decaen en una escala de tiempo del orden de γ^{-1}

Sin embargo, a temperaturas más bajas, por ejemplo si $kT \lesssim \hbar\gamma$ se encuentra, de (5.15) y (5.22) que mientras que $K(t-\tau)$ decae en un tiempo del orden de γ^{-1} , la función de correlación $\phi(t-\tau)$ decae ahora en un tiempo que es el mayor entre $\hbar/kT$ y γ^{-1} . Por lo tanto si la temperatura es suficientemente baja, tal que $kT < \hbar\gamma$ entonces el tiempo de decaimiento de $\phi(t-\tau)$ será del orden de $\hbar/kT$, que es mayor que el tiempo de disipación; ver figura



La razón física de este efecto cuántico es que por un lado el baño siempre puede disipar excitaciones del sistema en todo su rango de energías $(0, \hbar\gamma)$ (γ es la frecuencia de corte del baño), pero el propio baño puede producir energía, la cual puede absorber el sistema (fluctuaciones espontaneas), hasta un valor que es el menor entre kT y $\hbar\gamma$.

Por lo tanto si $kT \gg \hbar\gamma$, ambas, disipación y correlación decaen en una escala de tiempo γ^{-1} ... Pero si $kT < \hbar\gamma$ entonces $K(t-\tau)$ decae con γ^{-1} y $\phi(t-\tau)$ decae con $\hbar/kT$.

VI SISTEMAS CUANTICOS CON ACOPLAMIENTO CUADRATICO EN EL BAÑO Y LINEAL EN ESISTEMA

Así como en el caso clásico correspondiente aquí también es posible integrar formalmente las ecuaciones de movimiento del baño y eliminar así explícitamente esas variables. Sin embargo ahora como veremos, los resultados que se obtienen en cuanto a las (RFD) son sensibles a los detalles de la interacción; desarrollaremos dos modelos diferentes de interacción cuadrática en las variables del baño

Primer modelo:

Consideremos un hamiltoniano de la forma

$$H = H_s(a^\dagger, a) + \sum_{\mu, \nu} \hbar \omega_{\mu} b_{\mu}^\dagger b_{\nu} - \lambda (a^\dagger + a) \sum_{\mu, \nu} \Gamma_{\mu\nu} b_{\mu}^\dagger b_{\nu} \quad (6.1)$$

donde estamos usando exactamente la notación de la sección anterior. Por la forma de la interacción estamos considerando aquí un sistema no mecánico, esto es por el producto de los operadores $b_{\mu}^\dagger b_{\nu}$ y el motivo es solamente por simplicidad en el desarrollo matemático

Ecuaciones del sistema:

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar} [H_s, a] + \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\mu, \nu} \Gamma_{\mu\nu} b_{\mu}^\dagger b_{\nu} \quad (6.2)$$

y una ecuación similar para $a^\dagger$

Ecuaciones del baño:

$$\dot{b}_r^+ = i\omega_r b_r^+ - \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\mu} \Gamma_{r\mu} b_{\mu}^+ (a^+ + a) \quad (6.3)$$

$$\dot{b}_r = -i\omega_r b_r + \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\mu} \Gamma_{r\mu} b_{\mu} (a^+ + a) \quad (6.4)$$

Estas ecuaciones son lineales y es posible integrarlas formalmente para obtener

$$b_r^+(t) = e^{i\omega_r t} \left[b_r^+(\omega) - \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\mu} \Gamma_{r\mu} \int_0^t dt' e^{-i\omega_r t'} Q(t') b_{\mu}^+(t') \right] \quad (6.5)$$

$$b_r(t) = e^{-i\omega_r t} \left[b_r(\omega) + \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\mu} \Gamma_{r\mu} \int_0^t dt' e^{i\omega_r t'} b_{\mu}(t') Q(t') \right] \quad (6.6)$$

donde estamos introduciendo por comodidad el operador

$$Q(t) = a^+(t) + a(t) \quad (6.7)$$

que representa la coordenada del sistema.

Notar que en las ecuaciones (6.5) y (6.6) estamos escribiendo los operadores $Q b_{\mu}^+$ y $b_{\mu} Q$ en distinto orden. Dicho producto solo conmuta a iguales tiempos y sólo por conveniencia en el desarrollo posterior los hemos escrito en esa forma en dichas ecuaciones.

Las ecuaciones (6.5) y (6.6) son ecuaciones integrales y para expresar la solución haremos, al igual que en el caso clásico equivalente, un desarrollo perturbativo en potencias de λ . Esto nos limita a un régimen de acoplamiento débil en la misma forma que en el caso clásico.

Escribimos entonces las soluciones perturbativas de las ecuaciones (6.5) y (6.6):

$$\begin{aligned}
 b_{\mu}^{+}(t) &= e^{i\omega_{\mu}t} b_{\mu}^{+}(0) - \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\alpha} \Gamma_{\mu\alpha} \int_0^t dt' e^{i\omega_{\mu}(t-t')} Q(t') b_{\alpha}^{+0}(t') + O(\lambda^2) \\
 &= b_{\mu}^{+0} + \lambda b_{\mu}^{+1} + \dots
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

donde

$$b_{\mu}^{+0} \equiv e^{i\omega_{\mu}t} b_{\mu}^{+}(0) \tag{6.9}$$

$$b_{\mu}^{+1} \equiv -\frac{i}{\hbar} \sum_{\alpha} \Gamma_{\mu\alpha} \int_0^t dt' e^{i\omega_{\mu}(t-t')} Q(t') b_{\alpha}^{+0}(t') \tag{6.10}$$

$$\begin{aligned}
 b_{\nu}(t) &= e^{-i\omega_{\nu}t} b_{\nu}(0) + \frac{i}{\hbar} \lambda \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma\nu} \int_0^t dt' e^{-i\omega_{\nu}(t-t')} b_{\gamma}^{0}(t') Q(t') + O(\lambda^2) \\
 &= b_{\nu}^0 + \lambda b_{\nu}^1 + \dots
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

donde

$$b_{\nu}^0 \equiv e^{-i\omega_{\nu}t} b_{\nu}(0) \tag{6.12}$$

$$b_{\nu}^1 \equiv \frac{i}{\hbar} \sum_{\gamma} \Gamma_{\gamma\nu} \int_0^t dt' e^{-i\omega_{\nu}(t-t')} b_{\gamma}^0(t') Q(t') \tag{6.13}$$

Regresando a las ecuaciones del sistema en la ecuacion (6.2) y en su transpuesto hermitiano tenemos el termino de la forma $\sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} b_{\mu}^{+} b_{\nu}$, el cual puede escribirse

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} b_{\mu}^{+} b_{\nu} &= \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} (b_{\mu}^{+0} + \lambda b_{\mu}^{+1}) (b_{\nu}^0 + \lambda b_{\nu}^1) + \dots \\
 &= \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} b_{\mu}^{+0} b_{\nu}^0 + \lambda \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} (b_{\mu}^{+0} b_{\nu}^1 + b_{\mu}^{+1} b_{\nu}^0) + O(\lambda^2)
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

Definimos

$$M_0(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} b_{\mu}^{+0} b_{\nu}^0 \tag{6.15}$$

el cual lo relacionaremos con la fluctuacion a orden más bajo, $O(\lambda)$ y retendremos fluctuaciones solo hasta este

orden. En general obtendremos que $\langle M_0(t) \rangle \neq 0$ y definimos entonces

$$F(t) = M_0(t) - \langle M_0(t) \rangle \quad (6.16)$$

como la fluctuación la cual ahora sí es centrada en cero.

Definimos

$$M_1(t) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} (b_{\mu}^{+0} b_{\nu}^{\cdot} + b_{\mu}^{+1} b_{\nu}^{\cdot 0}) \quad (6.17)$$

este término de $O(\lambda^2)$ contiene la disipación así como otras fluctuaciones de $O(\lambda^2)$

Susituyendo b_{μ}^{+0} , $b_{\nu}^{\cdot}$, b_{μ}^{+1} y $b_{\nu}^{\cdot 0}$ de las expresiones (6.9), (6.10), (6.12) y (6.13) en (6.16) resulta:

$$M_1(t) = \frac{i}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} \left\{ e^{i\omega_{\mu}t} \sum_{\lambda} \Gamma_{\lambda\nu} \int_0^t dt' e^{-i\omega_{\nu}(t-t')} e^{-i\omega_{\lambda}t'} b_{\mu}^{+}(\omega) b_{\lambda}(\omega) Q(t') \right. \\ \left. - e^{-i\omega_{\nu}t} \sum_{\lambda} \Gamma_{\mu\lambda} \int_0^t dt' e^{i\omega_{\mu}(t-t')} e^{i\omega_{\lambda}t'} Q(t') b_{\mu}^{+}(\omega) b_{\lambda}(\omega) \right\} \quad (6.18)$$

Ahora bien al suponer como en el caso cuántico bilineal una distribución inicial canónica para las variables del baño (en ausencia del sistema) tenemos que evaluar los promedios de las diferentes variables usando la relación

$$\langle b_{\mu}^{+}(0) b_{\lambda}(0) \rangle = n_{\mu} \delta_{\mu\lambda} \quad (6.19)$$

donde n es el factor de población de Bose

Ahora integramos por partes en la forma en que lo hemos hecho en otros casos, ya que el integrando de $M(t)$, en (6.18), es proporcional a Q (la coordenada del sistema),

$$M_1(t) = H(t) - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu, \eta} \frac{\Gamma_{\mu\nu} \Gamma_{\eta\nu}}{\omega_\nu - \omega_\eta} e^{i(\omega_\mu - \omega_\nu)t} \left\{ \int_0^t dt' e^{i(\omega_\nu - \omega_\eta)t'} b_{\mu}^+(0) b_{\eta}(0) \dot{Q}(t') \right. \\ \left. + \int_0^t dt' e^{-i(\omega_\mu - \omega_\eta)t'} \dot{Q}(t') b_{\eta}^+(0) b_{\nu}(0) \right\} \quad (6.20)$$

donde H es una función que depende de Q , $Q(0)$ y de las condiciones iniciales del baño.

Definimos

$$K_f(t, \tau) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu, \eta} \frac{\Gamma_{\mu\nu} \Gamma_{\eta\nu}}{\omega_\nu - \omega_\eta} e^{i(\omega_\mu - \omega_\nu)t} e^{-i(\omega_\mu - \omega_\eta)\tau} b_{\eta}^+(0) b_{\nu}(0) \quad (6.21)$$

y lo identificamos como un "kernel fluctuante".

Para la función de correlación tenemos la forma simetrizada

$$\Phi(t-\tau) = \langle F(t) F(\tau) + F(\tau) F(t) \rangle \quad (6.22)$$

Ahora bien, de la definición de F , ecuación (6.16) tenemos:

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = \langle M_0(t) M_0(\tau) \rangle - \langle M_0 \rangle^2 \quad (6.23)$$

y de la ecuación (6.15)

$$\langle M_0(t) M_0(\tau) \rangle = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu, \eta, \nu, \xi} \Gamma_{\mu\nu} \Gamma_{\eta\xi} \langle b_{\mu}^{+0}(t) b_{\nu}^{0}(t) b_{\eta}^{+0}(\tau) b_{\xi}^{0}(\tau) \rangle \quad (6.24)$$

sustituyendo estos operadores por sus definiciones, ecuaciones (6.9) y (6.12) se obtiene

$$\langle M_o(t) M_o(z) \rangle = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} [\Gamma_{\mu\nu} \Gamma_{\nu\mu} n_\mu n_\nu + \Gamma_{\mu\nu}^2 e^{i(\omega_\mu - \omega_\nu)(t-z)} n_\mu (n_\nu + 1)] \quad (6.25)$$

por otro lado

$$\langle M_o(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \sum_{\nu} \Gamma_{\nu\nu} n_\nu \quad (6.26)$$

Ahora se intercambian t y z , se suman las expresiones y se obtiene:

$$\phi(t-z) = \frac{2}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu}^2 n_\mu (n_\nu + 1) \cos(\omega_\mu - \omega_\nu)(t-z) \quad (6.27)$$

Relación de fluctuación disipación:

Definimos

$$\phi_{\mu\nu}(t-z) = \frac{2}{\hbar^2} \Gamma_{\mu\nu}^2 n_\mu (n_\nu + 1) \cos(\omega_\mu - \omega_\nu)(t-z) \quad (6.28)$$

y llegamos a la siguiente expresión

$$\sum_{\mu\nu} - \frac{\phi_{\mu\nu}(t-z)(n_\mu - n_\nu)}{(\omega_\mu - \omega_\nu) n_\mu (n_\nu + 1)} = \langle K_f(t, z) \rangle \quad (6.29)$$

que es la relación de fluctuación disipación correspondiente.

En la expresión (6.29), si $kT \gg \hbar\omega$, o bien si $\hbar \rightarrow 0$, se recupera exactamente la relación clásica, ecuación (3.36).

Segundo modelo:

Consideremos ahora un hamiltoniano de la forma

$$H = H_s(a^\dagger, a) + \sum_{\nu} \hbar\omega_{\nu} b_{\nu}^{\dagger} b_{\nu} - \frac{\lambda}{2} (a^\dagger + a) \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} (b_{\mu}^{\dagger} + b_{\mu}) (b_{\nu}^{\dagger} + b_{\nu}) \quad (6.30)$$

Este tipo de interacción sí corresponde a un sistema mecánico. La notación que usaremos es idéntica a la del modelo anterior.

Ecuaciones del sistema: Definimos $B_\nu \equiv b_\nu^\dagger + b_\nu$ y tenemos

$$\dot{a} = \frac{i}{\hbar} [H_s, a] + \frac{i\lambda}{2\hbar} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} B_\mu B_\nu \quad (6.31)$$

y una ecuación similar para $a^\dagger$.

Ecuaciones del baño:

$$\dot{b}_\nu^\dagger = i\omega_\nu b_\nu^\dagger - \frac{i\lambda}{\hbar} (a^\dagger + a) \sum_\mu \Gamma_{\mu\nu} (b_\mu^\dagger + b_\mu) \quad (6.32)$$

$$\dot{b}_\nu = -i\omega_\nu b_\nu + \frac{i\lambda}{\hbar} (a^\dagger + a) \sum_\mu \Gamma_{\mu\nu} (b_\mu^\dagger + b_\mu) \quad (6.33)$$

cuyas soluciones son

$$b_\nu^\dagger(t) = e^{i\omega_\nu t} \left[b_\nu^\dagger(0) - \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_\mu \Gamma_{\mu\nu} \int_0^t dt' [b_\mu^\dagger(t') + b_\mu(t')] Q(t') e^{-i\omega_\nu t'} \right] \quad (6.34)$$

$$b_\nu(t) = e^{-i\omega_\nu t} \left[b_\nu(0) + \frac{i\lambda}{\hbar} \sum_\mu \Gamma_{\mu\nu} \int_0^t dt' [b_\mu^\dagger(t') + b_\mu(t')] Q(t') e^{i\omega_\nu t'} \right] \quad (6.35)$$

sumando estas dos últimas, se obtiene una ecuación integral para el operador B_ν

$$B_\nu(t) = e^{i\omega_\nu t} b_\nu^\dagger(0) + e^{-i\omega_\nu t} b_\nu(0) + \frac{2\lambda}{\hbar} \sum_\mu \Gamma_{\mu\nu} \int_0^t dt' B_\mu(t') \sin \omega_\nu(t-t') Q(t') \quad (6.36)$$

y como en casos anteriores, buscamos una solución perturbativa en el parámetro λ , la que podemos escribir en la forma:

$$B_\nu(t) = B_\nu^0(t) + \lambda \frac{2}{\hbar} \sum_\mu \Gamma_{\mu\nu} \int_0^t dt' B_\mu^0(t') \sin \omega_\nu(t-t') Q(t') + \dots \quad (6.37)$$

reescribimos esta ecuación, permutando los operadores en el integrando. Luego veremos la conveniencia de tener ambas expresiones,

$$B_{\mu}(t) = B_{\mu}^{\circ}(t) + \lambda \frac{2}{\hbar} \sum_{\eta} \Gamma_{\eta\mu} \int_0^t dt' \sin \omega_{\eta}(t-t') Q(t') B_{\eta}^{\circ}(t') + \dots \quad (6.38)$$

en estas expresiones estamos definiendo el operador B_{μ} a orden cero como

$$B_{\mu}^{\circ}(t) = e^{i\omega_{\mu}t} b_{\mu}^{+}(0) + e^{-i\omega_{\mu}t} b_{\mu}(0) \quad (6.39)$$

De la ecuación (6.37) tenemos

$$\begin{aligned} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} B_{\mu} B_{\nu} &= \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} [B_{\mu}^{\circ} + \lambda B_{\mu}^1] [B_{\nu}^{\circ} + \lambda B_{\nu}^1] + O(\lambda^2) \\ &= \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} [B_{\mu}^{\circ} B_{\nu}^{\circ} + \lambda (B_{\mu}^{\circ} B_{\nu}^1 + B_{\mu}^1 B_{\nu}^{\circ})] + O(\lambda^2) \end{aligned} \quad (6.40)$$

donde B_{ν}^1 representa el operador B a orden 1.

Definimos

$$M_0(t) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} B_{\mu}^{\circ} B_{\nu}^{\circ} \quad (6.41)$$

$$\text{y} \quad F(t) = M_0(t) - \langle M_0(t) \rangle \quad (6.42)$$

como la fluctuación (centrada en cero).

Por otro lado definimos

$$M_1(t) = \frac{1}{2\hbar} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu} (B_{\mu}^{\circ} B_{\nu}^1 + B_{\mu}^1 B_{\nu}^{\circ}) \quad (6.43)$$

y se obtiene:

$$M_1(t) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \left\{ \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha\nu} \int_0^t dt' B_{\mu}^{\circ}(t) B_{\alpha}^{\circ}(t') \sin \omega_{\nu}(t-t') Q(t') + \right. \\ \left. + \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\mu} \int_0^t dt' B_{\beta}^{\circ}(t') B_{\nu}^{\circ}(t) \sin \omega_{\mu}(t-t') Q(t') \right\} \quad (6.44)$$

integrando por partes $M(t)$ obtenemos

$$M_1(t) = H(t) + \int_0^t dt' K_f(t, t') \dot{Q}(t') \quad (6.45)$$

donde H es una función que depende del operador que representa la coordenada del sistema y de los operadores que representan las condiciones iniciales del baño y definimos:

$$K_f(t, t') = \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\mu\nu\eta} \Gamma_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\eta} e^{i\omega_{\nu}t} \left[\frac{e^{i(\omega_{\eta}-\omega_{\nu})t'}}{\omega_{\eta}-\omega_{\nu}} \left(B_{\mu}^{\circ}(t) b_{\eta}^{\dagger}(\omega) \dot{Q}(t') + \dot{Q}(t') b_{\eta}^{\dagger}(\omega) B_{\mu}^{\circ}(t) \right) \right. \\ \left. - \frac{e^{-i(\omega_{\eta}+\omega_{\nu})t'}}{\omega_{\eta}+\omega_{\nu}} \left(B_{\mu}^{\circ}(t) b_{\eta}(\omega) \dot{Q}(t') + \dot{Q}(t') b_{\eta}(\omega) B_{\mu}^{\circ}(t) \right) \right] + t.c. \quad (6.46)$$

como un kernel fluctuante y escribimos $M_1(t)$ en la forma

$$M_1(t) = \int_0^t dt' \langle K_f(t, t') \rangle P(t') + \int_0^t dt' \delta K_f(t, t') P(t') + H(t) \quad (6.47)$$

donde H y δK_f son términos fluctuantes a orden λ^2 .

Función de correlación:

En primer lugar tenemos

$$\langle M_0(t) M_0(z) \rangle = \frac{1}{4\hbar^2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \Gamma_{\alpha\beta} \Gamma_{\gamma\delta} \langle B_{\alpha}^{\circ}(t) B_{\beta}^{\circ}(t) B_{\gamma}^{\circ}(z) B_{\delta}^{\circ}(z) \rangle \\ = \frac{1}{4\hbar^2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \Gamma_{\alpha\beta} \Gamma_{\gamma\delta} \left[\langle B_{\alpha}^{\circ}(t) B_{\beta}^{\circ}(t) \rangle \langle B_{\gamma}^{\circ}(z) B_{\delta}^{\circ}(z) \rangle + \langle B_{\alpha}^{\circ}(t) B_{\gamma}^{\circ}(z) \rangle \langle B_{\beta}^{\circ}(t) B_{\delta}^{\circ}(z) \rangle + \langle B_{\alpha}^{\circ}(t) B_{\delta}^{\circ}(z) \rangle \langle B_{\beta}^{\circ}(t) B_{\gamma}^{\circ}(z) \rangle \right] \\ = \frac{1}{4\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\mu} \Gamma_{\nu\nu} (2n_{\mu}+1)(2n_{\nu}+1) + \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu}^2 \left[(2n_{\mu}+1) \cos \omega_{\mu}(t-z) - i \sin \omega_{\mu}(t-z) \right] \times \\ \times \left[(2n_{\nu}+1) \cos \omega_{\nu}(t-z) - i \sin \omega_{\nu}(t-z) \right] \quad (6.48)$$

Ahora bien,

$$\phi(t-z) = \langle F(t) F(z) + F(z) F(t) \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle F(t) F(z) \rangle \quad (6.49)$$

usando la relación

$$\langle F(t) F(z) \rangle = \langle M_o(t) M_o(z) \rangle - \langle M_o \rangle^2 \quad (6.50)$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \phi(t-z) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu}^2 \left\{ [(2\eta_\mu+1)(2\eta_\nu+1)+1] \cos(\omega_\mu+\omega_\nu)(t-z) + \right. \\ \left. + [(2\eta_\mu+1)(2\eta_\nu+1)-1] \cos(\omega_\mu-\omega_\nu)(t-z) \right\} \end{aligned} \quad (6.51)$$

Ahora bien, de la ecuación (3.46) podemos escribir

$$K(t-z) = K^+(t-z) + K^-(t-z) \quad (6.52)$$

donde, usando la relación (6.19) definimos y evaluamos el kernel disipativo:

$$K^+(t-z) \equiv \langle K_f^+(t,z) \rangle = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu}^2 \frac{(2\eta_\mu+1)}{\omega_\mu+\omega_\nu} \cos(\omega_\mu+\omega_\nu)(t-z) \quad (6.53)$$

$$K^-(t-z) \equiv \langle K_f^-(t,z) \rangle = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{\mu\nu} \Gamma_{\mu\nu}^2 \frac{(2\eta_\mu+1)}{\omega_\mu-\omega_\nu} \cos(\omega_\mu-\omega_\nu)(t-z) \quad (6.54)$$

y en forma similar, los dos términos de la ecuación (6.51) podemos considerarlos como dos partes de la función de correlación, definidas por las expresiones siguientes:

$$\phi_{\mu\nu}^+(t-z) = \frac{1}{\hbar^2} \Gamma_{\mu\nu}^2 [(2\eta_\mu+1)(2\eta_\nu+1)+1] \cos(\omega_\mu+\omega_\nu)(t-z) \quad (6.55)$$

$$\phi_{\mu\nu}^-(t-z) = \frac{1}{\hbar^2} \Gamma_{\mu\nu}^2 [(2\eta_\mu+1)(2\eta_\nu+1)-1] \cos(\omega_\mu-\omega_\nu)(t-z) \quad (6.56)$$

Finalmente, si deseamos expresar en alguna forma una relación formal de fluctuación disipación, podemos escribirla separada en dos partes en la forma siguiente

$$\sum_{\mu\nu} - \frac{\phi_{\mu\nu}^+(t-\tau) (2\eta_{\mu}+1)}{(\omega_{\mu}+\omega_{\nu})[(2\eta_{\mu}+1)(2\eta_{\nu}+1)+1]} = K^+(t-\tau) \quad (6.57)$$

$$\sum_{\mu\nu} \frac{\phi_{\mu\nu}^-(t-\tau) (2\eta_{\mu}+1)}{(\omega_{\mu}-\omega_{\nu})[(2\eta_{\mu}+1)(2\eta_{\nu}+1)-1]} = K^-(t-\tau) \quad (6.58)$$

y por supuesto no resulta claro, el significado de esta separación en la relación obtenida.

Recopilemos ahora los resultados obtenidos dentro del régimen cuántico, en cuanto a las relaciones de fluctuación disipación (RFD).

Si la interacción es lineal en los operadores del baño, la (RFD) tiene la forma:

$$\sum_{\nu} \phi_{\nu}(t-\tau) \frac{\tanh(\hbar\omega_{\nu}/2kT)}{\hbar\omega_{\nu}} = K^{(1)}(t-\tau) \quad (5.23)$$

si la interacción es cuadrática en los operadores del baño, la (RFD) tiene la forma (tomemos P.Ej. (6.29)) :

$$\sum_{\mu\nu} [-\phi_{\mu\nu}(t-\tau)(\eta_{\mu}-\eta_{\nu})] / (\omega_{\mu}-\omega_{\nu}) \eta_{\mu}(\eta_{\nu}+1) = K^{(2)}(t-\tau) \quad (6.29)$$

donde los superíndices $K^{(1)}$ y $K^{(2)}$ en este momento nos sirven para identificar las distintas K que dependen a su vez del orden de la interacción. Es de notarse no solamente la diferencia en las expresiones (5.23) y (6.29), pero también observamos que si la interacción es de orden n en los operadores del baño, obtendremos como (RFD) una suma con n

índices (n sumatorias) de funciones $\phi_{\mu\nu} \dots (t-z)$ con n índices.

Por lo tanto para cada orden en la interacción obtenemos para la (RFD) una expresión esencialmente diferente. Y si la interacción es un polinomio de m términos en los operadores del baño, obtendremos, correspondientes a dicha interacción, m diferentes (RFD). Aún más, otra dificultad en el caso cuántico, es que para interacciones a un orden dado, diferentes términos de la interacción pueden llevar a distinta (RFD).

VII. ECUACIONES DE LANGEVIN CUANTICAS

En la sección anterior quedaron de manifiesto las dificultades que hay en el régimen cuántico para tratar de establecer una relación formal de fluctuación disipación cuya validez trascienda los detalles del modelo de interacción.

Ademas de estas dificultades señaladas, nos encontramos con que al tratar de derivar ecuaciones de Langevin en el caso cuántico, surgen sutilezas que hay que manejar cuidadosamente para poder interpretar en forma correcta lo que encierran las ecuaciones que resultan. Estas sutilezas tienen que ver con la no conmutación de operadores.

Para ilustrar lo anterior consideremos un dímero que interacciona con un baño térmico. El dímero consiste en dos monómeros idénticos los cuales tienen cada uno en forma aislada un estado excitado de energía ϵ , y como dímero, los monómeros interaccionan a través de un estado excitado de resonancia de intensidad J . El baño actúa modulando la energía de cada monómero así como la razón de transferencia de energía entre ambos.

Tenemos entonces un hamiltoniano de la forma

$$H = \epsilon(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) + J(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1) + \sum_j \hbar \omega_j b_j^\dagger b_j + \sum_j (b_j^\dagger + b_j)(r_{1j} a_1^\dagger a_1 + r_{2j} a_2^\dagger a_2) \quad (7.1)$$

donde $a_j^\dagger$ es un operador que crea una excitación en el monómero j y a_j es un operador que aniquila dicha

excitación. b_j^+ y b_j son operadores creación y aniquilación respectivamente, los que representan al baño y son coeficientes de acoplamiento, los que por hermiticidad del hamiltoniano satisfacen la relación $\Gamma_{j\mu}^* = \Gamma_{j-\mu}$, $j = 1, 2$.

$$\text{Sea } G_\mu(t) = \Gamma_{1\mu} a_1^+ a_1 + \Gamma_{2\mu} a_2^+ a_2 \quad (7.2)$$

Ecuaciones de movimiento del baño:

$$\dot{b}_\mu^+ = i\omega_\mu b_\mu^+ + \frac{i}{\hbar} G_\mu^+ \quad (7.3)$$

$$\dot{b}_{-\mu} = -i\omega_\mu b_{-\mu} - \frac{i}{\hbar} G_\mu^+ \quad (7.4)$$

cuyas soluciones son

$$b_\mu^+(t) = e^{i\omega_\mu t} \left[b_\mu^+(0) + \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' G_\mu^+(t') e^{-i\omega_\mu t'} \right] \quad (7.5)$$

$$b_{-\mu}(t) = e^{-i\omega_\mu t} \left[b_{-\mu}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' G_\mu^+(t') e^{i\omega_\mu t'} \right] \quad (7.6)$$

sumando ambas expresiones

$$B_\mu \equiv b_\mu^+ + b_{-\mu} = e^{i\omega_\mu t} b_\mu^+(0) + e^{-i\omega_\mu t} b_{-\mu}(0) - \frac{2}{\hbar} \int_0^t dt' G_\mu^+(t') \sin \omega_\mu(t-t') \quad (7.7)$$

Aunque la interacción no es proporcional a las coordenadas del sistema (no es un sistema mecánico) es necesaria aquí también una integración por partes para la correcta interpretación del término disipativo. Haciendo esta integración por partes tenemos

$$B_\mu(t) = f_\mu(t) - \frac{2}{\hbar\omega_\mu} G_\mu^+(t) + \frac{2}{\hbar\omega_\mu} G_\mu^+(0) \cos \omega_\mu t - \frac{2}{\hbar\omega_\mu} \int_0^t dt' \dot{G}_\mu^+(t') \cos \omega_\mu(t-t') \quad (7.8)$$

donde definimos

$$f_{\mu}(t) = e^{i\omega_{\mu}t} b_{\mu}^{+}(0) + e^{-i\omega_{\mu}t} b_{-\mu}(0) \quad (7.9)$$

Ecuaciones de movimiento del sistema:

$$\dot{a}_1 = -\frac{i\varepsilon}{\hbar} a_1 - \frac{iJ}{\hbar} a_2 - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} B_{\mu} \Gamma_{1\mu} a_1 \quad (7.10)$$

$$\dot{a}_1^{+} = \frac{i\varepsilon}{\hbar} a_1^{+} + \frac{iJ}{\hbar} a_2^{+} + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} B_{\mu} \Gamma_{1\mu} a_1^{+} \quad (7.11)$$

otras ecuaciones similares para a_2 y a_2^{+} .

Notar que en el tercer término de cada una de estas ecuaciones, el operador $B_{\mu}(t)$ conmuta con cada uno de los operadores $a_1(t)$ y $a_1^{+}(t)$, cosa que no ocurre a tiempos diferentes. En este momento, para el posterior manejo de las ecuaciones escogemos escribir B_{μ} del lado izquierdo tal como aparece en (7.10) y (7.11).

Ahora sustituimos la ecuación (7.8) en (7.10) y (7.11):

$$\begin{aligned} \dot{a}_1 = & -\frac{i\varepsilon}{\hbar} a_1 - \frac{iJ}{\hbar} a_2 - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} \Gamma_{1\mu} f_{\mu}(t) a_1 + \frac{2i}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_{\mu}} G_{\mu}^{+}(t) a_1(t) + \\ & - \frac{2i}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_{\mu}} G_{\mu}^{+}(0) \cos \omega_{\mu} t a_1(t) + \frac{2i}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_{\mu}} \int_0^t dt' \cos \omega_{\mu}(t-t') \dot{G}_{\mu}^{+}(t') a_1(t) \end{aligned} \quad (7.12)$$

$$\begin{aligned} \dot{a}_1^{+} = & \frac{i\varepsilon}{\hbar} a_1^{+} + \frac{iJ}{\hbar} a_2^{+} + \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} \Gamma_{1\mu} f_{\mu}(t) a_1^{+} - \frac{2i}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_{\mu}} G_{\mu}^{+}(t) a_1^{+}(t) + \\ & + \frac{2i}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_{\mu}} G_{\mu}^{+}(0) \cos \omega_{\mu} t a_1^{+}(t) - \frac{2i}{\hbar^2} \sum_{\mu} \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_{\mu}} \int_0^t dt' \cos \omega_{\mu}(t-t') \dot{G}_{\mu}^{+}(t') a_1^{+}(t) \end{aligned} \quad (7.13)$$

Aquí hacemos notar una peculiaridad de estas ecuaciones: que aunque (7.12) y (7.13) son traspuestas hermitianas una de la otra, por definición, no lo son encambio todos los términos "correspondientes" tomados por separado. Esto se debe como ya dijimos a la no conmutación de operadores a distintos tiempos.

Ahora bien, evaluamos $\dot{G}_\mu$ por medio del conmutador

$$\begin{aligned}\dot{G}_\mu(t) &= \frac{i}{\hbar} [H, G_\mu] = \frac{i}{\hbar} J [(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1), (\Gamma_{1\mu} a_1^\dagger a_1 + \Gamma_{2\mu} a_2^\dagger a_2)] = \\ &= -\frac{i}{\hbar} J (\Gamma_{1\mu} - \Gamma_{2\mu}) (G_{12} - G_{21}).\end{aligned}\quad (7.14)$$

donde estamos definiendo los operadores:

$$G_{ij} \equiv a_i^\dagger a_j \quad (7.15)$$

sustituimos la ecuación (7.14) en (7.12) y resulta:

$$\begin{aligned}\dot{a}_1 &= -\frac{i\varepsilon}{\hbar} a_1 - \frac{iJ}{\hbar} a_2 - \frac{i}{\hbar} \sum_\mu \Gamma_{1\mu} f_\mu(t) a_1 + \frac{2i}{\hbar^2} \sum_\mu \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_\mu} (\Gamma_{1\mu}^* a_1^\dagger a_1 + \Gamma_{2\mu}^* a_2^\dagger a_2) a_1 \\ &\quad - \frac{2i}{\hbar^2} \sum_\mu \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_\mu} \cos \omega_\mu t [\Gamma_{1\mu}^* a_1^\dagger(0) a_1(0) + \Gamma_{2\mu}^* a_2^\dagger(0) a_2(0)] a_1(t) + \\ &\quad + \frac{2i}{\hbar^2} \sum_\mu \frac{\Gamma_{1\mu}}{\omega_\mu} \int_0^t dt' \cos \omega_\mu(t-t') \frac{iJ}{\hbar} (\Gamma_{1\mu}^* - \Gamma_{2\mu}^*) (G_{12}(t') - G_{21}(t')) \cdot a_1(t)\end{aligned}\quad (7.16)$$

Definimos las funciones

$$K_j(t) = \sum_\mu \frac{|\Gamma_{j\mu}|^2}{\hbar \omega_\mu} \cos \omega_\mu t, \quad j = 1, 2 \quad (7.17)$$

$$K_3(t) = \sum_\mu \frac{\Gamma_{1\mu}^* \Gamma_{2\mu}}{\hbar \omega_\mu} \cos \omega_\mu t \quad (7.18)$$

y supongamos que elegimos condiciones en los parámetros Γ_{ij} y ω_j tales que

$$K_i(t) = \bar{K}_i \delta(t), \quad \bar{K}_i = \text{constantes} \quad (7.19)$$

es decir estamos suponiendo que cada una de las K es un kernel disipativo y la ecuación (7.16) puede escribirse así

$$\begin{aligned} \dot{a}_1 = & -\frac{i\xi}{\hbar} a_1 - \frac{iJ}{\hbar} a_2 - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu} \Gamma_{1\mu} f_{\mu}(t) a_1 + \\ & + \frac{2i}{\hbar} \left\{ [K_1(t) - \bar{K}_1 \delta(t)] G_{11} a_1 + [K_3(t) - \bar{K}_3 \delta(t)] G_{22} a_1 \right\} + \\ & + \frac{J}{\hbar^2} (\bar{K}_1 - \bar{K}_3) (G_{12} - G_{21}) a_1 \end{aligned} \quad (7.20)$$

Conviene hacer aquí una suposición sobre el tipo de excitación que puede tener el dímero y es el considerar la existencia de un solo excitón. Esto simplifica los productos de operadores del sistema, pues hace cero los productos de la forma

$$G_{ij} a_k = 0, \quad i, j, k = \{1, 2\} \quad (7.21)$$

y otros productos los linealiza en la forma

$$a_i G_{jk} = a_k \delta_{ij} \quad (7.22)$$

con lo cual la ecuación (7.19) queda en forma lineal

$$\dot{a}_1 = -\frac{i\xi}{\hbar} a_1 - \frac{iJ}{\hbar} a_2 - \frac{i}{\hbar} F(t) a_1 \quad (7.23)$$

donde estamos definiendo

$$F(t) = \sum_{\mu} \Gamma_{1\mu} f_{\mu}(t) \quad (7.24)$$

la cual representa la fluctuación

Ahora bien si queremos escribir la ecuación (7.23) con el operador a_1 del lado izquierdo de F podemos hacerlo de dos maneras:

a) regresar a la ecuación (7.12) y volver a hacer el desarrollo con el operador a_1 del lado izquierdo, ó

b) calcular el conmutador $[F(t), a_1(t)]$.

Hagamos el cálculo explícito de este conmutador partiendo de la expresión (7.8)

$$[F(t), a_1(t)] = -2(K_1(\omega) - \bar{K}_1 \delta(t)) a_1 + \frac{iJ}{\hbar} (\bar{K}_1 - \bar{K}_3) a_2 \quad (7.25)$$

Con ayuda de este conmutador podemos expresar la ecuación (7.23) con el orden de los operadores intercambiado:

$$\dot{a}_1 = -\frac{i\epsilon}{\hbar} a_1 - \frac{iJ}{\hbar} a_2 - \frac{i}{\hbar} a_1 F + \frac{2i}{\hbar} [K_1(\omega) - \bar{K}_1 \delta(t)] a_1 + \frac{J}{\hbar} (\bar{K}_1 - \bar{K}_3) a_2 \quad (7.26)$$

Las ecuaciones (7.23) y (7.26) son enteramente equivalentes sin embargo su apariencia es muy diferente

Si identificamos el término $F(t) \cdot a_1(t)$ como una fluctuación (multiplicativa), observamos que la ecuación (7.23) en apariencia no contiene término disipativo, sin embargo la expresión (7.26) nos sugiere identificar el término $a_1(t) \cdot F(t)$ como la parte fluctuante y el término

$(\kappa_1(0) - \bar{\kappa}_1 \delta(t)) a_1$ como la parte disipativa. Por lo tanto queda claro que el término $F(t) \cdot a_1(t)$ en la ecuación (7.23) contiene tanto las fluctuaciones como la disipación del sistema.

Como vemos, ésto hace particularmente difícil el tratar de establecer en forma fenomenológica ecuaciones de Langevin cuánticas. Las fluctuaciones son operadores que en general no conmutan con las variables del sistema y es imposible establecer a priori el valor de dichos conmutadores.

VIII.- CONCLUSIONES

A través de este análisis observamos dentro del régimen clásico lo siguiente:

Si el acoplamiento es bilineal entre sistema y baño, es posible obtener en forma exacta una ecuación de Langevin generalizada, de la forma (1.6), así como su relación de fluctuación disipación correspondiente (resultado ya obtenido).

En el caso de acoplamiento cuadrático (en las coordenadas del baño) pudimos obtener aún en forma exacta una ecuación estocástica para la evolución del sistema. Sin embargo la estructura de esta ecuación es complicada y encontramos que si queremos llevarla a la forma generalizada de Kubo, ecuación (1.6), es posible hacerlo en forma aproximada mediante un desarrollo en potencias de un parámetro de acoplamiento y en esta ecuación de Langevin aproximada podemos identificar una relación de fluctuación disipación.

Por el momento no podemos precisar la medida en la que esta ecuación aproximada representa efectivamente la evolución del sistema; lo que hemos demostrado es que la función de correlación de la fluctuación a orden mas bajo en λ (parámetro de acoplamiento) es el producto de kT por el kernel disipativo definido a orden λ^2 . . Notar que esta relación tiene una expresión idéntica a la del caso bilineal

Este mismo resultado aproximado pudimos generalizarlo para el caso en que la interaccion es un polinomio en las coordenadas del bano mediante una solucion perturbativa de las ecuaciones del bano

En el regimen cuantico por otro lado este resultado general (aproximado) no es aplicable ya que las ecuaciones de Langevin que se obtienen y en forma mas precisa las relaciones de fluctuacion disipacion que resultan dependen de manera importante del tipo de interaccion. Esto hace que en el caso cuantico sea especialmente dificil el abordar este tipo de problemas por medio de ecuaciones estocasticas fenomenologicas

En general se reconoce el hecho de que la relacion de fluctuacion disipacion clasica implica que las escalas de tiempo para la correlacion en las fluctuaciones y la disipacion son iguales es decir ambas decaen por igual. Es importante hacer notar de que parametros depende este tiempo de decaimiento. Para el acoplamiento bilineal este tiempo va implicito en la ecuacion (2.9) y depende de la distribucion de frecuencias del bano y de los coeficientes de acoplamiento. Sin embargo para acoplamientos a ordenes mas altos el kernel disipativo se vuelve dependiente de la temperatura y entonces es de esperarse que en general este tiempo de decaimiento dependa de la temperatura

En cambio en el caso cuantico aun para el acoplamiento bilineal se encuentra que la correlacion en las fluctuaciones y la disipacion tienen escalas de tiempo diferentes. Mientras que

en este caso el kernel disipativo es independiente de la temperatura la correlacion de las fluctuaciones si depende de esta. A temperaturas suficientemente bajas dependiendo del ancho del espectro de frecuencias del baño pueden ocurrir correlaciones que persisten mucho tiempo aun con disipacion instantanea. Para acoplamientos a ordenes mas altos se obtiene que esas dos escalas de tiempo ambas dependen en forma diferente de la temperatura.

Ademas de estas características que se encuentran en el caso cuantico las que obscurecen los planteamientos fenomenologicos se hace notar que las ecuaciones de Langevin cuanticas encierran dificultades en la interpretacion de sus terminos de fluctuacion y disipacion y esto se debe a que en este caso las fluctuaciones son operadores los cuales no conmutan con los operadores que representan al sistema.

Con todo esto queremos senalar que la descripcion de procesos de relajamiento de sistemas que interaccionan con un baño termico es un campo que aun involucra muchos problemas por resolver algunos de estos pueden ser conceptuales otros de manipulaciones matematicas sin embargo confiamos en haber contribuido en algo a la comprension de las ecuaciones estocasticas de Langevin mediante el presente trabajo.

APENDICES

A: CONDICION INICIAL DE EQUILIBRIO DEL BAÑO.

En este apéndice queremos analizar las diferencias entre dos de las formas que usualmente se eligen como condiciones para el equilibrio inicial del baño. Estas dos formas consisten en suponer el baño a $t = 0$ en equilibrio, ya sea en ausencia o en presencia del sistema.

Vamos a referirnos al sistema en conjunto estudiado en la sección II.

Hamiltoniano del sistema:

$$H = H_s(Q, P) + H_B - \lambda Q \sum_j \Gamma_j q_j \quad (A.1)$$

$$\text{donde } H_B = \sum_j \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} q_j^2 \right] \quad (A.2)$$

La ecuación de movimiento (2.7) podemos escribirla en cualquiera de estas dos formas equivalentes:

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^3} \cos \omega_j t Q(0) + \lambda^2 \int_0^t d\tau K(t-\tau) P(\tau) = \lambda F_0(t) \quad (A.3)$$

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H^{(m)}}{\partial Q} + \lambda^2 \int_0^t d\tau K(t-\tau) P(\tau) = \lambda F(t) \quad (A.4)$$

donde $F(t)$ esta dada por la ecuación (2.10) y

$$F_0(t) = \sum_j \Gamma_j \left[q_j(0) \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t \right] \quad (A.5)$$

por lo tanto

$$F(t) = F_0(t) - \lambda^2 \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos \omega_j t Q(0) \quad (A.6)$$

Consideremos ahora el equilibrio inicial del baño en ausencia del sistema. Por lo tanto para los valores iniciales de las variables del baño consideramos una distribución canónica de la forma

$$W(\vec{q}(0), \vec{p}(0)) = Z^{-1} \exp -\beta H_0 \quad (A.7)$$

donde $\vec{q}$ y $\vec{p}$ denotan un conjunto de coordenadas y momentos del baño y Z la función de partición.

Tomamos como ecuación de movimiento para el sistema, la expresada en (A.3) y para la fluctuación F tenemos, de acuerdo con (A.7),

$$\langle F_0(t) \rangle = 0 \quad (A.8)$$

$$\langle F_0(t) F_0(\tau) \rangle = kT K(t-\tau) \quad (A.9)$$

y la ecuación estocástica (A.3) contiene un término que podemos expresar en la forma

$$\lambda^2 \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos \omega_j t Q(0) = \lambda^2 K(t) Q(0) \quad (A.10)$$

En el apéndice B veremos cual es el efecto de este término en la evolución del sistema.

Consideremos ahora el equilibrio inicial del baño en presencia del sistema. Por lo tanto, para los valores

iniciales de las variables del baño consideramos una distribución canónica de la forma

$$W \{ (q(0), p(0)) | Q(0) \} = Z^{-1} \exp -\beta H_0^{(m)} \quad (A.11)$$

donde ahora el término

$$H_0^{(m)} = \sum_j \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \left(q_j - \frac{\lambda \Gamma_j Q}{m_j \omega_j^2} \right)^2 \right] \quad \begin{cases} (A.12) \\ (2.12) \end{cases}$$

está incorporando el término de interacción y el hamiltoniano tendría la forma

$$H = H_s^{(m)} + H_0^{(m)}$$

$$\text{con } H_s^{(m)} = H_s - \frac{3}{2} \lambda^2 \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} Q^2$$

Tomamos en este caso como ecuación de movimiento para el sistema, la expresada en (A.4) y para la fluctuación F tenemos de acuerdo con (A.11):

$$\langle F(t) \rangle = 0 \quad (A.13)$$

$$\langle F(t) F(\tau) \rangle = kT K(t-\tau) \quad (A.14)$$

y la ecuación estocástica (A.4) no contiene el término extra de la forma (A.10).

Lo que se está haciendo en la ecuación (A.12) podemos pensarlo como una transformación canónica de coordenadas del baño, definida por las ecuaciones:

$$\hat{q}_j = q_j - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q \quad (\text{A.15})$$

$$\hat{p}_j = p_j \quad (\text{A.16})$$

por lo tanto

$$H_B^{(m)} = \sum_j \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \hat{q}_j^2 \right) \quad (\text{A.17})$$

B: EFECTO DEL TERMINO $K(t) x_0$ EN LA ECUACION DE MOVIMIENTO.

En forma ilustrativa, consideremos la ecuación diferencial (sin el termino fluctuante):

$$\dot{u} = -b u - K(t) c \quad (B.1)$$

donde u podemos considerarla como una velocidad, $b > 0$ un coeficiente de fricción, c una constante y suponemos una función $K(t)$ de la forma

$$K(t) = \gamma e^{-rt} \quad (B.2)$$

con $\gamma > 0$ una constante.

Nos interesa comparar la solución de la ecuación (B.1) para el caso en que $\gamma \gg b$, con la solución de la ecuacion

$$\dot{u} = -b u \quad (B.3)$$

Solución de (B.1):

$$u(t) = e^{-bt} \left[u(0) - c \int_0^t dt' K(t') e^{bt'} \right] \quad (B.4)$$

donde obviamente $u(0)$ es la velocidad inicial.

De (B.2)

$$\int_0^t dt' K(t') e^{bt'} = \frac{\gamma}{\gamma - b} [1 - e^{-(\gamma - b)t}] \quad (B.5)$$

Sustituyendo en la ecuación (B.4):

$$u(t) = e^{-bt} u(0) + (\gamma c / \gamma - b) (e^{-rt} - e^{-bt}) \quad (B.6)$$

es evidente que esta solución satisface la condición inicial, pero si consideramos ahora $\gamma \gg b$ la expresión (B.6) adquiere la forma

$$u(t) \approx e^{-bt} (u(0) - c) \quad (B.7)$$

y esta solución ya no satisface la condición inicial. De hecho la solución (B.7) es válida estrictamente para $t > 0$.

Por otro lado la solución de la ecuación (B.3) es

$$u(t) = e^{-bt} u(0) \quad (B.8)$$

Comparando (B.7) y (B.8) vemos que el incluir en la ecuación diferencial el término $K(t)$, el cual podemos pensarlo como una función delta, representa en la solución, un corrimiento en las condiciones iniciales.

Supongamos que para $t < 0$ el sistema evoluciona de acuerdo con la ecuación (B.3), en el instante $t = 0$ cuando la velocidad es $u(0)$ se le incorpora al sistema el término $K(t) \sim \delta(t)$, lo que provoca el sacar al sistema "impulsivamente" de su valor inicial; y entonces su evolución para $t > 0$ seguirá de acuerdo con la ecuación (B.7).

Conclusiones:

Podemos concluir los resultados de los dos apendices haciendo las siguientes observaciones.

Si preparamos el baño en equilibrio inicial en ausencia del sistema, entonces $F_0(t)$ tendrá promedio cero, pero el sistema empieza a evolucionar a $t = 0$ con una "patada"

inicial (función δ), la cual dura solamente el tiempo en el que el baño absorbe energía inicial del sistema. Si en cambio preparamos el baño en equilibrio inicial en presencia del sistema entonces $F_0(t)$ no tiene promedio cero, pero la variable $F(t)$, que tiene un corrimiento en los valores iniciales de las variables del baño, sí tiene promedio cero, y entonces el sistema empieza a evolucionar a $t = 0$ ya en equilibrio con el baño (sin la "patada" inicial). Dicho corrimiento en los valores iniciales de las variables del baño es equivalente a una transformación de coordenadas del baño, que depende de la coordenada del sistema.

REFERENCIAS

- 1) R. Zwanzig, Lectures in Theoretical Physics (Wiley-Interscience, New York, 1961) Vol. 3; J.Stat.Phys. 9, 215 (1973).
- 2) H. Mori, Prog. Theor.Phys. (Kyoto) 34, 423 (1965).
- 3) J.L. Lebowitz y E. Rubin, Phys.Rev. 131, 2381 (1963).
- 4) P. Mazur y I. Oppenheim, Physica (Utrecht) 50, 241 (1970).
- 5) G.W. Ford, M. Kac y P.Mazur, J.Math.Phys. 6, 504 (1965).
- 6) E. Braun Physica 103A,325 (1980).
- 7) P. Mazur y E. Braun, Physica 30,1973 (1964)
- 8) J.Schwinger, J.Math.Phys. 2, 407 (1961).
- 9) I.R. Senitzky, Phys.Rev. 119, 670 (1960); 124, 642 (1961).
- 10) M. Lax, Phys.Rev. 129, 2342 (1963); 145, 109 (1966).
- 11) G.S.Agarwal, Phys.Rev. A 4, 739 (1971).
- 12) W. Bernard y H.B. Callen, Rev.Mod.Phys. 31, 1017 (1959).
- 13) W.H. Louisell, Radiation and Noise in Quantum Electronics (McGraw-Hill, New York, 1964)
- 14) W.H. Louisell y L.R. Walker, Phys.Rev. 137, B204 (1965).
- 15) W.H. Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation (Wiley, New York, 1973).
- 16) M. Sargent III, M.O. Scully y W.E. Lamb Jr., Laser Physics (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1974).
- 17) A. Nitzan y J. Jortner, Mol. Phys. 25, 713 (1973).
- 18) A. Nitzan y Silbey, J. Chem. Phys. 60, 4070 (1974).
- 19) S.H. Lin y H. Eyring, Annu. Rev. Phys. Chem. 25, 39 (1974).
- 20) M.J. Ondrechen, A. Nitzan y M.A. Ratner Chem. Phys. 16, 49 (1976).
- 21) R. Kubo, Rep. Prog. Phys. 29, 255 (1966).
- 22) K. Lindenberg y V. Seshadri, Physica (Utrecht) 109A, 483 (1981).
- 23) R. F. Fox, Phys. Rep. 48, 180 (1978).
- 24) K. Lindenberg y E. Cortes, Physica A 126, 489 (1984).
- 25) P. Ullersma, Physica 32, 27 (1966).
- 26) H. Dekker, Phys. Rep. 80, 1 (1981)
- 27) A.O. Caldera y A. J. Leggett, Ann. Phys. 149,372 (1983).
- 28) K. Lindenberg y B. J. West, Phys. Rev. A 30,568 (1984).
- 29) K. Lindenberg y B.J. West, Phys. Rev. Lett. 51,1370 (1983); en Random Walks and their Applications in the Physical and Biological Sciences, editado por M. Shlesinger y B.J. West (AIP, New York, 1983).
- 30) E. Braun, Physica 129A (1985) 262.

BIBLIOGRAFIA

- 1 - R. Mazo, en Stochastic Processes in Nonequilibrium Systems. Lecture Notes in Physics 84, editado por L.Garrido, P.Seglar y P.J.Shepherd (Springer, Berlin,1978).
- 2 - N.G. van Kampen. Stochastic Processes in Physics and Chemistry (North-Holland Amsterdam, 1981).
- 3 - C.W. Gardiner. Handbook of Stochastic Methods for Physics, Chemistry and the Natural Sciences (Springer, Berlin 1983).
- 4 - Predictability of Fluid Motions, editado por G.Holloway y B.J.West. AIP Conference Proceedings 106 (AIP, New York,1984).
- 5 - W. Horsthemke y R. Lefever. Noise Induced Transitions (Springer, Berlin, 1984).
- 6 - A. Schenzle y H. Brand. Phys.Rev. A 20, 1628 (1979).
- 7 - K. Lindenberg, K.E. Shuler, V. Seshadri y B.J. West, en Probabilistic Analysis and Related Topics, editado por A.T. Bharucha-Reid (Academic, New York,1983), Vol. 3.
- 8 - R. Benguria and M.Kac, Phys.Rev.Lett. 45, 1 (1980).
- 9 - H. Grabert, U. Weiss, y P. Talkner. Z. Phys. B 55, 87 (1984).
- 10 - K. Lindenberg y B.J. West, Phys.Rev. A 30, 568 (1984).
- 11 - B.J. West y K.Lindenberg, Phys.Lett. A 102, 189 (1984)
- 12 - V. Seshadri y K. Lindenberg, Physica A 115, 501 (1982)
- 13 - B.J. West y K.Lindenberg, en Proceedings of the Workshop on Fluctuations and Sensitivity in Nonequilibrium Systems, editado por V.Kondepudi and W. Horsthemke (Springer,Berlin,1984).
- 14 - R.Zwanzig, J. Stat. Phys. 9,215 (1973).
- 15 - B.J. West y K.Lindenberg, J.Chem. Phys. 93,4118 (1985).
- 16 - H.Haken. Laser Theory, en Vol.XXV/2C de Encyclopedia of Physics (springer, Berlin, 1970); Rev.Mod. Phys. 47, 67 (1975).