/ /

Projetores e função memória:

Há 3 situações onde modos (variáveis coletivas ou não) lentos aparecem em uma Teoria.

i) Leis de conservação → modos hidrodinâmicos

ii) Movimento browniano → $M >> m$

iii) Modos de Goldstone; quebra espontânea de simetria

Aqui vamos introduzir o conceito de projetores, o que nos leva a uma determinação sistemática das funções memória etc. Vamos Tratar o problema na sua forma mais geral, ou seja, quântica.

$$i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = [\hat{A}, \hat{H}] \quad \text{ou} \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}] = i\mathcal{L}\hat{A}$$

$$\mathcal{L} * = \frac{1}{\hbar}[\hat{H}, *]$$; $\mathcal{L}$ é um operador no espaço vetorial dos observáveis $\hat{A}_i$. Dada uma determinada base de estados onde os $\hat{A}_i$'s atuam:

$$\frac{\partial}{\partial t} A_{mn} = \frac{i}{\hbar}(H_{mk} A_{kn} - A_{mk} H_{kn})$$

$$= i \mathcal{L}_{mn;\mu\nu} A_{\mu\nu}$$

$$A_{kn} = \delta_{k\mu}\delta_{n\nu} A_{\mu\nu} \quad \text{e} \quad A_{mk} = \delta_{m\mu}\delta_{k\nu} A_{\mu\nu}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial A_{mn}}{\partial t} = \underbrace{\boxed{\frac{i}{\hbar}\left(H_{m\mu}\delta_{n\nu} - H_{n\nu}\delta_{m\mu}\right)}}_{\mathcal{L}_{mn;\mu\nu}} A_{\mu\nu}$$

$$\Rightarrow \hat{A}(t) = e^{i\mathcal{L}t}\hat{A}(0)$$

Objetivo: Projetar a dinâmica no subespaço $\mathcal{E}$ formado pelo conjunto de variáveis lentas e a identidade. $\mathcal{E} = \{I, \hat{A}_i\}$

Buscamos um projetor $\mathcal{P}$, $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ no espaço de operadores tq

$$\mathcal{P}B = B \quad \text{se} \quad B \in \mathcal{E} = \{I, \hat{A}_i\}.$$

O projetor complementar $Q = I - \mathcal{P}$. Convém notar que $\{\hat{A}_i\}$ é definido em $t=0$ e $\hat{A}_i(t)$ em $t \neq 0$ $\notin \mathcal{E}$; apenas $\mathcal{P}\hat{A}_i(t) \in \mathcal{E}$

Vamos construir $\mathcal{P}$. Assumiremos que temos N vetores em $\mathbb{R}^N$ ñ ortogonais e ñ normalizados $|e_1\rangle, \dots |e_N\rangle$ e $\langle e_i | e_j\rangle$ são conhecidos. Então tentamos

$$\mathcal{P} = \sum_{ij} |e_i\rangle M_{ij} \langle e_j| \quad \text{e vamos calcular } C_{ij}.$$

$$\mathcal{P}^2 = \sum_{ijkl} |e_i\rangle M_{ij} \langle e_j | e_k\rangle M_{kl} \langle e_l| = \mathcal{P}$$

$$= \sum_{il} |e_i\rangle M_{il} \langle e_l| \Rightarrow \sum_{jk} M_{ij} \langle e_j | e_k\rangle M_{kl} = M_{il}$$

Então, fazendo $\langle e_j | e_k \rangle = M^{-1}_{jk}$ temos

$$\sum_{jk} M_{ij} M^{-1}_{jk} M_{kl} = \sum_k \delta_{ik} M_{kl} = M_{il}$$

$$\Rightarrow \mathcal{P}|V\rangle = C^{-1}_{ij} |e_i\rangle \langle e_j | V\rangle. \quad \text{onde } C_{ij} \equiv \langle e_i | e_j\rangle$$

Podemos escolher $C_{ij} = \langle \delta\hat{A}_i ; \delta\hat{A}_j \rangle$ como o produto escalar de Mori e definir

$\mathcal{P} = \delta\hat{A}_i \, C^{-1}_{ij} \, \delta\hat{A}_j$ onde $C_{ij} = \langle \delta\hat{A}_i ; \delta\hat{A}_j \rangle$
(Como $\mathcal{P}I = I$ podemos fazer $i, j = 0$ onde $\delta\hat{A}_0 = I$ e $\langle \delta\hat{A}_0 ; \delta\hat{A}_i \rangle = 0$). Então
$\mathcal{P}\hat{B} = \delta\hat{A}_i \, C^{-1}_{ij} \langle \delta\hat{A}_j ; \hat{B} \rangle = \dfrac{\partial \hat{B}}{\partial \hat{A}_i} \delta\hat{A}_i$ (Le Bellac (9.53))

Propriedades de $\mathcal{P}$: $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$ e $\mathcal{P}^+ = \mathcal{P}$
Também $\langle \hat{A} ; \mathcal{L}\hat{B} \rangle = \langle \mathcal{L}\hat{A} ; \hat{B} \rangle$ (Ex (9.7.4))
e $\langle A ; \dot{B} \rangle = - \langle \dot{A} ; B \rangle$

Eq.^{s} de Langevin-Mori

$$\dot{\hat{A}}_i(t) = e^{i\mathcal{L}t} (Q + \mathcal{P}) \dot{\hat{A}}_i(0)$$

Mas $e^{i\mathcal{L}t} \mathcal{P} \dot{\hat{A}}_i = e^{i\mathcal{L}t} \delta\hat{A}_j \, C^{-1}_{jk} \langle \delta\hat{A}_k ; i\mathcal{L} \delta\hat{A}_i \rangle$

$$= \Omega_{ji} \, e^{i\mathcal{L}t} \delta\hat{A}_j$$

onde $\Omega_{ij} = C^{-1}_{jk} \langle \delta\hat{A}_k ; i\mathcal{L} \delta\hat{A}_i \rangle$. Note que $\Omega_{ij} = 0$ se observáveis e $\mathcal{E}$ têm a mesma paridade sob R.T.
$\Rightarrow$ se só 1 observável: $\Omega = 0$

O 1º termo de $\dot{\hat{A}}_i(t)$ contém o operador de evolução

$$e^{i\mathcal{L}t} = e^{i(Q+\mathcal{P})\mathcal{L}t} = e^{iQ\mathcal{L}t} + i\int_0^t dt' \, e^{i\mathcal{L}(t-t')} \mathcal{P}\mathcal{L} \, e^{iQ\mathcal{L}t'}$$

onde usamos que $e^{A+B} = e^A + \int_0^1 dx \, e^{x(A+B)} B \, e^{(1-x)A}$

/ /

Vamos introduzir as forças estocásticas $\hat{f}_i(t) = e^{iQLQt} Q\dot{\hat{A}}_i$

$\hat{f}_i(t)$ vivem em $\mathcal{E}_\perp$ e $\langle \hat{f}_i(t) \rangle = 0$ e, por construção

$\langle \hat{A}_i ; \hat{f}_i(t) \rangle = 0$. Mas o 1º termo de e^{iLt} quando

aplicado em $Q\dot{\hat{A}}_i(t)$ nos dá

$$e^{iQLQt} Q\dot{\hat{A}}_i = e^{iQLQt} Q^2\dot{\hat{A}}_i = \hat{f}_i(t) \quad \text{porque } Q^2 = Q$$

A 2ª contribuição se torna

$$\int_0^t dt' \, e^{iL(t-t')} \delta\hat{A}_j \, C^{-1}_{jk} \langle \delta\hat{A}_k ; L e^{iQLQt'} Q \, \delta\dot{\hat{A}}_i \rangle$$

$$= \int_0^t dt' \, e^{iL(t-t')} \delta\hat{A}_j \, C^{-1}_{jk} \langle \delta\hat{A}_k ; iL\hat{f}_i(t') \rangle$$

como $L = L^+ \longrightarrow -\langle iL\,\delta\hat{A}_k ; Q\hat{f}_i(t') \rangle$

$$= -\langle \hat{f}_k ; \hat{f}_i(t') \rangle$$

$$\Rightarrow 2^{\text{a}} \text{ contribuição} = -\int_0^t dt' \, \delta\hat{A}_j(t-t') \, C^{-1}_{jk} \langle \hat{f}_k ; \hat{f}_i(t') \rangle$$

$$= -\int_0^t dt' \, \delta\hat{A}_j(t-t') \, \gamma_{ji}(t') \quad \text{onde } \gamma_{ji}(t) = C^{-1}_{jk} \langle \hat{f}_k ; \hat{f}_i(t) \rangle$$

ou ainda $\delta\dot{\hat{A}}_i(t) = \Omega_{ji}\,\delta A_j(t) - \int_0^t \gamma_{ji}(t-t')\,\delta\hat{A}_j(t')\,dt'$

$$+ e^{iQLQt} \hat{f}_i(t)$$

$$\Rightarrow \partial_t \overline{\delta A_i}(t) = \Omega_{ji}\,\overline{\delta A_j}(t) - \int_0^t dt'\, \gamma_{ji}(t')\, \overline{\delta A_j}(t') + \langle e^{i\mathcal{Q}L\mathcal{Q}} f_i \rangle_\rho$$

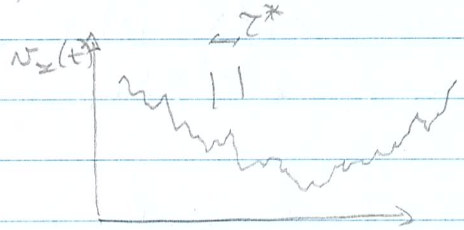
$\Rightarrow$ Tomando o produto escalar $\langle \overline{\delta A_j}(t'); \delta A_k \rangle_\rho$ temos

$$\dot{C}_{ki}(t) = \Omega_{ji}\, C_{kj} - \int_0^t dt'\, \gamma_{ji}(t-t')\, C_{kj}(t')\, dt'$$

e, para um único modo:

$$\dot{C}(t) = -\int_0^t dt'\, \gamma(t-t')\, C(t')$$

Uma aplicação importante: movimento browniano.
Partícula externa: massa M
partículas do meio: massas m; $m \ll M$.



— uma das componentes de $\vec{v}$ de uma partícula browniana.

$A = v$ no limite clássico

$$\langle v(t); v(0) \rangle \Rightarrow \langle v(t)\, v(0) \rangle = C_{vv}(t)$$

$$\Rightarrow \dot{C}_{vv}(t) \cong -\int_0^t dt'\, \gamma(t-t')\, C_{vv}(t')$$

$\tau^* \to 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{C}_{vv}(t) = -\gamma\, C_{vv}(t)$ onde $\gamma = \int_0^\infty dt\, \gamma(t)$

ou $C_{vv}(t) = e^{-\gamma |t|}\, C_{vv}(0)$

Rápida análise microscópica:

$$H = \underbrace{\sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta} V(\vec{r}_{\alpha\beta})}_{\text{fluido}} + \underbrace{\frac{P^2}{2M}}_{\text{partícula Browniana}} + \underbrace{\sum_\alpha U(\vec{R}-\vec{r}_\alpha)}_{\text{interação}}$$

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_f + \delta\mathcal{L}$$

$$i\mathcal{L}_f = \sum_\alpha \frac{\vec{p}_\alpha}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{r}_\alpha} - \frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta}\vec{\nabla}V(\vec{r}_\alpha-\vec{r}_\beta)\cdot\left(\frac{\partial}{\partial\vec{p}_\alpha}-\frac{\partial}{\partial\vec{p}_\beta}\right)$$

$$i\delta\mathcal{L} = \frac{\vec{P}}{M}\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{R}} - \sum_\alpha \vec{\nabla}U(\vec{r}_\alpha-\vec{R})\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{P}} + \sum_\alpha \vec{\nabla}U(\vec{R}-\vec{r}_\alpha)\cdot\frac{\partial}{\partial\vec{p}_\alpha}$$

$$C_{ij}(t) = \langle P_i ; e^{i\mathcal{L}t} P_j\rangle \Rightarrow \langle P_i(0)\, P_j(t)\rangle$$

inv. rot $\Rightarrow C_{ij}(t) = \delta_{ij}\, C(t)$ e $C_{ii}(0) = \langle P_i^2\rangle = MkT$

$$\gamma_{ij}(t) = \delta_{ij}\,\gamma(t) \quad e \quad \gamma(t) = \frac{1}{MkT}\langle \dot{P}_i ; e^{iQ\mathcal{L}Qt}\dot{P}_i\rangle$$

$$\mathcal{P} = \delta A_j\, C^{-1}_{jk}\, \delta A_k \Rightarrow \vec{P}\frac{1}{MkT}\vec{P} \Rightarrow Q = I - \vec{P}\frac{1}{MkT}\vec{P}$$

$$p \sim \sqrt{mkT} \quad e \quad P \sim \sqrt{MkT} \Rightarrow \frac{P/M}{p/m} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \Rightarrow \frac{\partial/\partial P}{\partial/\partial p} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}$$

$$\Rightarrow \frac{\mathcal{L}_B + \mathcal{L}_{f\to B}}{\mathcal{L}_f + \mathcal{L}_{B\to f}} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} \Rightarrow \mathcal{L} \to \mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_f + \mathcal{L}_{B\to f} \quad \text{qdo} \quad \frac{m}{M}\to 0$$

$$\Rightarrow \lim_{\frac{m}{M}\to 0} \gamma(t) = \gamma_\infty(t) = \frac{1}{MkT}\langle \dot{P}_i ; e^{i\mathcal{L}_0 t}\dot{P}_i\rangle$$

mas $\dfrac{d\vec{P}}{dt} = i\mathcal{L}\vec{P} = -\sum_\alpha \vec{\nabla}U(\vec{R}-\vec{r}_\alpha) = \vec{F}$. (força instantânea)

$$\Rightarrow \gamma_\infty(t) = \frac{1}{3MkT}\langle \vec{F}_\infty(t)\cdot\vec{F}_\infty(0)\rangle \Rightarrow \frac{d\vec{P}}{dt} = -\gamma\vec{P} + \vec{F}_\infty(t)$$

$$\gamma = \frac{1}{6MkT}\int_{-\infty}^{\infty} dt\, \langle \vec{F}_\infty(t)\cdot\vec{F}_\infty(0)\rangle$$