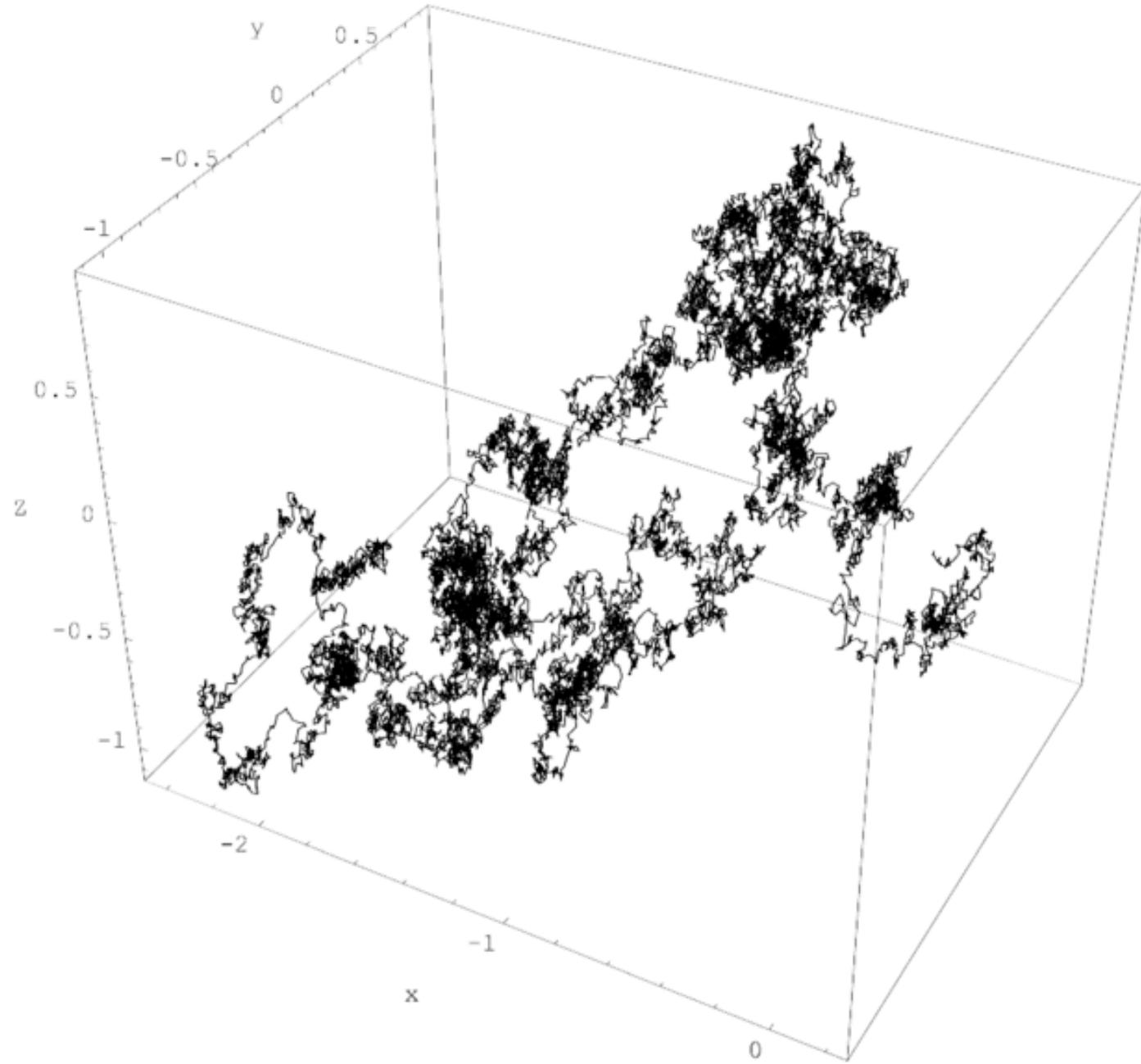


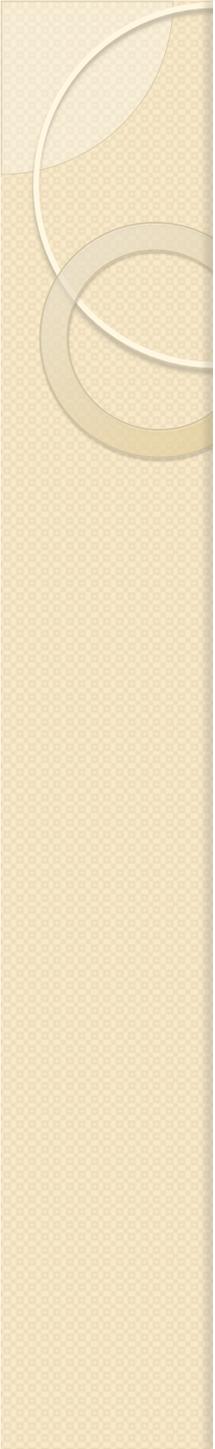
Soluções exatas para condutividade térmica em sistemas pequenos: via direta e Green-Kubo

- Welles A. M. Morgado
- PUC – Rio
- Apresentado no 1º Encontro do INCT-SC (24/03/2009), CBPF, RJ

- Colaborador: Diogo Soares-Pinto (CBPF)







Sumário

- Equação de Langevin
- Trabalho micro/macroscópico
- Média temporal & transformações de Laplace
- Funções resposta



Motivação básica

- Simples “toy model” que permite obter resultados exatos para sistemas fora do equilíbrio
- Média temporal é equivalente a integrar completamente a dinâmica do sistema
- O papel das propriedades não-Markovianas do ruído e da inércia (massa) do sistema podem ser levados em conta de maneira exata

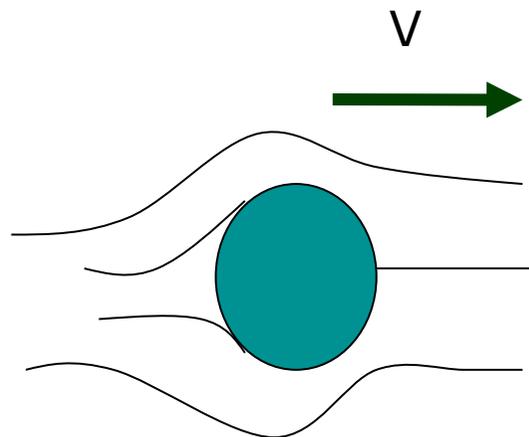


Equação de Langevin

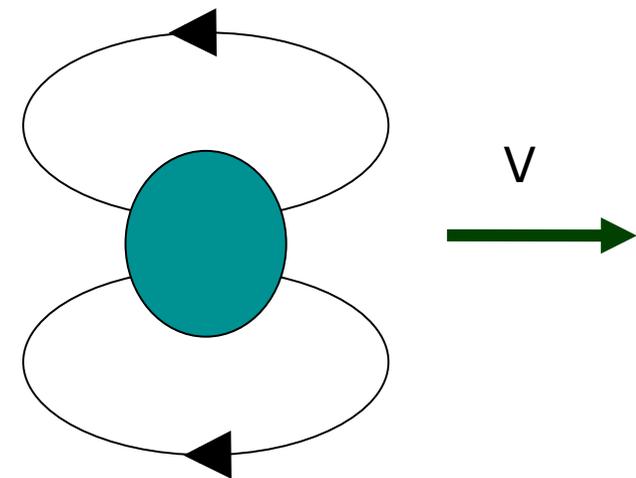
- Descreve a evolução temporal das variáveis dinâmicas do sistema
- Equações de Langevin generalizadas podem ser derivadas, por meio de operadores de projeção, diretamente da Equação de Liouville para o sistema, onde a função ruído é consequência dos graus rápidos de liberdade do sistema
- O ruído pode ser assumido efetivamente como Gaussiano, e tanto como branco (Markovian) ou colorido (não-Markoviana)

Função memória para o ruído

- O ruído pode se acoplar à velocidade da partícula, via uma função memória, devido à excitação de graus hidrodinâmicos de liberdade



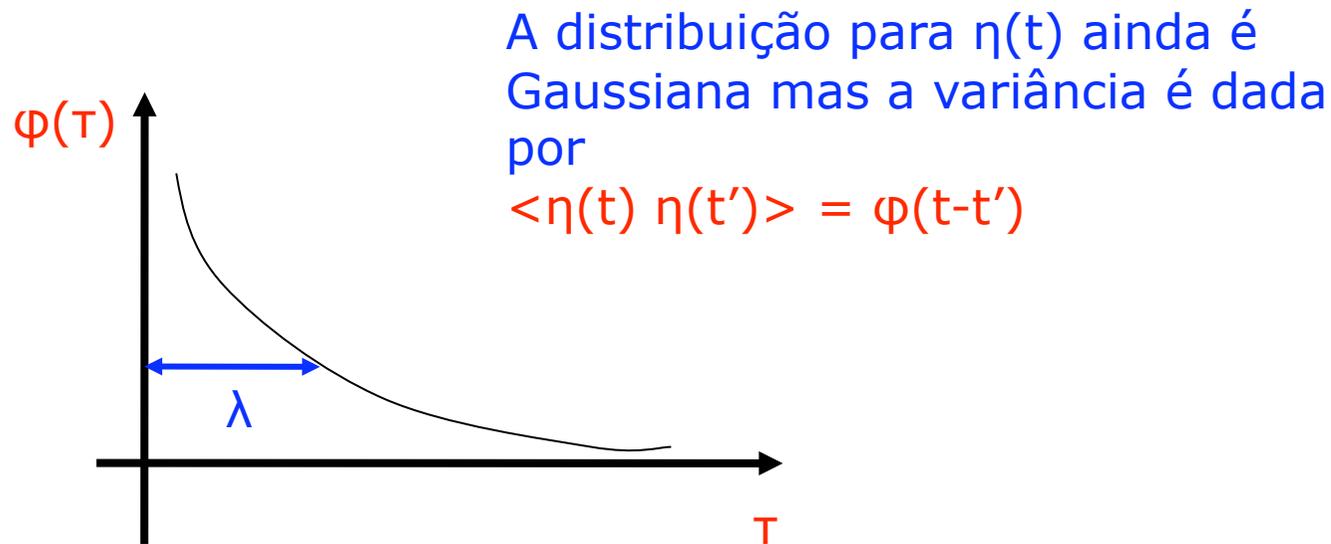
Referencial da partícula



Referencial do lab.

Ruído Colorido Gaussiano (não Markoviano)

- Se as interações entre as moléculas do fluido e a PB tem duração não nula, uma correlação temporal não-nula aparece entre ruídos a tempos diferentes.



Escala de tempo $\rightarrow \lambda$

Ruído Branco Gaussiano (Markoviano)

- Quando as colisões entre o banho térmico e a partícula Browniana são rápidas, podemos considerar que o ruído, $\eta(t)$, não tem uma escala de tempo definida e a função de correlação no tempo é

$$\langle \eta(t) \eta(t') \rangle \propto \delta(t-t')$$

- Supomos também que a forma da distribuição para $\eta(t)$ é Gaussiana.



Trabalho micro/macrosscópico

- Trabalho macroscópico é realizado de forma organizada (poucos graus de liberdade)
- Trabalho microscópico é realizado de forma desorganizada (muitos graus de liberdade)
- Para sistemas pequenos a diferenciação trabalho-calor se torna ambígua

Forma para o trabalho microscópico em 1-D (calor)

- Trabalho corresponde à força realizada pela mola sobre uma das partículas

$$dW_1 = -k' (x_1 - x_2) dx_1$$

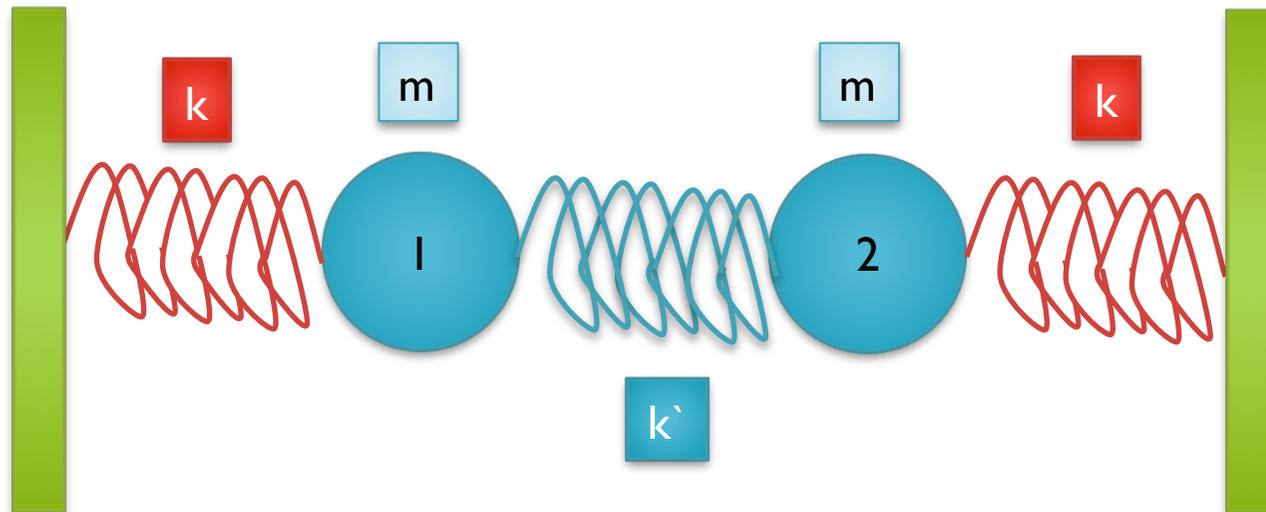
$$dW_2 = -k' (x_2 - x_1) dx_2$$

- Fluxo de energia corresponde a

$$J_{12} = (dW_1 - dW_2) / \Delta t$$

Energia local e sua transferência

- O sistema consiste de massas e molas acopladas entre si e com reservatórios térmicos.
- A energia “local” de cada partícula corresponde a sua energia cinética e a parte ($1/2$) da energia acumulada na mola que as conecta



Média temporal

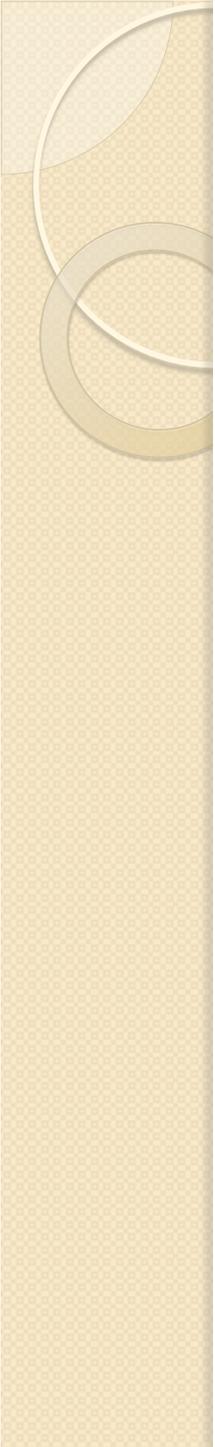
- A média temporal é dada por

$$\rho(x, v, t) = \delta[x - x(x_0, v_0, t)] \delta[v - v(x_0, v_0, t)]$$

Devemos tomar a média sobre todas as realizações do ruído para obtermos uma distribuição de densidades de probabilidade significativa.

$$\begin{aligned} P^{SS}(x, v) &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \rho(x, v, t) \rangle_{\xi, \eta} \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \langle \rho(x, v, t) \rangle_{\xi, \eta}. \end{aligned}$$

Vemos que a distribuição estacionária é naturalmente uma transformada de Laplace da distribuição de probabilidades instantânea



Média temporal → média experimental

- Qualquer experimento é realizado ao longo do tempo, sobre o mesmo sistema
- Médias experimentais são médias tomadas ao longo do tempo
- Não existe ambigüidade sobre qual ensemble deve ser o correto
- Mas são difíceis de serem obtidas explicitamente...

Busca do equilíbrio

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L \rho(t) \equiv \{H, \rho(t)\}$$


Busca do equilíbrio

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L \rho(t) \equiv \{H, \rho(t)\}$$

$$\rho(t) = e^{Lt} \rho(0)$$

Busca do equilíbrio

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L \rho(t) \equiv \{H, \rho(t)\}$$

$$\rho(t) = e^{Lt} \rho(0)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle_{ta} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \rho(t) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \rho(t) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} e^{Lt} \rho(0) \end{aligned}$$

Busca do equilíbrio

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L \rho(t) \equiv \{H, \rho(t)\}$$

$$\rho(t) = e^{Lt} \rho(0)$$

$$L\phi_n = \lambda_n \phi_n,$$

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle_{ta} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \rho(t) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \rho(t) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} e^{Lt} \rho(0) \end{aligned}$$

Busca do equilíbrio

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L \rho(t) \equiv \{H, \rho(t)\}$$

$$\rho(t) = e^{Lt} \rho(0)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle_{ta} &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \rho(t) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \rho(t) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} e^{Lt} \rho(0) \end{aligned}$$

$$L\phi_n = \lambda_n \phi_n,$$

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle_{ta} &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} e^{Lt} \rho(0) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \sum_n c_n^{(0)} e^{\lambda_n t} \phi_n \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{z}{z - \lambda_n} c_n^{(0)} \phi_n. \end{aligned}$$

Busca do equilíbrio

$$\begin{aligned}\langle \rho \rangle_{ta} &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} e^{Lt} \rho(0) \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \sum_n c_n^{(0)} e^{\lambda_n t} \phi_n \\ &= \lim_{z \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{z}{z - \lambda_n} c_n^{(0)} \phi_n.\end{aligned}$$

Coeficientes de resposta

- Seja o fluxo de calor $\langle j_{12} \rangle_{\Delta T}$ gerado pela diferença de temperatura dos reservatórios em contato com as partículas 1 e 2
- A condutividade térmica $\kappa(T, \Delta T)$ é definida por

$$\kappa(T, \Delta T) = \partial \langle j_{12} \rangle_{\Delta T} / \partial \Delta T$$

$$\langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = \langle j_{12} \rangle(T, \Delta T) = \int d\Delta T \kappa(T, \Delta T)$$

Transformada de Laplace da dinâmica

- As equações de movimento são

$$\begin{aligned}\dot{x}_1(t) &= v_1(t), \\ m_1 \dot{v}_1(t) &= -k(x_1(t) - x_2(t)) - k'x_1(t) - \gamma_1 v_1(t) + \eta_1(t), \\ \dot{x}_2(t) &= v_2(t), \\ m_2 \dot{v}_2(t) &= -k(x_2(t) - x_1(t)) - k''x_2(t) - \gamma_2 v_2(t) + \eta_2(t).\end{aligned}$$

- As transformações de Laplace para as equações de movimento são

$$\begin{aligned}\bar{x}_1(s) &= \Lambda(s) \bar{\eta}_1(s) + \Delta(s) \bar{\eta}_2(s), \\ \bar{v}_1(s) &= s \Lambda(s) \bar{\eta}_1(s) + s \Delta(s) \bar{\eta}_2(s), \\ \bar{x}_2(s) &= \Delta(s) \bar{\eta}_1(s) + \Lambda(s) \bar{\eta}_2(s), \\ \bar{v}_2(s) &= s \Delta(s) \bar{\eta}_1(s) + s \Lambda(s) \bar{\eta}_2(s),\end{aligned}$$

$$\Lambda(s) \equiv \frac{\Gamma(s)}{\Gamma^2(s) - k^2},$$

$$\Delta(s) \equiv \frac{k}{\Gamma^2(s) - k^2}.$$

$$\Gamma(s) \equiv m s^2 + \gamma s + k + k'$$

Transformação de Laplace para os ruídos

Ruído branco

$$\langle \tilde{\eta}(iq_i + \epsilon) \tilde{\eta}(iq_j + \epsilon) \rangle = \frac{2\Gamma_1 T_1}{i(q_i + q_j) + 2\epsilon}$$

Ruído colorido

$$\langle \tilde{\xi}(iq_i + \epsilon) \tilde{\xi}(iq_j + \epsilon) \rangle = \left\{ \frac{2\Gamma_2 T_2}{[i(q_i + q_j) + 2\epsilon][1 - \tau(iq_i + \epsilon)][1 - \tau(iq_j + \epsilon)]} \right\} - \Gamma_2 T_2 \tau \left\{ \frac{3 + \tau[i(q_i + q_j) + 2\epsilon] - \tau^2(iq_i + \epsilon)(iq_j + \epsilon)}{[1 - \tau(iq_i + \epsilon)][1 + \tau(iq_i + \epsilon)][1 - \tau(iq_j + \epsilon)][1 + \tau(iq_j + \epsilon)]} \right\}$$



Expressando x e v em função do ruído

Expressando \mathbf{x} e \mathbf{v} em função do ruído

$$P^{SS}(x, v) = \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} e^{-zt} \langle \delta[x - x(t)] \delta[v - v(t)] \rangle dt.$$

Expressando x e v em função do ruído

$$P^{SS}(x,v) = \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} e^{-zt} \langle \delta[x - x(t)] \delta[v - v(t)] \rangle dt.$$



$$\begin{aligned} & \langle \delta[x - x(t)] \delta[v - v(t)] \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \\ & \times \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \langle x^l(t) v^m(t) \rangle \end{aligned}$$

Expressando x e v em função do ruído

$$P^{SS}(x,v) = \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} e^{-zt} \langle \delta[x - x(t)] \delta[v - v(t)] \rangle dt.$$



$$\langle \delta[x - x(t)] \delta[v - v(t)] \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv}$$



$$\times \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \langle x^l(t) v^m(t) \rangle$$

$$P^{SS}(x,v) = \lim_{z \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!}$$

$$\times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \int_0^{\infty} \prod_{f=1}^l dt_{1f} \delta(t - t_{1f})$$

$$\times \int_0^{\infty} \prod_{h=1}^m dt_{mh} \delta(t - t_{mh}) \left\langle \prod_{f=1}^l x(t_{1f}) \prod_{h=1}^m v(t_{mh}) \right\rangle.$$

Expressando x e v em função do ruído (2)

$$\begin{aligned}
 P^{SS}(x, v) = & \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \\
 & \times \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \int_0^{\infty} \prod_{f=1}^l dt_{fj} \int_0^{\infty} \prod_{h=1}^m dt_{mh} e^{\sum_{f=1}^l (t-t_{fj})(tq_f + \epsilon) + \sum_{h=1}^m (t-t_{mh})(t p_h + \epsilon)} \left\langle \prod_{f=1}^l x(t_{fj}) \prod_{h=1}^m v(t_{mh}) \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Expressando x e v em função do ruído (2)

$$P^{SS}(x, v) = \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \int_0^{\infty} \prod_{f=1}^l dt_{fj} \int_0^{\infty} \prod_{h=1}^m dt_{mh} e^{\sum_{f=1}^l (t-t_{fj})(iq_f + \epsilon) + \sum_{h=1}^m (t-t_{mh})(ip_h + \epsilon)} \left\langle \prod_{f=1}^l x(t_{fj}) \prod_{h=1}^m v(t_{mh}) \right\rangle.$$



$$P^{SS}(x, v) = \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \\ \times \int_0^{\infty} dt z e^{-t(z - \sum_{f=1}^l (iq_f + \epsilon) - \sum_{h=1}^m (ip_h + \epsilon))} \left\langle \prod_{f=1}^l \bar{x}(iq_f + \epsilon) \prod_{h=1}^m \bar{v}(ip_h + \epsilon) \right\rangle.$$

Expressando x e v em função do ruído (2)

$$P^{SS}(x, v) = \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} z \int_0^{\infty} dt e^{-zt} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \int_0^{\infty} \prod_{f=1}^l dt_{fj} \int_0^{\infty} \prod_{h=1}^m dt_{mh} e^{\sum_{f=1}^l (t-t_{fj})(iq_f + \epsilon) + \sum_{h=1}^m (t-t_{mh})(ip_h + \epsilon)} \left\langle \prod_{f=1}^l x(t_{fj}) \prod_{h=1}^m v(t_{mh}) \right\rangle.$$

$$P^{SS}(x, v) = \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} e^{iQx} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} e^{iPv} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-iQ)^l}{l!} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-iP)^m}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \\ \times \int_0^{\infty} dt z e^{-t(z - \sum_{f=1}^l (iq_f + \epsilon) - \sum_{h=1}^m (ip_h + \epsilon))} \left\langle \prod_{f=1}^l \bar{x}(iq_f + \epsilon) \prod_{h=1}^m \bar{v}(ip_h + \epsilon) \right\rangle.$$

$$P^{SS}(x, v) = \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} \sum_{l, m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} \frac{dP}{2\pi} e^{iQx + iPv} \frac{(-iQ)^l}{l!} \frac{(-iP)^m}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \\ \times \frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l iq_f + \sum_{h=1}^m ip_h + (l+m)\epsilon \right]} \left\langle \prod_{f=1}^l \bar{x}(iq_f + \epsilon) \prod_{h=1}^m \bar{v}(ip_h + \epsilon) \right\rangle.$$

Especial atenção para com os pólos

- Devemos levar em conta os pólos de todas as funções do problema pois estes serão cruciais para a solução exata que propomos
- Em especial, os pólos das correlações de ruído serão fundamentais para encontrarmos as contribuições não nulas para o resultado final

$$\frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l iq_f + \sum_{h=1}^m ip_h + (l+m)\epsilon \right]}$$

$$\langle \tilde{\eta}(iq_i + \epsilon) \tilde{\eta}(iq_j + \epsilon) \rangle = \frac{2\Gamma_1 T_1}{i(q_i + q_j) + 2\epsilon}$$

Especial atenção para com os pólos

- Devemos levar em conta os pólos de todas as funções do problema pois estes serão cruciais para a solução exata que propomos
- Em especial, os pólos das correlações de ruído serão fundamentais para encontrarmos as contribuições não nulas para o resultado final

$$\frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l iq_f + \sum_{h=1}^m ip_h + (l+m)\epsilon \right]} \quad \langle \tilde{\eta}(iq_i + \epsilon) \tilde{\eta}(iq_j + \epsilon) \rangle = \frac{2\Gamma_1 T_1}{i(q_i + q_j) + 2\epsilon}$$

$$\langle \tilde{\xi}(iq_i + \epsilon) \tilde{\xi}(iq_j + \epsilon) \rangle = \left\{ \frac{2\Gamma_2 T_2}{[i(q_i + q_j) + 2\epsilon][1 - \tau(iq_i + \epsilon)][1 - \tau(iq_j + \epsilon)]} \right\} - \Gamma_2 T_2 \tau \left\{ \frac{3 + \tau[i(q_i + q_j) + 2\epsilon] - \tau^2(iq_i + \epsilon)(iq_j + \epsilon)}{[1 - \tau(iq_i + \epsilon)][1 + \tau(iq_i + \epsilon)][1 - \tau(iq_j + \epsilon)][1 + \tau(iq_j + \epsilon)]} \right\}$$

Especial atenção para com os pólos

- Devemos levar em conta os pólos de todas as funções do problema pois estes serão cruciais para a solução exata que propomos
- Em especial, os pólos das correlações de ruído serão fundamentais para encontrarmos as contribuições não nulas para o resultado final

$$\frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l iq_f + \sum_{h=1}^m ip_h + (l+m)\epsilon \right]} \quad \langle \tilde{\eta}(iq_i + \epsilon) \tilde{\eta}(iq_j + \epsilon) \rangle = \frac{2\Gamma_1 T_1}{i(q_i + q_j) + 2\epsilon}$$

Se $\tau \rightarrow 0$ o ruído ξ se torna branco

$$\langle \tilde{\xi}(iq_i + \epsilon) \tilde{\xi}(iq_j + \epsilon) \rangle = \left\{ \frac{2\Gamma_2 T_2}{[i(q_i + q_j) + 2\epsilon][1 - \tau(iq_i + \epsilon)][1 - \tau(iq_j + \epsilon)]} \right\} - \Gamma_2 T_2 \tau \left\{ \frac{3 + \tau[i(q_i + q_j) + 2\epsilon] - \tau^2(iq_i + \epsilon)(iq_j + \epsilon)}{[1 - \tau(iq_i + \epsilon)][1 + \tau(iq_i + \epsilon)][1 - \tau(iq_j + \epsilon)][1 + \tau(iq_j + \epsilon)]} \right\}$$

Especial atenção para com os pólos

- Devemos levar em conta os pólos de todas as funções do problema pois estes serão cruciais para a solução exata que propomos
- Em especial, os pólos das correlações de ruído serão fundamentais para encontrarmos as contribuições não nulas para o resultado final

$$\frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l i q_f + \sum_{h=1}^m i p_h + (l+m)\epsilon \right]} \quad \langle \tilde{\eta}(i q_i + \epsilon) \tilde{\eta}(i q_j + \epsilon) \rangle = \frac{2\Gamma_1 T_1}{i(q_i + q_j) + 2\epsilon}$$

Se $\tau \rightarrow 0$ o ruído ξ se torna branco

$$\langle \tilde{\xi}(i q_i + \epsilon) \tilde{\xi}(i q_j + \epsilon) \rangle = \left\{ \frac{2\Gamma_2 T_2}{[i(q_i + q_j) + 2\epsilon][1 - \tau(i q_i + \epsilon)][1 - \tau(i q_j + \epsilon)]} \right\} - \Gamma_2 T_2 \tau \left\{ \frac{1 + \tau[i(q_i + q_j) + 2\epsilon] - \tau^2(i q_i + \epsilon)(i q_j + \epsilon)}{[1 - \tau(i q_i + \epsilon)][1 + \tau(i q_i + \epsilon)][1 - \tau(i q_j + \epsilon)][1 + \tau(i q_j + \epsilon)]} \right\}$$

Contribuição = 0

Distribuição de probabilidades estacionária

$$\begin{aligned}
 P^{SS}(x, v) = & \lim_{z, \epsilon \rightarrow 0^+} \sum_{l, m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ}{2\pi} \frac{dP}{2\pi} e^{iQx+iPv} \frac{(-iQ)^l}{l!} \frac{(-iP)^m}{m!} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{f=1}^l \frac{dq_f}{2\pi} \prod_{h=1}^m \frac{dp_h}{2\pi} \\
 & \times \frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l iq_f + \sum_{h=1}^m ip_h + (l+m)\epsilon \right]} \left\langle \prod_{f=1}^l \tilde{x}(iq_f + \epsilon) \prod_{h=1}^m \tilde{v}(ip_h + \epsilon) \right\rangle.
 \end{aligned}$$

Pólos e caminho para integração

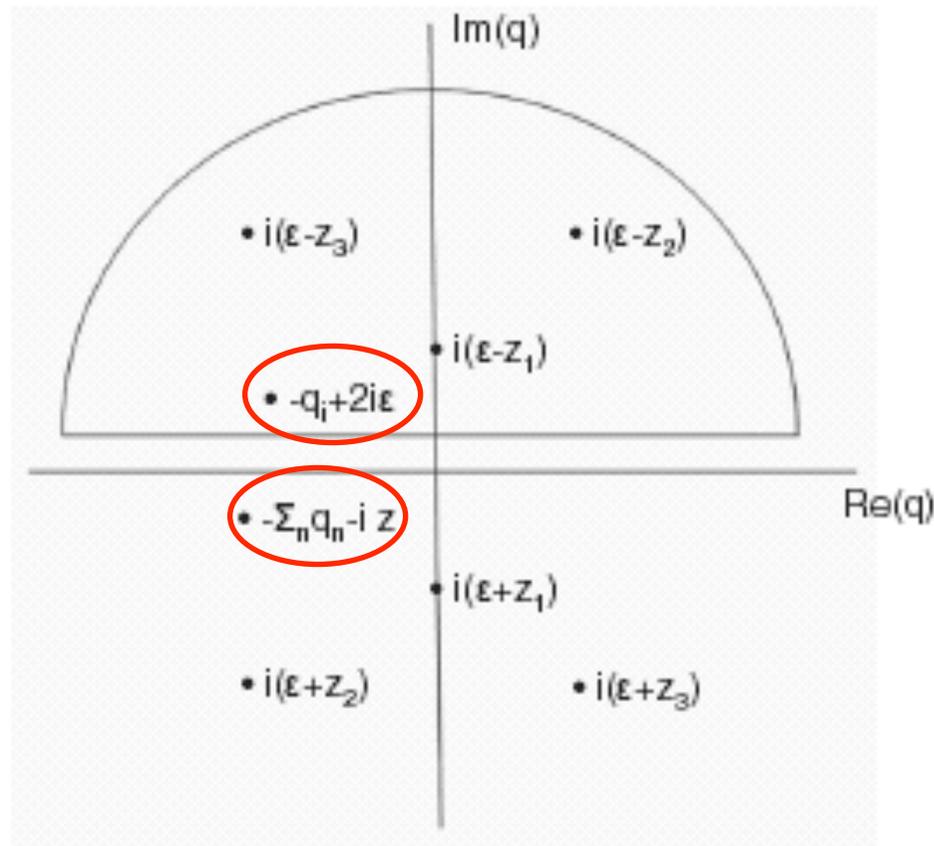


FIG. 1. Integration path for the q or p variables.

Limite $z \rightarrow 0$: função $I(z)$

- Função $I(z)$ é que “decide” se um termo do integrando contribui ou não para o valor final das distribuições.

$$I(z) = \frac{z}{z - \left[\sum_{f=1}^l iq_f + \sum_{h=1}^m ip_h + (l+m)\epsilon \right]}.$$

- Quando as integrais “carregam” resíduos para o denominador de $I(z)$, o limite $z \rightarrow 0$ faz com que $I(z \rightarrow 0) \rightarrow 0$. Assim, todos os q 's e p 's devem se cancelar mutuamente em $I(z)$:

$$\lim_{z \rightarrow 0} I(z) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{z}{z} = 1.$$

Integrações típicas

$$C_{\tilde{\alpha}_r \tilde{\beta}_s} = \int_0^\infty \frac{dq_i dq_j}{2\pi 2\pi} \frac{z}{z - i(q_i + q_j + 2\epsilon + \circ)} \langle \tilde{\alpha}_r(iq_i + \epsilon) \tilde{\beta}_s(iq_j + \epsilon) \rangle,$$

Exemplo:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \frac{dq_i dq_j}{2\pi 2\pi} \frac{z}{z - i(q_i + q_j + \circ)} \langle \tilde{x}_2(iq_i + \epsilon) \tilde{x}_2(iq_j + \epsilon) \rangle_{\Delta\Delta + \Lambda\Lambda} = \\ &= \int_0^\infty \frac{dq_i dq_j}{2\pi 2\pi} \frac{z}{z - i(q_i + q_j + \circ)} \Delta(iq_i + \epsilon) \Delta(iq_j + \epsilon) \langle \tilde{\eta}_1(iq_i + \epsilon) \tilde{\eta}_1(iq_j + \epsilon) \rangle \\ &+ \int_0^\infty \frac{dq_i dq_j}{2\pi 2\pi} \frac{z}{z - i(q_i + q_j + \circ)} \Lambda(iq_i + \epsilon) \Lambda(iq_j + \epsilon) \langle \tilde{\eta}_2(iq_i + \epsilon) \tilde{\eta}_2(iq_j + \epsilon) \rangle = \\ &= \frac{z}{z - i\circ} \{ \gamma \bar{T}_1 (2 + A_1^2) Q_{\Delta\Delta} + \gamma \bar{T}_2 (2 + A_2^2) Q_{\Lambda\Lambda} \}. \end{aligned}$$

$$Q_{\Lambda\Lambda} = \frac{k + k'}{4\gamma(k'^2 + 2kk')} + \frac{\gamma}{4[mk^2 + (k + k')\gamma^2]},$$

$$Q_{\Delta\Delta} = \frac{k^2(k + k' + \gamma^2)}{4\gamma k'(2k + k')[mk^2 + (k + k')\gamma^2]}.$$

Após uma longa conta...

- As integrais sobre as transformadas de x e v dão:

$$\begin{aligned}
 W &= \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{S=0}^{\infty} \sum_{T=0}^{\infty} \frac{(iQ_1)^M (iQ_2)^N (iP_1)^S (iP_2)^T}{M! N! S! T!} \langle \tilde{x}_1^M \tilde{x}_2^N \tilde{v}_1^S \tilde{v}_2^T \rangle \\
 &= \exp \left\{ -H [\bar{T}_1(2 + A_1^2) - \bar{T}_2(2 + A_2^2)] [Q_1 P_2 - Q_2 P_1] \right\} \times \\
 &\times \exp \left\{ - \left(\frac{Q_1^2 Q_{\Lambda\Lambda} + 2Q_1 Q_2 Q_{\Delta\Lambda} + Q_2^2 Q_{\Delta\Delta}}{2} \right) [\gamma \bar{T}_1 (2 + A_1^2)] \right. \\
 &\quad \left. - \left(\frac{Q_2^2 Q_{\Lambda\Lambda} + 2Q_1 Q_2 Q_{\Delta\Lambda} + Q_1^2 Q_{\Delta\Delta}}{2} \right) [\gamma \bar{T}_2 (2 + A_2^2)] \right\} \\
 &\times \exp \left\{ - \frac{P_1^2}{2} \left[\frac{\bar{T}_1}{m} (2 + A_1^2) \mathcal{R}_{\Lambda\Lambda} + \frac{\bar{T}_2}{m} (2 + A_2^2) \mathcal{R}_{\Delta\Delta} \right] \right\} \times \\
 &\times \exp \left\{ - \frac{P_2^2}{2} \left[\frac{\bar{T}_1}{m} (2 + A_1^2) \mathcal{R}_{\Delta\Delta} + \frac{\bar{T}_2}{m} (2 + A_2^2) \mathcal{R}_{\Lambda\Lambda} \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Estado estacionário

$$\begin{aligned}
 p^{ss}(x_1, v_1, x_2, v_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dQ_1}{2\pi} \frac{dQ_2}{2\pi} \frac{dP_1}{2\pi} \frac{dP_2}{2\pi} e^{iQ_1x_1+iP_1v_1+iQ_2x_2+iP_2v_2} \times \\
 &\times \exp \left\{ -H \left[\bar{T}_1(2 + A_1^2) - \bar{T}_2(2 + A_2^2) \right] [Q_1P_2 - Q_2P_1] \right\} \times \\
 &\times \exp \left\{ - \left(\frac{Q_1^2 Q_{\Lambda\Lambda} + 2Q_1Q_2 Q_{\Delta\Lambda} + Q_2^2 Q_{\Delta\Delta}}{2} \right) [\gamma \bar{T}_1 (2 + A_1^2)] \right. \\
 &\quad \left. - \left(\frac{Q_2^2 Q_{\Lambda\Lambda} + 2Q_1Q_2 Q_{\Delta\Lambda} + Q_1^2 Q_{\Delta\Delta}}{2} \right) [\gamma \bar{T}_2 (2 + A_2^2)] \right\} \\
 &\times \exp \left\{ -\frac{P_1^2}{2} \left[\frac{\bar{T}_1}{m} (2 + A_1^2) \mathcal{R}_{\Lambda\Lambda} + \frac{\bar{T}_2}{m} (2 + A_2^2) \mathcal{R}_{\Delta\Delta} \right] \right\} \times \\
 &\times \exp \left\{ -\frac{P_2^2}{2} \left[\frac{\bar{T}_1}{m} (2 + A_1^2) \mathcal{R}_{\Delta\Delta} + \frac{\bar{T}_2}{m} (2 + A_2^2) \mathcal{R}_{\Lambda\Lambda} \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Após fazer as contas:

$$\begin{aligned}
 p^{ss}(x_1, v_1, x_2, v_2) &= G_0 \exp \left\{ T_{x_1x_1} x_1^2 + T_{x_2x_2} x_2^2 + T_{v_1v_1} v_1^2 + T_{v_2v_2} v_2^2 + \right. \\
 &\quad \left. + T_{x_1v_1} x_1 v_1 + T_{x_1x_2} x_1 x_2 + T_{x_1v_2} x_1 v_2 + T_{x_2v_1} x_2 v_1 + T_{x_2v_2} x_2 v_2 + T_{v_1v_2} v_1 v_2 \right\}
 \end{aligned}$$

Resultados “explícitos”

$$T_{x_1x_1} = \frac{A_{11}}{4A_{12}},$$

$$T_{x_2x_2} = \frac{A_{21}}{4A_{22}} = \frac{A_{21}}{4A_{12}},$$

$$T_{v_1v_1} = \frac{m\gamma A_{31}}{4A_{32}},$$

$$T_{v_2v_2} = \frac{m\gamma A_{41}}{4A_{42}},$$

$$T_{x_1v_1} = \frac{mH Q_{\Lambda\Delta} \gamma A_{51}}{2A_{52}},$$

$$T_{x_1x_2} = \frac{Q_{\Lambda\Delta} \gamma A_{61}}{2A_{62}},$$

$$T_{x_1v_2} = -\frac{mH A_{71}}{2A_{72}},$$

$$T_{x_2v_1} = \frac{mH A_{81}}{2A_{82}},$$

$$T_{x_2v_2} = -\frac{mH Q_{\Lambda\Delta} \gamma A_{91}}{2A_{92}},$$

$$T_{v_1v_2} = -\frac{m^2 H^2 Q_{\Lambda\Delta} \gamma A_{101}}{2A_{102}}$$

A distribuição é :

$$p^{ss}(x_1, v_1, x_2, v_2) = G_0 \exp \{ T_{x_1x_1} x_1^2 + T_{x_2x_2} x_2^2 + T_{v_1v_1} v_1^2 + T_{v_2v_2} v_2^2 +$$

$$+ T_{x_1v_1} x_1 v_1 + T_{x_1x_2} x_1 x_2 + T_{x_1v_2} x_1 v_2 + T_{x_2v_1} x_2 v_1 + T_{x_2v_2} x_2 v_2 + T_{v_1v_2} v_1 v_2 \}$$

Um dos A's: A_{22}

$$\begin{aligned}
 A_{22} = & -Q_{\Delta\Delta} T_2^4 R_{\Lambda\Lambda} H^2 m\gamma + \gamma^2 T_1^4 Q_{\Lambda\Lambda} R_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} - \\
 & - 2\gamma^2 T_1 R_{\Delta\Delta} T_2^3 Q_{\Lambda\Delta}^2 R_{\Lambda\Lambda} - T_1^4 Q_{\Lambda\Lambda} R_{\Delta\Delta} H^2 m\gamma + \\
 & + \gamma^2 T_1^3 R_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} T_2 Q_{\Lambda\Lambda}^2 + \gamma^2 T_1 Q_{\Lambda\Lambda}^2 R_{\Delta\Delta} T_2^3 R_{\Lambda\Lambda} - 2\gamma^2 T_1^2 R_{\Delta\Delta} T_2^2 Q_{\Lambda\Delta}^2 R_{\Lambda\Lambda} + \\
 & + \gamma^2 Q_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} T_2^4 R_{\Lambda\Lambda} R_{\Delta\Delta} + \gamma^2 T_1^3 Q_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} T_2 R_{\Lambda\Lambda}^2 + \\
 & + \gamma^2 T_1^3 R_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} T_2 Q_{\Delta\Delta}^2 - Q_{\Lambda\Lambda} R_{\Delta\Delta} T_2^4 H^2 m\gamma - 2\gamma^2 T_1^3 R_{\Delta\Delta} Q_{\Lambda\Delta}^2 R_{\Lambda\Lambda} T_2 + \\
 & + \gamma^2 T_1 Q_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} R_{\Delta\Delta}^2 T_2^3 + \gamma^2 T_1 Q_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} T_2^3 R_{\Lambda\Lambda}^2 + \gamma^2 T_1 Q_{\Delta\Delta}^2 R_{\Delta\Delta} T_2^3 R_{\Lambda\Lambda} + \\
 & + \gamma^2 T_1^3 Q_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} R_{\Delta\Delta}^2 T_2 + 2\gamma^2 T_1^2 Q_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} R_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} T_2^2 + \\
 & + 4 T_1^2 Q_{\Lambda\Lambda} H^2 T_2^2 R_{\Lambda\Lambda} m\gamma - 2 T_1^2 Q_{\Lambda\Lambda} H^2 T_2^2 R_{\Delta\Delta} m\gamma - \\
 & - 2 T_1^2 H^2 T_2^2 Q_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} m\gamma - 2 T_1 R_{\Delta\Delta} T_2^3 H^2 Q_{\Delta\Delta} m\gamma - 2 T_1^3 Q_{\Lambda\Lambda} H^2 R_{\Lambda\Lambda} T_2 m\gamma + \\
 & + 4 T_1^2 H^2 Q_{\Delta\Delta} T_2^2 R_{\Delta\Delta} m\gamma + 2 T_1 Q_{\Lambda\Lambda} R_{\Delta\Delta} T_2^3 H^2 m\gamma + 2 T_1^3 Q_{\Lambda\Lambda} R_{\Delta\Delta} H^2 T_2 m\gamma + \\
 & + 2 T_1 T_2^3 R_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} H^2 m\gamma - 2 T_1 Q_{\Lambda\Lambda} T_2^3 R_{\Lambda\Lambda} H^2 m\gamma + \\
 & + 2 T_1^3 H^2 Q_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} T_2 m\gamma - 2 T_1^3 R_{\Delta\Delta} Q_{\Delta\Delta} H^2 T_2 m\gamma + \\
 & + \gamma^2 T_1^2 Q_{\Delta\Delta}^2 R_{\Delta\Delta}^2 T_2^2 - \gamma^2 T_1^4 R_{\Delta\Delta} R_{\Lambda\Lambda} Q_{\Lambda\Delta}^2 - \gamma^2 T_1^3 R_{\Delta\Delta}^2 T_2 Q_{\Lambda\Delta}^2 + \\
 & + \gamma^2 T_1^2 Q_{\Lambda\Lambda}^2 R_{\Delta\Delta}^2 T_2^2 + \gamma^2 T_1^2 Q_{\Delta\Delta}^2 T_2^2 R_{\Lambda\Lambda}^2 - \\
 & - \gamma^2 T_1^3 T_2 R_{\Lambda\Lambda}^2 Q_{\Lambda\Delta}^2 - \gamma^2 T_1 T_2^3 R_{\Lambda\Lambda}^2 Q_{\Lambda\Delta}^2 - \gamma^2 R_{\Delta\Delta} T_2^4 Q_{\Lambda\Delta}^2 R_{\Lambda\Lambda} + \\
 & + \gamma^2 T_1^2 Q_{\Lambda\Lambda}^2 T_2^2 R_{\Lambda\Lambda}^2 - 2\gamma^2 T_1^2 R_{\Delta\Delta}^2 Q_{\Lambda\Delta}^2 T_2^2 - \\
 & - 2\gamma^2 T_1^2 T_2^2 R_{\Lambda\Lambda}^2 Q_{\Lambda\Delta}^2 - \gamma^2 T_1 R_{\Delta\Delta}^2 T_2^3 Q_{\Lambda\Delta}^2 - \\
 & - T_1^4 H^2 R_{\Lambda\Lambda} Q_{\Delta\Delta} m\gamma + 6 m^2 T_1^2 H^4 T_2^2 + m^2 T_1^4 H^4 - 4 m^2 T_1^3 H^4 T_2 - \\
 & - 4 m^2 T_1 H^4 T_2^3 + m^2 H^4 T_2^4,
 \end{aligned}$$

Conductividade térmica partícula-partícula

$$\langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = -k \left\langle (x_1 - x_2) \left(\frac{v_1 + v_2}{2} \right) \right\rangle = -\frac{k}{2} (\langle x_1 v_2 \rangle - \langle x_2 v_1 \rangle)$$

$$\Rightarrow \langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = -\frac{k(D_1 - D_3)}{2D_2}$$

Conductividade térmica partícula-partícula

$$\langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = -k \left\langle (x_1 - x_2) \left(\frac{v_1 + v_2}{2} \right) \right\rangle = -\frac{k}{2} (\langle x_1 v_2 \rangle - \langle x_2 v_1 \rangle)$$

$$\Rightarrow \langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = -\frac{k(D_1 - D_3)}{2D_2}$$

Onde

$$D_1 = 4 T_{x_1 v_2} T_{x_2 x_2} T_{v_1 v_1} - T_{x_1 v_2} T_{x_2 v_1}^2 - 2 T_{x_1 x_2} T_{x_2 v_2} T_{v_1 v_1} - \\ - 2 T_{x_1 v_1} T_{x_2 x_2} T_{v_1 v_2} + T_{x_1 v_1} T_{x_2 v_1} T_{x_2 v_2} + T_{v_1 v_2} T_{x_1 x_2} T_{x_2 v_1}$$

Conductividade térmica partícula-partícula

$$\langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = -k \left\langle (x_1 - x_2) \left(\frac{v_1 + v_2}{2} \right) \right\rangle = -\frac{k}{2} (\langle x_1 v_2 \rangle - \langle x_2 v_1 \rangle)$$

$$\Rightarrow \langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = -\frac{k(D_1 - D_3)}{2D_2}$$

Onde

$$D_1 = 4 T_{x_1 v_2} T_{x_2 x_2} T_{v_1 v_1} - T_{x_1 v_2} T_{x_2 v_1}^2 - 2 T_{x_1 x_2} T_{x_2 v_2} T_{v_1 v_1} - \\ - 2 T_{x_1 v_1} T_{x_2 x_2} T_{v_1 v_2} + T_{x_1 v_1} T_{x_2 v_1} T_{x_2 v_2} + T_{v_1 v_2} T_{x_1 x_2} T_{x_2 v_1}$$

$$\Rightarrow \langle j_{12} \rangle_{\Delta T} = 2kH\Delta T \Rightarrow \kappa = \frac{k^2 \gamma}{2 [m k^2 + \gamma^2 (k + k')]}$$

Cálculo analítico

- Seja a forma apropriada para sistemas pequenos:

$$\begin{aligned}\kappa &= \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\Omega} \int_0^{\Omega} dt \frac{1}{T^2} \int_0^{\infty} d\tau \langle j_{12}(t+\tau) j_{12}(t) \rangle_{\Delta T=0}, \\ &= \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \lim_{\theta \rightarrow 0^+} \frac{1}{\Omega} \int_0^{\Omega} dt \frac{1}{T^2} \int_0^{\infty} d\tau e^{-\theta\tau} \langle j_{12}(t+\tau) j_{12}(t) \rangle_{\Delta T=0}\end{aligned}$$

- A forma da corrente é a mesma anterior

$$j_{12} = -k(x_1(t) - x_2(t)) \left(\frac{v_1(t) + v_2(t)}{2} \right).$$

Etapas siguientes

$$\begin{aligned}
 \kappa &= \lim_{z \rightarrow 0^+} \lim_{\theta \rightarrow 0^+} z \int_0^\infty dt e^{-zt} \frac{k^2}{T^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\theta\tau} \times \\
 &\times \left\langle \left[(x_1(t+\tau) - x_2(t+\tau)) \left(\frac{v_1(t+\tau) + v_2(t+\tau)}{2} \right) \right] \times \right. \\
 &\times \left. \left[(x_1(t) - x_2(t)) \left(\frac{v_1(t) + v_2(t)}{2} \right) \right] \right\rangle_{\Delta T=0} . \\
 &= \lim_{z \rightarrow 0^+} \lim_{\theta \rightarrow 0^+} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{k^2}{16 T^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_2}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_3}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_4}{2\pi} \times \\
 &\times \frac{z}{z - [(iq_1 + \epsilon) + (iq_2 + \epsilon) + (iq_3 + \epsilon) + (iq_4 + \epsilon)]} \frac{1}{\theta - [(iq_1 + \epsilon) + (iq_3 + \epsilon)]} \times \\
 &\times \langle [(\tilde{x}_1(iq_1 + \epsilon) - \tilde{x}_2(iq_1 + \epsilon)) (\tilde{v}_1(iq_3 + \epsilon) + \tilde{v}_2(iq_3 + \epsilon))] \times \\
 &\times [(\tilde{x}_1(iq_2 + \epsilon) - \tilde{x}_2(iq_2 + \epsilon)) (\tilde{v}_1(iq_4 + \epsilon) + \tilde{v}_2(iq_4 + \epsilon))] \rangle .
 \end{aligned}$$

Etapas siguientes

$$\begin{aligned}
 \kappa &= \lim_{z \rightarrow 0^+} \lim_{\theta \rightarrow 0^+} z \int_0^\infty dt e^{-zt} \frac{k^2}{T^2} \int_0^\infty d\tau e^{-\theta\tau} \times \\
 &\times \left\langle \left[(x_1(t+\tau) - x_2(t+\tau)) \left(\frac{v_1(t+\tau) + v_2(t+\tau)}{2} \right) \right] \times \right. \\
 &\times \left. \left[(x_1(t) - x_2(t)) \left(\frac{v_1(t) + v_2(t)}{2} \right) \right] \right\rangle_{\Delta T=0} . \\
 &= \lim_{z \rightarrow 0^+} \lim_{\theta \rightarrow 0^+} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{k^2}{16 T^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_2}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_3}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq_4}{2\pi} \times \\
 &\times \frac{z}{z - [(iq_1 + \epsilon) + (iq_2 + \epsilon) + (iq_3 + \epsilon) + (iq_4 + \epsilon)]} \frac{1}{\theta - [(iq_1 + \epsilon) + (iq_3 + \epsilon)]} \times \\
 &\times \langle [(\tilde{x}_1(iq_1 + \epsilon) - \tilde{x}_2(iq_1 + \epsilon)) (\tilde{v}_1(iq_3 + \epsilon) + \tilde{v}_2(iq_3 + \epsilon))] \times \\
 &\times [(\tilde{x}_1(iq_2 + \epsilon) - \tilde{x}_2(iq_2 + \epsilon)) (\tilde{v}_1(iq_4 + \epsilon) + \tilde{v}_2(iq_4 + \epsilon))] \rangle .
 \end{aligned}$$

E finalmente $\rightarrow \kappa = \frac{k^2 \gamma}{2 [m k^2 + \gamma^2 (k + k')]} ,$

Agradecimentos

