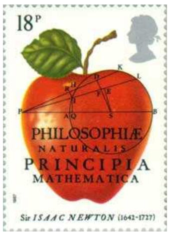

Exame da Escola Avançada de Física Teórica

Nome:

29 de julho de 2016

Propagador de uma partícula sob uma força constante

Considere uma partícula de massa m restrita ao movimento unidimensional sob a ação de um potencial linear $\hat{V}(x) = ma\hat{x}$. Obtenha o propagador $i\hbar G(x, t, 0, 0)$ dessa partícula ir da coordenada $(x_i, t_i) = (0, 0)$ até a coordenada $(x_f, t_f) = (x, t)$.

Dica: Reescreva as trajetórias em relação à trajetória clássica $x = x_{\mathrm{cl}} + \eta$ e use que o propagador da partícula livre é igual a $i\hbar G(x_f, t_f, x_i, t_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t_f - t_i)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \times \frac{m(x_f - x_i)^2}{2(t_f - t_i)}\right)$.

- Relação de Jarzynski ($\langle e^{-W/k_B T} \rangle = e^{-\Delta F/k_B T}$) para sistemas clássicos.

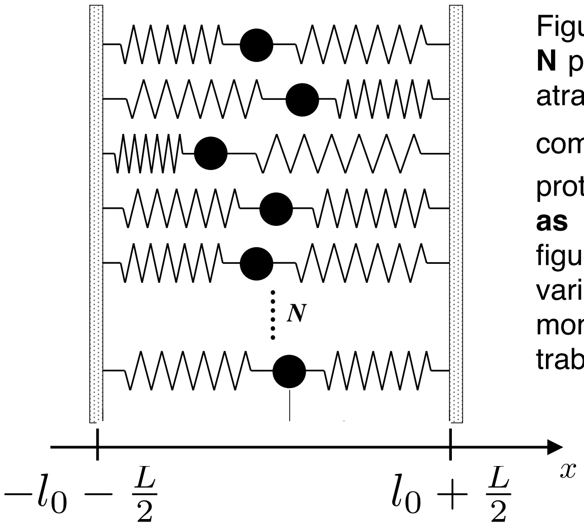

Figura: Representação esquemática do sistema de interesse. **N** partículas de massa **m** estão conectadas à duas paredes através de molas harmônicas. Todas as molas são idênticas, com frequência angular **ω** e comprimento natural ℓ_0. O protocolo de trabalho consistirá em **variar a distância entre as paredes**, de tal modo que o parâmetro **L** indicado na figura será uma função do tempo, i.e., **L** = **L**(t). Assim, as variáveis estocásticas do problema são as posições e momenta das partículas e o agente externo pode realizar trabalho alterando a distância entre as paredes.

- Para este sistema a diferença de energia livre de Helmholtz entre estados de equilíbrio à temperatura **T** com **L = L₁ e L = L₀** é dada por:

$$\Delta F \equiv F(L_1, T) - F(L_0, T) = N \tfrac{m\omega^2}{4}(L_1^2 - L_0^2)$$

Onde consideramos que: $\int_{-l_0-\frac{L}{2}}^{+l_0+\frac{L}{2}} (\cdot)dx \approx \int_{-\infty}^{+\infty} (\cdot)dx$

Para verificar Jarzynski no protocolo descrito, siga os passos:

a) Determine o Hamiltoniano do sistema.
b) Perceba que a equação de movimento da n-ésima partícula não depende de **L(t)**, sendo:

$$\frac{d^2 x_n}{dt^2} = -2\omega^2 x_n \qquad \Rightarrow x_n(t) = x_n(0)\cos(\sqrt{2}\omega t) + \frac{\dot{x}_n(0)}{\sqrt{2}\omega}\sin(\sqrt{2}\omega t)$$

c) Verifique que o trabalho realizado sobre a n-ésima partícula não depende das suas condições iniciais, sendo dado por:

$$W_n = \tfrac{m\omega^2}{4}(L(t_f)^2 - L(t_i)^2)$$

d) Calcule $\langle e^{-W/k_b T} \rangle$ assumindo que o sistema de **N** partículas está inicialmente em equilíbrio térmico com temperatura **T** e que **L(t$_f$)= L₁** e **L(t$_i$)= L₀** . (Fim da verificação).

Um resultado imediato da análise descrita é o de que a densidade de probabilidade do trabalho no protocolo considerado é uma função delta de Dirac no valor $W = Nm\omega^2(L_1^2 - L_0^2)/4$.

Híjae e Zárate (Eur. J. Phys. **31**, 1097 (2010)) analisaram este mesmo problema considerando que **apenas a parede da direita se movia**. Supondo um protocolo linear L(t)= L_0 + V t, eles obtiveram que o trabalho sobre a n-ésima partícula dependia das suas condições iniciais e que a densidade de probabilidade era uma gaussiana, a saber:

$$W_n = \phi(t) - p_0\frac{V}{2}(1 - \cos\sqrt{2}\omega t) - \left(x_0 - l_0 - \frac{1}{2}L_0\right)\frac{m\omega V}{\sqrt{2}}\sin\sqrt{2}\omega t,$$
$$P_F(W) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left[-\frac{(W - N\phi)^2}{2\sigma^2}\right]$$

Naturalmente, apesar dessas diferenças, eles também verificaram que a relação de Jarzynski era satisfeita.

Você teria alguma intuição física da razão pela qual o trabalho calculado e a sua densidade de probabilidade do nosso problema foram tão diferentes do resultado de Híjae e Zárate?