**Mecânica Estatística - IFUSP - 13/11/2017**
**exercícios adicionais - dinâmica de Langevin**

"... dibujamos con nuestros movimientos una figura idéntica a la que dibujan las moscas cuando vuelan en una pieza, de aquí para allá, bruscamente dan media vuelta, de allá para aquí, eso es lo que se llama movimiento brownoideo, ¿ahora entendés?, un ángulo recto, una línea que sube, de aquí para allá, del fondo al frente, hacia arriba, hacia abajo, espasmódicamente, frenando en seco y arrancando en el mismo instante en otra dirección, y todo eso va tejiendo un dibujo, una figura, algo inexistente como .... los dos puntos perdidos en París que van de aquí para allá, de allá para aquí, haciendo su dibujo, ...."

(Julio Cortazar, Rayuela, 1963, ...)

**1-** A equação de Langevin para uma partícula de massa $m$ em uma dimensão é dada por

$$m\frac{dv}{dt} = -\alpha v + F_a(t),$$

em que $v$ é a velocidade, $\alpha > 0$ é a constante de atrito viscoso, e a força aleatória $F_a(t)$ obedece as relações

$$\langle F_a(t)\rangle = 0, \qquad \langle F_a(t)\, F_a(t')\rangle = B\delta(t-t'),$$

em que $\langle ...\rangle$ representa uma média estatística, o coeficiente $B$ depende da temperatura, e $\delta(t)$ é a "função delta de Dirac".

(a) Obtenha expressões para os valores esperados $\langle v(t)\rangle$ e $\langle v(t)\, v(t')\rangle$, com $t > t'$.

(b) Obtenha uma expressão para $B$ supondo que esse sistema atinja o equilíbrio gibbssiano para tempos muito longos. Isto é, suponha que

$$\left\langle \frac{1}{2}mv^2 \right\rangle \to \frac{1}{2}k_B T$$

quando $t \to \infty$.

**2-** Na presença de uma força conservativa, associada a um potencial $U(x)$, a equação de Langevin é dada por

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\alpha\frac{dx}{dt} - \frac{dU}{dx} + F_a(t).$$

No limite de inércia muito grande, podemos descartar o primeiro termo e escrever

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{1}{\alpha}\frac{dU}{dx} + \frac{1}{\alpha}F_a\left(t\right).$$

Fazendo $\alpha = 1$, que é equivalente a um escolha das unidades de tempo, essa equação dá origem à "dinâmica de Langevin",

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{dU}{dx} + \xi\left(t\right),$$

com

$$\left\langle \xi\left(t\right)\right\rangle = 0; \qquad \left\langle \xi\left(t\right)\xi\left(t'\right)\right\rangle = 2k_B T\delta\left(t-t'\right).$$

(a) Considere uma partícula unidimensional na presença de um potencial harmônico, $U = (1/2)\,kx^2$, em que $k > 0$ é uma constante de mola. Utilize a "dinâmica de Langevin" para mostrar que

$$\left\langle \frac{1}{2}kx^2\right\rangle \to \frac{1}{2}k_B T$$

na situação de equilíbrio.

(b) Em trabalho publicado há pouco tempo - ver V. Dotsenko, A. Maciolek, O. Vasilyev e G. Oshanin, Phys. Rev. E **87**, 062130, 2013 - os autores analisaram a dinâmica de Langevin de uma partícula num espaço bidimensional, na presença de um potencial parabólico e de dois reservatórios térmicos com temperaturas diferentes, $T_1$ e $T_2$, associadas às direções $x$ e $y$. Nessa situação, escrevem-se duas equações acopladas,

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x}U\left(x,y\right) + \xi_x\left(t\right); \qquad \frac{dy}{dt} = -\frac{\partial}{\partial y}U\left(x,y\right) + \xi_y\left(t\right),$$

com $\left\langle \xi_x\left(t\right)\right\rangle = \left\langle \xi_y\left(t\right)\right\rangle = 0$, $\left\langle \xi_x\left(t\right)\xi_x\left(t'\right)\right\rangle = 2T_1\delta\left(t-t'\right)$, $\left\langle \xi_y\left(t\right)\xi_y\left(t'\right)\right\rangle = 2T_2\delta\left(t-t'\right)$, $\left\langle \xi_x\left(t\right)\xi_y\left(t'\right)\right\rangle = 0$, em que $T_1 \neq T_2$, e o potencial é dado por

$$U\left(x,y\right) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}y^2 + uxy,$$

com $|u| < 1$ (note que Dotsenko e colaboradores tomam $k = 1$ e temperaturas em unidades de $k_B$). Para tempos longos ($t \to \infty$), mostre que

$$\left\langle x^2\right\rangle = \frac{T_1 + \frac{1}{2}u^2\left(T_2 - T_1\right)}{1-u^2}; \qquad \left\langle y^2\right\rangle = \frac{T_2 + \frac{1}{2}u^2\left(T_1 - T_2\right)}{1-u^2}.$$

Qual o significado dessas expressões?

**3-** Nas vizinhanças do ponto crítico de um sistema ferromagnético, a energia livre de Landau pode ser escrita na forma

$$g = a\left(T - T_c\right) m^2 + m^4,$$

em que $a$ é uma constante positiva e $T_c$ é a temperatura crítica. Utilize a equação de Langevin,

$$\frac{dm}{dt} = -\frac{\partial g}{\partial m} + \eta\left(t\right),$$

com

$$\left\langle \eta\left(t\right)\right\rangle = 0 \qquad \text{e} \qquad \left\langle \eta\left(t\right)\eta\left(t'\right)\right\rangle = 2T\delta\left(t - t'\right),$$

para estudar o comportamento dinâmico desse sistema **acima da temperatura crítica**.

(i) Qual a dependência com a temperatura do tempo de relaxação? Qual a relação desse resultado com as dificuldades de medidas experimentais nas vizinhanças de um ponto crítico?

(ii) Obtenha uma expressão para a autocorrelação,

$$C\left(t_2, t_1\right) = \left\langle m\left(t_2\right) m\left(t_1\right)\right\rangle,$$

com $t_2 > t_1 > t_0 = 0$ (suponha que $m\left(t_0\right) = 0$). Em que condições essa expressão depende apenas da diferença $t_2 - t_1$?

(iii) Adicionando um pequeno campo magnético, $H = H\left(t\right)$, a energia livre é dada por

$$g = a\left(T - T_c\right) m^2 + m^4 - mH.$$

No limite de campo nulo, obtenha uma expressão para a "resposta" a esse campo,

$$R\left(t_2, t_1\right) = \frac{\delta\left\langle m\left(t_2\right)\right\rangle}{\delta H\left(t_1\right)}.$$

Mostre que

$$X = \frac{TR\left(t_2, t_1\right)}{\frac{\partial}{\partial t_1}\left[C\left(t_2, t_1\right)\right]} = \left[1 + \exp\left(-\frac{2t_1}{\tau}\right)\right]^{-1},$$

onde $\tau$ é o tempo de relaxação (que se torna infinito no ponto crítico). Portanto, $X \to 1$ apenas para $t_2 > t_1 \to \infty$ e $T \neq T_c$.