

**Propriedades do transporte de calor em cristais
harmônicos e anarmônicos com massas
alternadas**

Leonardo Miranda Santana

Abril de 2012

Propriedades do transporte de calor em cristais harmônicos e anarmônicos com massas alternadas

Leonardo Miranda Santana
Orientador: Prof. Emmanuel Araújo Pereira

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de mestre em Física.

Abril de 2012

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a Deus, por ter-me encaminhado em mais uma etapa. Aos meus pais, aos meus irmãos e à minha avó, pelo apoio. Ao Prof. Emmanuel Pereira, pela orientação e pelos bons conselhos. Aos professores do departamento, pelos bons cursos ministrados, tanto na Graduação, quanto na Pós-Graduação. Aos funcionários do departamento, pela solicitude. Aos colegas, pela amizade. Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Sumário

Resumo	v
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 Cadeia de osciladores harmônicos quânticos fora do equilíbrio	5
2.1 Equações de “Langevin” quânticas	5
2.1.1 Integração das equações de Heisenberg para os reservatórios	7
2.1.2 A equação de “Langevin” quântica	14
2.1.3 Correlações de equilíbrio para os reservatórios	15
2.1.4 Correlações dos ruídos	20
2.1.5 Solução estacionária das equações de “movimento”	21
2.1.6 Correlações dos ruídos no domínio das frequências	23
2.2 Correntes estacionárias	26
2.2.1 Igualdade das correntes e a relação flutuação-dissipação	34
2.3 Cadeia de osciladores harmônicos quânticos com massas alternadas	36
2.3.1 Limite termodinâmico e estrutura de bandas	51
2.3.2 Limite de altas temperaturas (clássico)	66
2.3.3 Limite de baixas temperaturas	74
3 Cadeia clássica fora do equilíbrio sujeita a um potencial <i>on-site</i> anarmônico	82
3.1 Descrição do modelo	83
3.2 Fluxos de energia em uma cadeia clássica fora do equilíbrio	86
3.3 Um método aproximativo para o estudo do modelo anarmônico	89
3.4 Análise de cadeias anarmônicas	99

4	Conclusão	108
A	Cálculo do determinante D_n^0	110
B	Cálculo do determinante $D_n^{(1)}$	117
C	Invertibilidade de $Z^0(\omega)$ no semi-plano superior $\text{Im}(\omega) \geq 0$	125
D	Cálculo da corrente no limite clássico	132
E	Cálculo de $e^{-\tau\mathcal{A}}$	143
	Referências	145

Resumo

Investigamos analiticamente o transporte de calor em alguns cristais unidimensionais com massas alternadas, cujas extremidades são ligadas a reservatórios térmicos a duas diferentes temperaturas. Analisamos as versões quântica e clássica do modelo harmônico, para o qual a lei de Fourier não é válida, bem como uma cadeia clássica de osciladores com reservatórios auto-consistentes ligados aos sítios internos e sujeita a um potencial *on-site* anarmônico, caso em que a lei de Fourier é válida.

Para o modelo harmônico no regime clássico de altas temperaturas, calculamos rigorosamente a expressão exata da corrente de calor, assim estendendo resultados da literatura. Mostramos que um efeito termo-isolante surge em uma cadeia com massas grandes e pequenas se alternando, quando esta é comparada a uma cadeia homogênea com massas grandes, sendo o efeito consideravelmente mais pronunciado na ausência do potencial *on-site*. Também analisamos o modelo harmônico no regime de resposta linear e baixas temperaturas, para o qual os efeitos quânticos se tornam importantes. Neste último caso, obtemos estimativas para a corrente de calor tanto numa cadeia homogênea com massas muito grandes, quanto numa cadeia de massas grandes e pequenas alternadas, assim mostrando que o efeito isolante observado no limite clássico ainda é válido no regime de baixas temperaturas.

Finalmente, usamos uma abordagem não-rigorosa para estudar o transporte de calor em um modelo clássico não-linear com reservatórios auto-consistentes ligados aos sítios internos. Obtemos expressões aproximadas para a corrente de calor e para o perfil de temperatura no estado estacionário de não-equilíbrio. Então mostramos que um efeito isolante similar ao observado no modelo harmônico com condutividade anômala também é válido para este modelo clássico, não-linear e com condutividade normal. Um efeito similar também ocorre se os potenciais *on-site* são alternados, ao invés das massas das partículas.

A existência de tal efeito isolante em modelos tão diferentes entre si quanto os que analisamos indica que esta deve ser uma propriedade geral de sistemas com massas alternadas, com possíveis aplicações no controle do fluxo de calor.

Abstract

We analytically investigate the heat transport in a few one-dimensional crystals with alternate masses, whose ends are connected to thermal reservoirs at unequal temperatures. We consider both the quantum and classical versions of the harmonic model, for which the Fourier law does not hold, as well as a classical chain of oscillators with self-consistent reservoirs connected to the inner sites and subject to an anharmonic on-site potential, in which case the Fourier law does hold.

For the harmonic model in the classical high temperature regime, we rigorously calculate the exact expression of the heat current, thus extending previous results in the literature. We show that a thermal insulating effect emerges in a chain with alternate large and small masses as compared to a homogeneous chain with large masses, the effect being considerably more pronounced in the absence of the on-site potential. We also analyze the harmonic model in the linear-response, low-temperature regime, for which the quantum mechanical effects become important. In the latter case, we obtain estimates for the heat current in both the homogeneous large-mass chain and the one with alternate large and small masses, thus showing that the insulating effect observed in the classical limit still holds in the low-temperature regime.

Finally, we follow a non-rigorous approach in order to study the heat transport in a classical nonlinear model with self-consistent reservoirs connected to the inner sites. We obtain approximate expressions for both the heat current and the temperature profile in the non-equilibrium stationary state. We then show that an insulating effect similar to the one observed in the harmonic model with anomalous thermal conductivity also holds for this nonlinear classical model with normal conductivity. A similar effect holds if the on-site potentials are alternated, instead of the particle masses.

The existence of such insulating effect in models as different to one another as the ones we analyze indicates that it may be a general property of one-dimensional systems with alternate masses, with possible applications in the heat-flow control.

Capítulo 1

Introdução

Desde a formulação da mecânica estatística de equilíbrio no século XIX, inúmeras leis empíricas da termodinâmica puderam ser compreendidas do ponto de vista da estrutura microscópica da matéria. A teoria desenvolvida por Boltzmann, Gibbs e Maxwell sintetizou, em poucos princípios gerais, a descrição microscópica de fenômenos de equilíbrio observados na escala macroscópica. Ao prescrever o cálculo de médias em determinados ensembles estatísticos, a mecânica estatística de equilíbrio eliminou a necessidade de se estudar a evolução temporal de sistemas microscópicos regidos pelas leis da mecânica (clássica ou quântica). Esta simplificação não é válida para sistemas fora do equilíbrio termodinâmico, para os quais não existe uma teoria geral que estabeleça de forma simples a conexão entre a dinâmica microscópica e as propriedades físicas macroscópicas.

Dentre os fenômenos de não-equilíbrio, incluem-se os fenômenos de transporte, cujas leis empíricas são conhecidas desde longa data. Em particular, a condução de calor em um material é descrita pela lei empírica conhecida como lei de Fourier, que estabelece a proporcionalidade entre o fluxo de calor e o gradiente de temperatura. Matematicamente, a lei de Fourier pode ser expressa como

$$\mathbf{J} = -\kappa \nabla T \quad ,$$

sendo \mathbf{J} a corrente de calor, κ a condutividade térmica e ∇T o gradiente de temperatura.

A dedução rigorosa da lei de Fourier por primeiros princípios, i.e., a partir de um modelo microscópico com evolução determinística (*e.g.* hamiltoniana) ainda é

um problema em aberto [1]. Por outro lado, vários estudos numéricos testaram a validade da lei de Fourier em diversos modelos [2, 3], lançando alguma luz sobre as possíveis condições necessárias e/ou suficientes para que uma condutividade térmica normal seja observada.

Em um artigo seminal [4], Rieder, Lebowitz e Lieb mostraram, com argumentos matematicamente rigorosos, que uma cadeia de N osciladores harmônicos fora do equilíbrio térmico não obedece a lei de Fourier, apresentando uma condutividade térmica que diverge no limite $N \rightarrow \infty$. Isto significa que modelos hamiltonianos mais realistas devem incluir algum tipo de anarmonicidade. No entanto, a não linearidade das equações dinâmicas que descrevem os sistemas anarmônicos impõe grandes dificuldades matemáticas ao estudo analítico dos mesmos, de modo que a quase totalidade dos trabalhos acerca desses modelos são estudos numéricos. Em um artigo recente [5], Bricmont e Kupiainen partiram de uma aproximação não rigorosa e derivaram a lei de Fourier para um sistema multidimensional de osciladores acoplados sujeito a um potencial *on-site* quártico de fraca intensidade.

Ainda no contexto das condições necessárias à validade da lei de Fourier (a primeira delas é a presença de anarmonicidade), insere-se a discussão acerca da relação entre a conservação do momento total do sistema e a divergência da condutividade térmica com o tamanho do sistema. A Ref. [6] apresenta uma suposta prova de que a conservação do momento total de qualquer sistema unidimensional leva a uma condutividade térmica anômala. Entretanto, a Ref. [7] indica um contra-exemplo que viola essa regra, o modelo do rotor. Já a Ref. [8] afirma que há um erro no argumento de [6], ainda que a conclusão seja válida em condições relativamente gerais. Também destacamos o artigo [9], que mostra de maneira inequívoca a importância da não conservação do momento para a validade da lei de Fourier no caso específico de uma rede de osciladores harmônicos perturbada por uma dinâmica estocástica, que por sua vez conserva tanto o momento quanto a energia do sistema. Chamando de N o tamanho do sistema (i.e., o número de sítios numa linha reta entre os dois banhos térmicos) e d a sua dimensão, os autores mostram o seguinte resultado: na ausência do potencial *on-site*, a condutividade diverge como $\sim N$ se $d = 1$, $\sim \ln N$ se $d = 2$ e tende para um valor finito se $d \geq 3$; na presença do potencial *on-site*, que quebra a conservação do momento, a condutividade tende para um valor finito em qualquer dimensão.

Em busca de um modelo efetivo que descrevesse, de maneira simplificada, o efeito

de forças não lineares ausentes na hamiltoniana do sistema, os autores de [10] introduziram, nos sítios internos de uma cadeia de osciladores harmônicos, reservatórios estocásticos auto-consistentes (i.e., suas temperaturas são definidas de modo que, na média, não haja troca de energia com os respectivos sítios no estado estacionário). Posteriormente, Bonetto, Lebowitz e Lukkarinen [11] demonstraram rigorosamente a validade da Lei de Fourier para esse modelo e para a sua versão multidimensional. Uma versão quântica desse modelo é estudada na Ref. [12].

Um aspecto de grande interesse, tanto teórico quanto prático, no estudo das propriedades da condução de calor em modelos microscópicos é a possibilidade de manipulação de materiais para controle do fluxo de calor. Um exemplo é o dispositivo conhecido como diodo ou retificador térmico, proposto por Terraneo *et al.* em 2002 [13]. De modo análogo ao diodo utilizado na eletrônica, o diodo térmico é um dispositivo que conduz calor a taxas diferentes quando se inverte o gradiente de temperatura a que o sistema está submetido. Desde o trabalho de Terraneo, o fenômeno da retificação térmica vem sendo intensamente investigado, principalmente em simulações computacionais [14, 15]. A engenharia de materiais e a nanotecnologia também tornaram possível a manipulação de materiais no nível molecular para a construção de tais dispositivos em laboratório [16].

Neste trabalho, estudaremos o transporte de calor em dois modelos representando cristais dielétricos unidimensionais com massas alternadas. Nosso objetivo será investigar analiticamente o efeito das massas das partículas no fluxo de calor nesses sistemas. O estudo de sistemas com diferentes massas é recorrente na literatura: cadeias desordenadas contendo massas aleatórias [17], cadeias ordenadas com massas variando periodicamente [23] e sistemas de massas alternadas [18, 19, 28, 30, 31] são alguns exemplos.

O restante do texto se organiza como segue. No Cap. 2, estudamos uma cadeia de osciladores harmônicos quânticos cujas extremidades se conectam a reservatórios térmicos a duas diferentes temperaturas. Sabemos que a lei de Fourier não é válida nesse modelo, mas ressaltamos que o estudo detalhado de modelos simples e analiticamente tratáveis pode ser de grande valia para uma melhor compreensão dos mecanismos subjacentes às propriedades físicas de interesse. Para o limite clássico de altas temperaturas, estendemos o resultado apresentado na Ref. [28], deduzindo a expressão exata da corrente de calor no limite termodinâmico e contemplando também

o caso em que o potencial on-site está presente. Também estudamos o limite de baixas temperaturas, em que os efeitos quânticos se tornam mais evidentes. Seguimos a abordagem desenvolvida nas Refs. [20–22]. No Cap. 3, estudamos uma cadeia clássica fora do equilíbrio térmico e sujeita a um potencial on-site anarmônico. Consideramos a presença de reservatórios auto-consistentes no interior da cadeia, tais como aqueles propostos na Ref. [10]. Usando a abordagem não-rigorosa desenvolvida na Ref. [34], calculamos aproximadamente a função de correlação de dois pontos no estado estacionário de não-equilíbrio, da qual deduzimos a lei de Fourier e a condutividade térmica em função das massas. Finalmente, o Cap. 4 é dedicado às considerações finais.

Capítulo 2

Cadeia de osciladores harmônicos quânticos fora do equilíbrio

Neste capítulo, estudaremos o transporte de calor em uma cadeia de osciladores harmônicos quânticos fora do equilíbrio térmico. A primeira parte do capítulo será dedicada a um estudo geral do transporte de calor através de uma rede d -dimensional de osciladores harmônicos quânticos que interage com dois reservatórios térmicos a duas temperaturas distintas. Estes últimos também serão modelados como redes de osciladores harmônicos quânticos. Além de obtermos uma equação dinâmica do tipo Langevin para o modelo, deduziremos uma expressão geral para o fluxo de calor no estado estacionário. Seguiremos a abordagem das Refs. [20–22] na construção de um modelo para descrever o sistema aberto fora do equilíbrio.

Na segunda parte, estudaremos o caso específico de uma cadeia de osciladores harmônicos quânticos com massas alternadas. Deduziremos uma fórmula integral para a corrente no estado estacionário de não equilíbrio, da qual obteremos uma expressão exata para a corrente no limite clássico (altas temperaturas), além de estimativas para a corrente no limite de baixas temperaturas.

2.1 Equações de “Langevin” quânticas

Começaremos descrevendo o modelo mais geral possível em que todas as partes do sistema (que é composto por uma rede d -dimensional de osciladores e dois reservatórios térmicos) são formadas por osciladores harmônicos quânticos e interagem entre si harmonicamente.

O modelo consiste de uma rede d -dimensional de osciladores harmônicos quânticos (que será representada por W) em contato com dois reservatórios térmicos (esquerdo e direito, representados por L e R) a duas diferentes temperaturas. Estes últimos também são constituídos de osciladores harmônicos quânticos. O hamiltoniano total do sistema é a forma quadrática

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \dot{X}^T M \dot{X} + \frac{1}{2} X \Phi X & (2.1) \\
&= H_W + H_L + H_R + \mathcal{V}_L + \mathcal{V}_R \quad , \\
\text{onde } H_W &= \frac{1}{2} \dot{X}_W^T M_W \dot{X}_W + \frac{1}{2} X_W^T \Phi_W X_W \quad , \\
H_L &= \frac{1}{2} \dot{X}_L^T M_L \dot{X}_L + \frac{1}{2} X_L^T \Phi_L X_L \quad , \\
H_R &= \frac{1}{2} \dot{X}_R^T M_R \dot{X}_R + \frac{1}{2} X_R^T \Phi_R X_R \quad , \\
\mathcal{V}_L &= X_W^T V_L X_L \quad , \quad \mathcal{V}_R = X_W^T V_R X_R \quad .
\end{aligned}$$

Nas Eqs. (2.1), M , M_W , M_L , M_R são respectivamente, as matrizes diagonais das massas de todo o sistema, da rede, do reservatório esquerdo e do reservatório direito. A matriz de interação Φ é simétrica e positiva-definida, assim como Φ_W , Φ_L e Φ_R . As matrizes V_L e V_R , que representam o acoplamento entre a rede e os reservatórios, são definidas de tal forma que $\frac{1}{2} X_W^T V_{L,R} X_{L,R} + \frac{1}{2} X_{L,R}^T V_{L,R}^T X_W = X_W^T V_{L,R} X_{L,R}$ (isto é sempre possível porque os operadores de posição comutam). Os vetores X , X_W , X_L , X_R contêm as d componentes de cada um dos operadores (na representação de Heisenberg) de deslocamento das partículas em relação às suas posições de equilíbrio.

Usando a relação de comutação canônica $[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$, obtemos as equações de Heisenberg

$$\begin{cases} \dot{x}_k &= \frac{p_k}{m_k} \\ \dot{p}_k &= -\sum_j \Phi_{kj} x_j \end{cases} \quad ,$$

logo

$$m_k \ddot{x}_k = -\sum_j \Phi_{kj} x_j \quad .$$

Em notação matricial, a equação de Heisenberg se escreve

$$M \ddot{X} = -\Phi X \quad .$$

Das Eqs. (2.1), temos

$$\begin{pmatrix} M_W & 0 & 0 \\ 0 & M_L & 0 \\ 0 & 0 & M_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{X}_W \\ \ddot{X}_L \\ \ddot{X}_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi_W & -V_L & -V_R \\ -V_L^T & -\Phi_L & 0 \\ -V_R^T & 0 & -\Phi_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_W \\ X_L \\ X_R \end{pmatrix},$$

i.e.,

$$M_W \ddot{X}_W = -\Phi_W X_W - V_L X_L - V_R X_R, \quad (2.2)$$

$$M_L \ddot{X}_L = -V_L^T X_W - \Phi_L X_L, \quad (2.3)$$

$$M_R \ddot{X}_R = -V_R^T X_W - \Phi_R X_R. \quad (2.4)$$

2.1.1 Integração das equações de Heisenberg para os reservatórios

Tratando a Eq. (2.3) como uma equação diferencial em X_L com o termo não-homogêneo $-V_L^T X_W$, a solução geral da referida equação é dada por

$$X_L(t) = X_L^h(t) + X_L^p(t), \quad (2.5)$$

onde $X_L^h(t)$ é a solução geral da equação homogênea associada e $X_L^p(t)$ é uma solução particular da equação não-homogênea. Para achar esta solução particular, usaremos o método da “função” de Green, que será descrito a seguir.

A função de Green causal do reservatório esquerdo é definida como a solução da equação

$$M_L \ddot{g}_L + \Phi_L g_L = \delta(t) \quad (2.6)$$

que satisfaz a condição de causalidade $g_L(t) \propto \theta(t)$, onde $\theta(t)$ denota a função degrau de Heaviside com salto em $t = 0$.

Uma solução particular da Eq. (2.3) é então dada por

$$X_L^p(t) = - \int_{t_0}^{\infty} dt' g_L(t-t') V_L^T X_W(t'). \quad (2.7)$$

Com efeito, temos

$$\begin{aligned}
\left(M_L \frac{d^2}{dt^2} + \Phi_L \right) X_L^p(t) &= - \int_{t_0}^{\infty} dt' \left(M_L \frac{d^2}{dt^2} + \Phi_L \right) g_L(t-t') V_L^T X_W(t') \\
&= - \int_{t_0}^{\infty} dt' \delta(t-t') V_L^T X_W(t') \\
&= -V_L^T X_W(t) \quad .
\end{aligned}$$

A condição de causalidade $g_L(t) \propto \theta(t)$ significa que $X_L^p(t)$ depende de $X_L^p(t')$ apenas para $t' < t$.

A Eq. (2.6) é uma equação de distribuições. Sua solução geral é da forma

$$g_L(t) = g_L^h(t) + g_L^p(t) \quad , \quad (2.8)$$

onde $g_L^h(t)$ é a solução geral da equação homogênea associada e $g_L^p(t)$ é uma solução particular da equação não-homogênea.

Solução geral da equação homogênea

A equação homogênea associada à Eq. (2.6) pode ser facilmente resolvida com uma transformação de modos normais:

$$M_L \ddot{g}_L^h + \Phi_L g_L^h = 0 \quad . \quad (2.9)$$

Consideremos primeiro a mudança de variáveis

$$\begin{cases} M_L^{1/2} g_L^h = \hat{g}_L^h \\ M_L^{-1/2} \Phi_L M_L^{-1/2} = \hat{\Phi}_L \end{cases} \quad .$$

A equação (2.9) se transforma em

$$\ddot{\hat{g}}_L^h = -\hat{\Phi}_L \hat{g}_L^h \quad .$$

Como Φ_L é uma matriz simétrica, positiva-definida, $\hat{\Phi}_L$ também o é. Seja \hat{U}_L uma matriz ortogonal que diagonaliza $\hat{\Phi}_L$, i.e.,

$$\begin{cases} \hat{U}_L^T \hat{U}_L = I \\ \hat{U}_L^T \hat{\Phi}_L \hat{U}_L = \Omega_L^2 \end{cases} \quad , \quad (2.10)$$

onde a matriz diagonal $\widehat{U}_L^T \widehat{\Phi}_L \widehat{U}_L$ foi escrita na forma Ω_L^2 em virtude da positividade de $\widehat{\Phi}_L$ (os elementos diagonais da matriz positiva-definida Ω_L são as frequências dos modos normais do reservatório esquerdo, enquanto as colunas da matriz \widehat{U}_L são os autovetores normalizados).

Desta forma, a equação diagonalizada se escreve

$$\frac{d^2}{dt^2}(\widehat{U}_L^T \widehat{g}_L^h) + \Omega_L^2(\widehat{U}_L^T \widehat{g}_L^h) = 0 \quad ,$$

que é um conjunto de equações do tipo oscilador harmônico simples. A solução geral é imediata:

$$\widehat{U}_L^T \widehat{g}_L^h(t) = \cos(\Omega_L t) \widehat{C}_1 + \sin(\Omega_L t) \widehat{C}_2 \quad ,$$

onde \widehat{C}_1 e \widehat{C}_2 são vetores constantes arbitrários.

Seja $U_L \equiv M_L^{-1/2} \widehat{U}_L$. Então temos (usando a relação $\widehat{g}_L^h = M_L^{1/2} g_L^h$)

$$g_L^h(t) = U_L \cos(\Omega_L t) U_L^T M_L C_1 + U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T M_L C_2 \quad , \quad (2.11)$$

onde C_1 e C_2 são vetores constantes arbitrários.

Das Eqs. (2.10) e da relação $U_L \equiv M_L^{-1/2} \widehat{U}_L$, deduzimos que a matriz U_L possui as seguintes propriedades:

$$\begin{cases} U_L^T M_L U_L = I \\ U_L^T \Phi_L U_L = \Omega_L^2 \end{cases} \quad . \quad (2.12)$$

Solução particular da equação não-homogênea

Uma solução particular da equação de distribuições não-homogênea (2.6) pode ser obtida pelo método da transformada de Fourier. Definindo a transformada

$$g_L(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} g_L(t) \quad , \quad (2.13)$$

no espaço de Fourier a Eq. (2.6) assume a forma

$$(-\omega^2 M_L + \Phi_L) g_L(\omega) = 1 \quad . \quad (2.14)$$

A Eq. de distribuições (2.14) admite infinitas soluções, pois ao somarmos a uma

solução a transformada de Fourier de alguma solução da equação homogênea (2.9), geramos uma nova solução. Por motivo que ficará claro em breve, escolheremos a solução particular

$$g_L^p(\omega) = \frac{1}{-(\omega + i0)^2 M_L + \Phi_L} \equiv \text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{-(\omega + i\epsilon)^2 M_L + \Phi_L} \quad , \quad (2.15)$$

onde o símbolo wlim denota o limite fraco, i.e, se $\{f_\epsilon\}$ é uma família de distribuições indexada por $\epsilon \downarrow 0$ e F é uma função da classe de funções-teste de Schwartz, então

$$\left\langle \text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} f_\epsilon, F \right\rangle \equiv \lim_{\epsilon \downarrow 0} \langle f_\epsilon, F \rangle \quad ,$$

sendo $\langle \cdot, \cdot \rangle$ definido por

$$\langle f, F \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) F(\omega) \quad .$$

De fato, é imediato verificar que o funcional (2.15) satisfaz a Eq. (2.14). Se F é uma função-teste, temos

$$\begin{aligned} \langle (-\omega^2 M_L + \Phi_L) g_L^p, F \rangle &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (-\omega^2 M_L + \Phi_L) [-(\omega + i\epsilon)^2 M_L + \Phi_L]^{-1} F(\omega) \\ &= \lim_{\epsilon \downarrow 0} M_L U_L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{-\omega^2 + \Omega_L^2}{-(\omega + i\epsilon)^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(\omega) \quad . \end{aligned}$$

Como $[-(\omega + i\epsilon)^2 + \Omega_L^2]_{jj} \neq 0 \quad \forall \epsilon > 0$, $\left[\frac{1}{-(\omega + i\epsilon)^2 + \Omega_L^2} \right]$ é uma função analítica de $\omega + i\epsilon$ no semi-plano superior $\text{Im } \omega > 0$.

Temos

$$\begin{aligned} \langle (-\omega^2 M_L + \Phi_L) g_L^p, F \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) + \lim_{\epsilon \downarrow 0} M_L U_L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\epsilon(2i\omega - \epsilon)}{-(\omega + i\epsilon)^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(\omega) \\ &= \langle 1, F \rangle + \lim_{\epsilon \downarrow 0} M_L U_L \int_{-\infty + i\epsilon}^{\infty + i\epsilon} dz \frac{\epsilon(\epsilon + 2iz)}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(z - i\epsilon) \quad . \end{aligned}$$

Como o integrando $\frac{\epsilon(\epsilon + 2iz)}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(z - i\epsilon)$ é analítico no semi-plano superior,

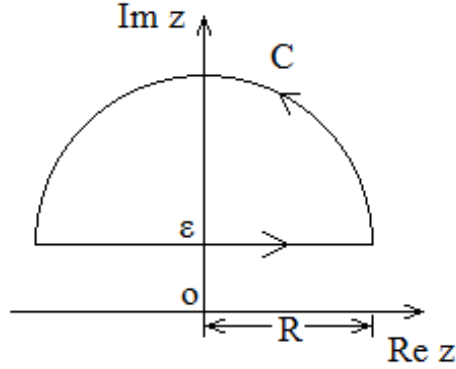


Figura 2.1: Contorno de integração da integral (2.16)

podemos escrever

$$U_L \oint_C dz \frac{\epsilon(\epsilon + 2iz)}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(z - i\epsilon) = 0 \quad , \quad (2.16)$$

onde C é o semicírculo da Fig. 2.1.

$$\begin{aligned} \Rightarrow & U_L \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} dz \frac{\epsilon(\epsilon + 2iz)}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(z - i\epsilon) \\ &= -U_L \int_{\curvearrowright} dz \frac{\epsilon(\epsilon + 2iz)}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(z - i\epsilon) \\ &= -U_L \int_0^\pi d\theta iR e^{i\theta} \frac{\epsilon(-\epsilon + 2iR e^{i\theta})}{-(i\epsilon + R e^{i\theta})^2 + \Omega_L^2} U_L^T F(R e^{i\theta}) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} 0 \quad , \end{aligned}$$

logo

$$\langle (-\omega^2 M_L + \Phi_L) g_L^p, F \rangle = \langle 1, F \rangle \quad ,$$

i.e., $(-\omega^2 M_L + \Phi_L) g_L^p = 1$.

□

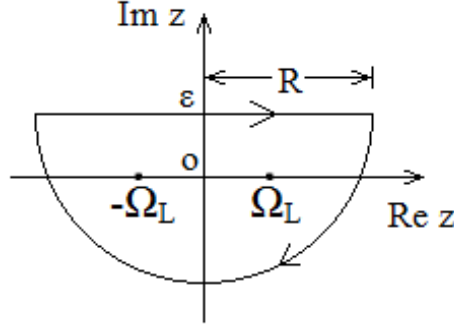


Figura 2.2: Contorno de integração da integral (2.17) para $t > 0$.

Função de Green causal no domínio do tempo

Calculemos agora a transformada de Fourier inversa

$$\begin{aligned} g_L^p(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{e^{-i\omega t}}{-(\omega + i\epsilon)^2 M_L + \Phi_L} \\ &= \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega t}}{-(\omega + i\epsilon)^2 M_L + \Phi_L} , \end{aligned}$$

onde usamos a comutatividade entre a transformada de Fourier e o $\operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0}$, um teorema conhecido da teoria de distribuições. Então temos

$$\begin{aligned} g_L^p(t) &= \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi} U_L \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i(\omega t)}}{-(\omega + i\epsilon)^2 + \Omega_L^2} U_L^T \\ &= \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi} U_L \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} dz \frac{e^{-i(z-i\epsilon)t}}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T \\ &= \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{2\pi} U_L \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} dz \frac{e^{(\operatorname{Im} z - \epsilon)t} e^{-i \operatorname{Re} z}}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Se $t < 0$, temos $e^{(\operatorname{Im} z - \epsilon)t} \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} 0$ para $\operatorname{Im} z > \epsilon$, logo podemos fechar o contorno como na Fig. 2.1. Como o integrando é analítico no semi-plano superior,

$$\operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} U_L \int_{\gamma} dz \frac{e^{(\operatorname{Im} z - \epsilon)t} e^{-i \operatorname{Re} z}}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T = 0 \Rightarrow g_L^p(t) = 0 .$$

Se $t > 0$, temos $e^{(\operatorname{Im} z - \epsilon)t} \xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} 0$ para $\operatorname{Im} z < \epsilon$, logo podemos fechar o contorno no semi-plano inferior, como na Fig. 2.2. Neste caso, há um pólo simples em $z = -\Omega_L$ e outro em $z = \Omega_L$. Então temos

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2\pi} U_L \int_{-\infty+i\epsilon}^{\infty+i\epsilon} dz \frac{e^{-i(z-i\epsilon)t}}{-z^2 + \Omega_L^2} U_L^T = \\
& = -iU_L \left[\operatorname{Res}_{z=-\Omega_L} \frac{e^{-i(z-i\epsilon)t}}{-z^2 + \Omega_L^2} + \operatorname{Res}_{z=\Omega_L} \frac{e^{-i(z-i\epsilon)t}}{-z^2 + \Omega_L^2} \right] U_L^T \\
& = -iU_L \left[\operatorname{Res}_{z=-\Omega_L} \frac{-e^{-i(z-i\epsilon)t}}{(z + \Omega_L)(z - \Omega_L)} + \operatorname{Res}_{z=\Omega_L} \frac{-e^{-i(z-i\epsilon)t}}{(z + \Omega_L)(z - \Omega_L)} \right] U_L^T \\
& = -iU_L \left[\frac{-e^{-i(z-i\epsilon)t}}{z - \Omega_L} \Big|_{z=-\Omega_L} + \frac{-e^{-i(z-i\epsilon)t}}{z + \Omega_L} \Big|_{z=\Omega_L} \right] U_L^T \\
& = e^{-\epsilon t} U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T .
\end{aligned}$$

Desta forma, concluimos que

$$g_L^p(t) = \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \left[e^{-\epsilon t} U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T \theta(t) \right] . \quad (2.18)$$

A solução geral da equação de distribuições (2.6) é, portanto,

$$\begin{aligned}
g_L(t) &= \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \left[e^{-\epsilon t} U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T \theta(t) \right] + \\
&+ U_L \cos(\Omega_L t) U_L^T M_L C_1 + U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T M_L C_2 . \quad (2.19)
\end{aligned}$$

Neste ponto, está claro que a única solução causal possível é obtida para $C_1 = C_2 = 0$. Deste modo, a função de Green procurada é de fato

$$g_L(t) = \operatorname{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \left[e^{-\epsilon t} U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T \theta(t) \right] . \quad (2.20)$$

A escolha da solução particular (2.15) foi conveniente neste caso porque satisfaz a condição de causalidade. Caso procurássemos, por exemplo, uma função de Green avançada, seria mais conveniente escolher $g_L^p(\omega) = [-(\omega - i0)^2 M_L + \Phi_L]^{-1}$ ao invés de $g_L^p(\omega) = [-(\omega + i0)^2 M_L + \Phi_L]^{-1}$.

Soluções das equações de Heisenberg para os reservatórios

A solução da equação homogênea associada à Eq. (2.3) para as condições iniciais $X_L(t = t_0) = X_L(t_0)$ e $\dot{X}_L(t = t_0) = \dot{X}_L(t_0)$ é aquela já obtida para $g_L^h(t)$, com a escolha $C_1 = X_L(t_0)$ e $C_2 = \dot{X}_L(t_0)$. Supondo que em $t = t_0$ a rede é conectada aos reservatórios, temos, para $t > t_0$,

$$X_L^h(t) = U_L \cos(\Omega_L t) U_L^T M_L X_L(t_0) + U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T M_L \dot{X}_L(t_0) \quad . \quad (2.21)$$

Para $t > t_0$, a solução da equação não-homogênea (2.3) que satisfaz as condições iniciais é, portanto,

$$X_L(t) = X_L^h(t) - \int_{t_0}^{\infty} dt' g_L(t - t') V_L^T X_W(t') \quad , \quad (2.22)$$

com

$$g_L(t) = \text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \left[e^{-\epsilon t} U_L \frac{\sin(\Omega_L t)}{\Omega_L} U_L^T \theta(t) \right] \quad . \quad (2.23)$$

Expressões similares valem para o reservatório direito:

$$X_R(t) = X_R^h(t) - \int_{t_0}^{\infty} dt' g_R(t - t') V_R^T X_W(t') \quad , \quad (2.24)$$

com

$$g_R(t) = \text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \left[e^{-\epsilon t} U_R \frac{\sin(\Omega_R t)}{\Omega_R} U_R^T \theta(t) \right] \quad . \quad (2.25)$$

2.1.2 A equação de “Langevin” quântica

Substituindo as expressões (2.22) e (2.24) na Eq. (2.2), obtemos a equação de evolução temporal para a rede:

$$\begin{aligned} M_W \ddot{X}_W = & -\Phi_W X_W + \eta_L(t) + \int_{t_0}^t dt' V_L g_L(t - t') V_L^T X_W(t') + \\ & + \eta_R(t) + \int_{t_0}^t dt' V_R g_R(t - t') V_R^T X_W(t') \quad , \end{aligned} \quad (2.26)$$

com

$$\begin{aligned}\eta_L(t) &= -V_L \left\{ U_L \cos [\Omega_L(t - t_0)] U_L^T M_L X_L(t_0) + U_L \frac{\sin [\Omega_L(t - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T M_L \dot{X}_L(t_0) \right\} \theta(t - t_0) \ , \\ \eta_R(t) &= -V_R \left\{ U_R \cos [\Omega_R(t - t_0)] U_R^T M_R X_R(t_0) + U_R \frac{\sin [\Omega_R(t - t_0)]}{\Omega_R} U_R^T M_R \dot{X}_R(t_0) \right\} \theta(t - t_0) \ .\end{aligned}\tag{2.27}$$

A Eq. (2.26) é uma equação de “Langevin” quântica: as condições iniciais dos reservatórios, $X_L(t_0)$, $\dot{X}_L(t_0)$, $X_R(t_0)$, $\dot{X}_R(t_0)$ formam uma mistura estatística. O termo “Langevin”, usado pelos autores de [20], é geralmente reservado à equação estocástica markoviana que descreve sistemas hamiltonianos clássicos em contato com banhos térmicos. A Eq. (2.26), a princípio, não descreve um processo markoviano, devido à presença dos termos $\int_{t_0}^t dt' V_L g_L(t - t') V_L^T X_W(t')$ e $\int_{t_0}^t dt' V_R g_R(t - t') V_R^T X_W(t')$, que estão associados a algum mecanismo de dissipação com efeito de memória. Uma vez conhecida a distribuição de probabilidades inicial de cada reservatório, os termos de “ruído” η_L e η_R evoluem deterministicamente, de acordo com as Eqs. (2.27).

Partindo da hipótese de que a distribuição de probabilidades inicial (i.e., no instante $t = t_0$) de cada reservatório isolado seja a distribuição canônica (i.e., a distribuição de equilíbrio à temperatura do reservatório em questão), podemos determinar as propriedades estatísticas dos termos de ruído η_L e η_R . Imediatamente após o instante $t = t_0$, o sistema é conectado aos banhos e começa a interagir com os mesmos. A evolução dos termos de ruído a partir da mistura estatística inicial é determinística, conforme a Eq. (2.27).

2.1.3 Correlações de equilíbrio para os reservatórios

O hamiltoniano do reservatório esquerdo isolado,

$$H_L = \frac{1}{2} \dot{X}_L^T M_L \dot{X}_L + \frac{1}{2} X_L^T \Phi_L X_L \ ,$$

pode ser reescrito na forma diagonal se usarmos a propriedade (2.12):

$$\begin{aligned}
H_L &= \frac{1}{2} \dot{X}_L^T (U_L^T)^{-1} U_L^{-1} \dot{X}_L + \frac{1}{2} X_L^T (U_L^T)^{-1} \Omega_L^2 U_L^{-1} X_L \\
&= \frac{1}{2} (U_L^{-1} \dot{X}_L)^T (U_L^{-1} \dot{X}_L) + \frac{1}{2} (U_L^{-1} X_L)^T \Omega_L^2 (U_L^{-1} X_L) \\
&= \frac{1}{2} \hat{X}_L^T \hat{X}_L + \hat{X}_L^T \Omega_L^2 \hat{X}_L \quad ,
\end{aligned} \tag{2.28}$$

onde definimos

$$\hat{X}_L \equiv U_L^{-1} X_L \quad . \tag{2.29}$$

A equação (2.28) também pode ser expressa na forma

$$\begin{aligned}
H_L &= \sum_{i=1}^r \left(\frac{1}{2} \hat{x}_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 \hat{x}_i^2 \right) \\
&= \sum_{i=1}^r \left(\frac{1}{2} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} \omega_i^2 \hat{x}_i^2 \right) \quad .
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Introduzindo os operadores de criação e aniquilação

$$\begin{aligned}
\hat{a}_i &= \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}} \left(\hat{x}_i + \frac{i}{\omega_i} \hat{p}_i \right) \quad , \\
\hat{a}_i^\dagger &= \sqrt{\frac{\omega_i}{2\hbar}} \left(\hat{x}_i - \frac{i}{\omega_i} \hat{p}_i \right) \quad ,
\end{aligned} \tag{2.31}$$

temos

$$\begin{aligned}
\hat{x}_i &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_i}} \left(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \right) \quad , \\
\hat{p}_i &= \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2}} \left(\hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \right) \quad ,
\end{aligned} \tag{2.32}$$

e a equação (2.30) pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned}
H_L &= \sum_{i=1}^r \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_i \\
&= \sum_{i=1}^r \left(\hat{N}_i + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_i \quad ,
\end{aligned} \tag{2.33}$$

onde $\widehat{N}_i \equiv \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_i$ é o operador de número.

Os autoestados de H_L têm a forma de um produto tensorial, $|n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_r\rangle$, e satisfazem a condição de ortonormalidade

$$(\langle n_1 | \langle n_2 | \dots \langle n_r |) (|n'_1\rangle |n'_2\rangle \dots |n'_r\rangle) = \delta_{n_1 n'_1} \delta_{n_2 n'_2} \dots \delta_{n_r n'_r} \quad . \quad (2.34)$$

Os operadores \widehat{a}_i , \widehat{a}_i^\dagger e \widehat{N}_i possuem as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} \widehat{a}_i |n_i\rangle &= \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \quad , \\ \widehat{a}_i^\dagger |n_i\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \quad , \\ \widehat{N}_i |n_i\rangle &= n_i |n_i\rangle \quad , \\ [\widehat{a}_i, \widehat{a}_i^\dagger] &= 1 \quad . \end{aligned} \quad (2.35)$$

A média canônica de equilíbrio à temperatura T_L é dada por

$$\langle \cdot \rangle = \frac{\text{Tr} [\cdot e^{-\beta_L H_L}]}{\text{Tr} [e^{-\beta_L H_L}]} \quad , \quad (2.36)$$

onde $\beta_L = 1/k_B T_L$.

Calculemos agora as correlações de equilíbrio $\langle \widehat{x}_i \widehat{x}_j \rangle$, $\langle \dot{\widehat{x}}_i \dot{\widehat{x}}_j \rangle$, $\langle \widehat{x}_i \dot{\widehat{x}}_j \rangle$ e $\langle \dot{\widehat{x}}_i \widehat{x}_j \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle \widehat{x}_i \widehat{x}_j \rangle &= \frac{\hbar}{2\sqrt{\omega_i \omega_j}} \left\langle \left(\widehat{a}_i + \widehat{a}_i^\dagger \right) \left(\widehat{a}_j + \widehat{a}_j^\dagger \right) \right\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2\sqrt{\omega_i \omega_j}} \left(\langle \widehat{a}_i \widehat{a}_j \rangle + \langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_j^\dagger \rangle + \langle \widehat{a}_i \widehat{a}_j^\dagger \rangle + \langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_j \rangle \right) \quad . \end{aligned}$$

Das Eqs. (2.34) e (2.35), concluímos que os termos $\langle \widehat{a}_i \widehat{a}_j \rangle$ e $\langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_j^\dagger \rangle$ são nulos e que os termos $\langle \widehat{a}_i \widehat{a}_j^\dagger \rangle$ e $\langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_j \rangle$ só não se anulam se $i = j$, logo

$$\langle \widehat{x}_i \widehat{x}_j \rangle = \frac{\hbar}{2\omega_i} \left(\langle \widehat{a}_i \widehat{a}_j^\dagger \rangle + \langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_j \rangle \right) \delta_{ij} \quad . \quad (2.37)$$

Usando a relação de comutação dos operadores \widehat{a}_i e \widehat{a}_i^\dagger (última das Eqs. (2.35)),

temos $\widehat{a}_i \widehat{a}_i^\dagger = 1 + \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_i$, logo

$$\begin{aligned}
\langle \widehat{x}_i \widehat{x}_j \rangle &= \frac{\hbar}{\omega_i} \left\langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_i + \frac{1}{2} \right\rangle \delta_{ij} = \frac{\hbar}{\omega_i} \left\langle \widehat{N}_i + \frac{1}{2} \right\rangle \delta_{ij} = \\
&= \frac{\hbar}{\omega_i} \frac{\text{Tr} \left[\left(\widehat{N}_i + \frac{1}{2} \right) e^{-\beta_L H_L} \right]}{\text{Tr} \left[e^{-\beta_L H_L} \right]} \delta_{ij} \\
&= \frac{\hbar}{\omega_i} \frac{\sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_r=0}^{\infty} \langle n_1 | \cdots \langle n_r | \left(\widehat{N}_i + \frac{1}{2} \right) e^{-\beta_L H_L} | n_1 \rangle \cdots | n_r \rangle}{\sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_r=0}^{\infty} \langle n_1 | \cdots \langle n_r | e^{-\beta_L H_L} | n_1 \rangle \cdots | n_r \rangle} \delta_{ij} \\
&= -\frac{\hbar}{\omega_i} \frac{1}{\beta_L \hbar} \frac{\partial}{\partial \omega_i} \ln \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_r=0}^{\infty} \langle n_1 | \cdots \langle n_r | e^{-\beta_L H_L} | n_1 \rangle \cdots | n_r \rangle \right] \delta_{ij} \\
&= -\frac{1}{\beta_L \omega_i} \frac{\partial}{\partial \omega_i} \ln \left[\sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_r=0}^{\infty} e^{-\beta_L \sum_{k=1}^r (n_k + \frac{1}{2}) \hbar \omega_k} \right] \delta_{ij} \\
&= -\frac{1}{\beta_L \omega_i} \frac{\partial}{\partial \omega_i} \ln \left(\prod_{k=1}^r \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta_L \hbar \omega_k n_k} e^{-\beta_L \hbar \omega_k / 2} \right) \delta_{ij} \\
&= -\frac{1}{\beta_L \omega_i} \frac{\partial}{\partial \omega_i} \sum_{k=1}^r \ln \left(\frac{e^{-\beta_L \hbar \omega_k / 2}}{1 - e^{-\beta_L \hbar \omega_k}} \right) \delta_{ij} \\
&= -\frac{1}{\beta_L \omega_i} \frac{\partial}{\partial \omega_i} \sum_{k=1}^r \ln \left[\frac{1}{2} \text{csch} \left(\frac{1}{2} \beta_L \hbar \omega_k \right) \right] \delta_{ij} \\
&= -\frac{1}{\beta_L \omega_i} \sinh \left(\frac{1}{2} \beta_L \hbar \omega_i \right) \frac{\partial}{\partial \omega_i} \text{csch} \left(\frac{1}{2} \beta_L \hbar \omega_i \right) \delta_{ij} \quad ,
\end{aligned}$$

logo

$$\langle \widehat{x}_i \widehat{x}_j \rangle = \frac{\hbar}{2\omega_i} \coth \left(\frac{\hbar \omega_i}{2k_B T_L} \right) \delta_{ij} \quad . \quad (2.38)$$

Para a correlao velocidade-velocidade, temos

$$\begin{aligned}
\langle \dot{\widehat{x}}_i \dot{\widehat{x}}_j \rangle &= \langle \widehat{p}_i \widehat{p}_j \rangle \\
&= -\frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_i \omega_j} \left\langle \left(\widehat{a}_i - \widehat{a}_i^\dagger \right) \left(\widehat{a}_j - \widehat{a}_j^\dagger \right) \right\rangle \\
&= \frac{\hbar \omega_i}{2} \left(\langle \widehat{a}_i \widehat{a}_i^\dagger \rangle + \langle \widehat{a}_i^\dagger \widehat{a}_i \rangle \right) \delta_{ij} \quad .
\end{aligned}$$

Pela Eq. (2.37), temos

$$\langle \dot{\widehat{x}}_i \dot{\widehat{x}}_j \rangle = \omega_i^2 \langle \widehat{x}_i \widehat{x}_j \rangle \quad ,$$

logo

$$\langle \hat{x}_i \dot{\hat{x}}_j \rangle = \frac{\hbar \omega_i}{2} \coth \left(\frac{\hbar \omega_i}{2k_B T_L} \right) \delta_{ij} \quad , \quad (2.39)$$

onde usamos a Eq. (2.38).

A correlação $\langle \hat{x}_i \dot{\hat{x}}_j \rangle$ é dada por

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}_i \dot{\hat{x}}_j \rangle &= \langle \hat{x}_i \hat{p}_j \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2i} \sqrt{\frac{\omega_j}{\omega_i}} \langle (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) (\hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger) \rangle \\ &= \frac{i\hbar}{2} \langle (\hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \rangle \delta_{ij} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \langle [\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] \rangle \delta_{ij} \\ &= \frac{i\hbar}{2} \delta_{ij} \quad . \end{aligned}$$

Temos, portanto,

$$\langle \hat{x}_i \dot{\hat{x}}_j \rangle = \frac{i\hbar}{2} \delta_{ij} \quad . \quad (2.40)$$

Finalmente, para $\langle \dot{\hat{x}}_i \hat{x}_j \rangle$ temos

$$\begin{aligned} \langle \dot{\hat{x}}_i \hat{x}_j \rangle &= \langle \hat{p}_i \hat{x}_j \rangle \\ &= \langle \hat{x}_j \hat{p}_i \rangle - i\hbar \delta_{ij} \\ &= \langle \hat{x}_j \dot{\hat{x}}_i \rangle - i\hbar \delta_{ij} \quad . \end{aligned}$$

Usando a Eq. (2.40), obtemos

$$\langle \dot{\hat{x}}_i \hat{x}_j \rangle = -\frac{i\hbar}{2} \delta_{ij} \quad . \quad (2.41)$$

Em notação matricial, as correlações (2.38), (2.39), (2.40) e (2.41) se escrevem

$$\begin{aligned}\langle \hat{X}_L \hat{X}_L^T \rangle &= \frac{\hbar}{2\Omega_L} \coth \left(\frac{\hbar\Omega_L}{2k_B T_L} \right) , \\ \langle \dot{\hat{X}}_L \dot{\hat{X}}_L^T \rangle &= \frac{\hbar\Omega_L}{2} \coth \left(\frac{\hbar\Omega_L}{2k_B T_L} \right) , \\ \langle \hat{X}_L \dot{\hat{X}}_L^T \rangle &= \frac{i\hbar}{2} I , \\ \langle \dot{\hat{X}}_L \hat{X}_L^T \rangle &= -\frac{i\hbar}{2} I .\end{aligned}$$

Usando a relação $X_L = U_L \hat{X}_L$, obtemos finalmente

$$\begin{aligned}\langle X_L X_L^T \rangle &= U_L \frac{\hbar}{2\Omega_L} \coth \left(\frac{\hbar\Omega_L}{2k_B T_L} \right) U_L^T , \\ \langle \dot{X}_L \dot{X}_L^T \rangle &= U_L \frac{\hbar\Omega_L}{2} \coth \left(\frac{\hbar\Omega_L}{2k_B T_L} \right) U_L^T , \\ \langle X_L \dot{X}_L^T \rangle &= U_L \left(\frac{i\hbar}{2} \right) U_L^T , \\ \langle \dot{X}_L X_L^T \rangle &= U_L \left(-\frac{i\hbar}{2} \right) U_L^T ,\end{aligned}\tag{2.42}$$

As expressões para o reservatório direito são análogas. Observamos ainda que no equilíbrio, $\langle X_L \rangle = \langle \dot{X}_L \rangle = 0$ (pois as médias canônicas dos operadores de criação e aniquilação são nulas), logo as médias acima são realmente funções de correlação.

2.1.4 Correlações dos ruídos

Nesta subseção, usaremos os resultados da subseção anterior e a Eq. (2.27) para obter as funções de correlação do ruído de cada reservatório. Da Eq. (2.27),

$$\eta_L(t) = -V_L \left\{ U_L \cos [\Omega_L(t - t_0)] U_L^T M_L X_L(t_0) + U_L \frac{\sin [\Omega_L(t - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T M_L \dot{X}_L(t_0) \right\} \theta(t-t_0) ,$$

temos

$$\begin{aligned}
\langle \eta_L(t) \eta_L^T(t') \rangle &= V_L \left\langle \left\{ U_L \cos [\Omega_L(t - t_0)] U_L^T M_L X_L(t_0) + U_L \frac{\sin [\Omega_L(t - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T M_L \dot{X}_L(t_0) \right\} \times \right. \\
&\left. \left\{ X_L^T(t_0) M_L U_L \cos [\Omega_L(t' - t_0)] U_L^T + \dot{X}_L^T(t_0) M_L U_L \frac{\sin [\Omega_L(t' - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T \right\} \right\rangle V_L^T \theta(t - t_0) \theta(t' - t_0) \\
&= \{ V_L U_L \cos [\Omega_L(t - t_0)] U_L^T M_L \langle X_L(t_0) X_L^T(t_0) \rangle M_L U_L \cos [\Omega_L(t' - t_0)] U_L^T V_L^T + \\
&\quad + V_L U_L \frac{\sin [\Omega_L(t - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T M_L \langle \dot{X}_L(t_0) X_L^T(t_0) \rangle M_L U_L \cos [\Omega_L(t' - t_0)] U_L^T V_L^T + \\
&\quad + V_L U_L \cos [\Omega_L(t - t_0)] U_L^T M_L \langle X_L(t_0) \dot{X}_L^T(t_0) \rangle M_L U_L \frac{\sin [\Omega_L(t' - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T V_L^T + \\
&\quad + V_L U_L \frac{\sin [\Omega_L(t - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T M_L \langle \dot{X}_L(t_0) \dot{X}_L^T(t_0) \rangle M_L U_L \frac{\sin [\Omega_L(t' - t_0)]}{\Omega_L} U_L^T V_L^T \} \theta(t - t_0) \theta(t' - t_0) .
\end{aligned}$$

Inserindo as correlações (2.42) na expressão acima e usando a propriedade $U_L^T M_L U_L = I$ (Eq. (2.12)), obtemos

$$\begin{aligned}
V_L U_L \left\{ (\cos [\Omega_L(t - t_0)] \cos [\Omega_L(t' - t_0)] + \sin [\Omega_L(t - t_0)] \sin [\Omega_L(t' - t_0)]) \frac{\hbar}{2\Omega_L} \coth \left(\frac{\hbar\Omega_L}{2k_B T_L} \right) - \right. \\
\left. - i (\sin [\Omega_L(t - t_0)] \cos [\Omega_L(t' - t_0)] - \sin [\Omega_L(t - t_0)] \cos [\Omega_L(t' - t_0)]) \frac{\hbar}{2\Omega_L} \right\} \times \\
\times U_L^T V_L^T \theta(t - t_0) \theta(t' - t_0) .
\end{aligned}$$

Portanto, a matriz de correlações do ruído é dada por

$$\begin{aligned}
\langle \eta_L(t) \eta_L^T(t') \rangle &= V_L U_L \left\{ \cos [\Omega_L(t - t')] \frac{\hbar}{2\Omega_L} \coth \left(\frac{\hbar\Omega_L}{2k_B T_L} \right) - i \sin [\Omega_L(t - t')] \frac{\hbar}{2\Omega_L} \right\} \times \\
&\quad \times U_L^T V_L^T \theta(t - t_0) \theta(t' - t_0) . \quad (2.43)
\end{aligned}$$

A expressão para o reservatório direito é análoga.

2.1.5 Solução estacionária das equações de “movimento”

Nesta subseção, resolveremos a Eq. (2.26) pelo método da função de Green, no limite $t_0 \rightarrow -\infty$ e para as condições iniciais $X_W(t_0) = \dot{X}_W(t_0) = 0$.

A “função” de Green $G_W(t)$ para a rede em contato com os dois reservatórios térmicos é definida como a solução causal, i.e., tal que $G_W(t) \propto \theta(t)$, da equação

diferencial de distribuições

$$M_W \ddot{G}_W + \Phi_W G_W = \int_{-\infty}^t dt' V_L g_L(t-t') V_L^T G_W(t') + \int_{-\infty}^t dt' V_R g_R(t-t') V_R^T G_W(t') + \delta(t) \quad . \quad (2.44)$$

A solução da Eq. (2.26) que procuramos é então construída através da integral de convolução

$$X_W(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' G_W(t-t') (\eta_L(t') + \eta_R(t')) \quad . \quad (2.45)$$

Note-se que esta solução satisfaz as condições iniciais $X_W(-\infty) = \dot{X}_W(-\infty) = 0$.

Sejam as transformadas de Fourier

$$\begin{aligned} \tilde{X}_W(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt X_W(t) e^{i\omega t} \quad , \\ \tilde{\eta}_{L,R}(\omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \eta_{L,R}(t) e^{i\omega t} \quad , \\ g_{L,R}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt g_{L,R}(t) e^{i\omega t} \quad , \\ G_W(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt G_W(t) e^{i\omega t} \quad . \end{aligned} \quad (2.46)$$

A transformada de Fourier da Eq. (2.44) é a equação algébrica de distribuições

$$[-\omega^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L(\omega) - \Sigma_R(\omega)] G_W(\omega) = 1 \quad , \quad (2.47)$$

onde $\Sigma_{L,R}(\omega) \equiv V_{L,R} g_{L,R}(\omega) V_{L,R}^T$.

Uma possível solução da Eq. (2.47) é a distribuição

$$G_W(\omega) = \text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{-(\omega + i\epsilon)^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L(\omega) - \Sigma_R(\omega)} \quad , \quad (2.48)$$

Não mostraremos aqui que (2.48) é de fato solução da Eq. (2.47). A prova é semelhante ao caso já discutido dos reservatórios.

Como no caso anterior, a transformada de Fourier inversa de $G_W(\omega)$ é nula para $t < 0$ se $G_W(\omega)$ é analítica no semi-plano superior, i.e., se todas as suas singularidades ocorrem no semi-plano inferior. Na seção 2.3 mostraremos, para uma classe particular

de reservatórios, que a função de Green (2.48) satisfaz a condição de causalidade. Vale salientar que se existe uma solução causal da Eq. (2.44), esta deve ser única. Com efeito, dada uma solução causal, qualquer outra solução difere desta por alguma solução da equação homogênea associada à Eq. (2.44). Como nenhuma solução não-trivial da equação homogênea pode ser causal (pois é sempre uma função diferenciável no sentido estrito), a conclusão é imediata.

No domínio das frequências, a solução (2.45) se transforma num produto,

$$\tilde{X}_W(\omega) = G_W(\omega) [\tilde{\eta}_L(\omega) + \tilde{\eta}_R(\omega)] \quad . \quad (2.49)$$

Na seção (2.2), mostraremos que esta solução é estacionária no sentido de que a energia média da rede é conservada, sendo o fluxo de calor independente do tempo.

Das equações (2.21), (2.22) e (2.27), temos

$$-V_L X_L(t) = \eta_L(t) + \int_{t_0}^{\infty} dt' V_L g_L(t-t') V_L^T X_W(t') \quad . \quad (2.50)$$

A transformada de Fourier desta equação se escreve

$$-V_L \tilde{X}_L(\omega) = \tilde{\eta}_L(\omega) + \Sigma_L(\omega) \tilde{X}_W(\omega) \quad , \quad (2.51)$$

onde lembramos que $\Sigma_L(\omega) \equiv V_L g_L(\omega) V_L^T$. Substituindo a Eq. (2.49) na equação acima, obtemos a solução para o reservatório esquerdo,

$$-V_L \tilde{X}_L(\omega) = [I + \Sigma_L(\omega) G_W(\omega)] \tilde{\eta}_L(\omega) + G_W(\omega) \tilde{\eta}_R(\omega) \quad . \quad (2.52)$$

Similarmente, obtemos para o reservatório direito

$$-V_R \tilde{X}_R(\omega) = [I + \Sigma_R(\omega) G_W(\omega)] \tilde{\eta}_R(\omega) + G_W(\omega) \tilde{\eta}_L(\omega) \quad . \quad (2.53)$$

2.1.6 Correlações dos ruídos no domínio das frequências

Nesta subseção, usaremos a Eq. (2.43) para deduzir a matriz de correlações da transformada de Fourier do ruído.

Das definições (2.46), temos

$$\langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \eta_L(t') \eta_L^T(t) \rangle e^{i(\omega't' + \omega t)} .$$

Sejam

$$I_s \equiv \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt \sin[\Omega_L(t - t')] e^{i(\omega't' + \omega t)} , \quad (2.54)$$

$$I_c \equiv \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{\infty} dt \cos[\Omega_L(t - t')] e^{i(\omega't' + \omega t)} . \quad (2.55)$$

Então podemos escrever

$$\langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle = V_L U_L \left[I_c \frac{\hbar}{2\Omega_L} \coth\left(\frac{\hbar \Omega_L}{2k_B T_L}\right) - i I_s \frac{\hbar}{2\Omega_L} \right] U_L^T V_L^T . \quad (2.56)$$

Da Eq. (2.54), segue que

$$\begin{aligned} I_s &= \frac{-1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i(\omega' + \omega)t'} \int_{-\infty}^{\infty} dt \sin[\Omega_L(t - t')] e^{i\omega(t-t')} \\ &= \frac{-1}{2i(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i(\omega' + \omega)t'} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[e^{i(\omega + \Omega_L)(t-t')} - e^{i(\omega - \Omega_L)(t-t')} \right] \\ &= \frac{-1}{2i} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' e^{i(\omega' + \omega)t'} \right) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt (e^{i(\omega + \Omega_L)t} - e^{i(\omega - \Omega_L)t}) \right] , \end{aligned}$$

logo

$$I_s = \frac{-1}{2i} \delta(\omega + \omega') [\delta(\omega + \Omega_L) - \delta(\omega - \Omega_L)] .$$

De modo análogo, obtemos

$$I_c = \frac{1}{2} \delta(\omega + \omega') [\delta(\omega + \Omega_L) + \delta(\omega - \Omega_L)] .$$

Levando os resultados acima na Eq. (2.56), obtemos

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle &= \delta(\omega + \omega') V_L U_L \left\{ [\delta(\omega + \Omega_L) + \delta(\omega - \Omega_L)] \frac{\hbar}{4\Omega_L} \coth\left(\frac{\hbar \Omega_L}{2k_B T_L}\right) + \right. \\ &\quad \left. + [\delta(\omega + \Omega_L) + \delta(\omega - \Omega_L)] \frac{\hbar}{4\Omega_L} \right\} U_L^T V_L^T . \end{aligned}$$

Supondo $\inf_j(\Omega_L)_{jj} > 0$, seja $0 < \xi < \inf_j(\Omega_L)_{jj}$.

Então podemos escrever

$$\langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } |\omega| \leq \xi \\ -\delta(\omega + \omega') V_L U_L [\delta(\omega + \Omega_L) - \delta(\omega - \Omega_L)] \frac{\hbar}{4\Omega_L} \left[1 + \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}\right) \right] U_L^T V_L^T, & \text{se } |\omega| > \xi \end{cases} \quad (2.57)$$

A função de correlação acima pode ser expressa em termos da função de Green $g_L(\omega)$, se usarmos a identidade

$$\frac{1}{-(\omega + i0)^2 + \Omega_L^2} = \frac{i\pi}{2\Omega_L} [\delta(\omega - \Omega_L) - \delta(\omega + \Omega_L)] - P \frac{1}{\omega^2 - \Omega_L^2} \quad .$$

Segue que

$$g_L(\omega) = U_L \frac{i\pi}{2\Omega_L} [\delta(\omega - \Omega_L) - \delta(\omega + \Omega_L)] U_L^T - U_L P \frac{1}{\omega^2 - \Omega_L^2} U_L^T \quad , \quad (2.58)$$

logo

$$\text{Im} [g_L(\omega)] = U_L \frac{i\pi}{2\Omega_L} [\delta(\omega - \Omega_L) - \delta(\omega + \Omega_L)] - P \frac{1}{\omega^2 - \Omega_L^2} U_L^T \quad . \quad (2.59)$$

Usando esta última relação na equação (2.57), obtemos

$$\langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } |\omega| \leq \xi \\ \delta(\omega + \omega') V_L \text{Im}[g_L(\omega)] V_L^T \frac{\hbar}{2\pi} \left[1 + \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}\right) \right], & \text{se } |\omega| > \xi \end{cases} \quad (2.60)$$

Seja $f_b(\omega, T) \equiv \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} - 1}$ (f_b é a conhecida função de distribuição de bósons não-interagentes). Temos

$$\frac{1}{2} \left[1 + \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}\right) \right] = \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}}}{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}} - e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}}} = 1 + \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T_L}} - 1} = 1 + f_b(\omega, T_L) \quad ,$$

então podemos escrever

$$\langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle = \begin{cases} 0, & \text{se } |\omega| \leq \xi \\ \delta(\omega + \omega') \Gamma_L(\omega) \frac{\hbar}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_L)], & \text{se } |\omega| > \xi \end{cases} \quad , \quad (2.61)$$

onde $\Gamma_L(\omega) \equiv \text{Im}[\Sigma_L(\omega)] = V_L \text{Im}[g_L(\omega)]V_L^T$.

A expressão para o reservatório direito é similar.

2.2 Correntes estacionárias

Nesta seção, deduziremos alguns resultados referentes às transferências de energia no sistema.

Multipliquemos a equação de Heisenberg para a rede (Eq. (2.2)),

$$M_W \ddot{X}_W + \Phi_W X_W = -V_L X_L - V_R X_R \quad ,$$

à esquerda por \dot{X}_W^T . Temos

$$\dot{X}_W^T M_W \ddot{X}_W + \dot{X}_W^T \Phi_W X_W = -\dot{X}_W^T V_L X_L - \dot{X}_W^T V_R X_R \quad . \quad (2.62)$$

A transposta da equação (2.62) se escreve

$$\ddot{X}_W^T M_W \dot{X}_W + X_W^T \Phi_W \dot{X}_W = -X_L^T V_L^T \dot{X}_W - X_R^T V_R^T \dot{X}_W \quad . \quad (2.63)$$

Somando membro a membro as Eqs. (2.62) e (2.63) e dividindo por 2, obtemos

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \dot{X}_W^T M_W \dot{X}_W + \frac{1}{2} X_W^T \Phi_W X_W \right) = -\frac{d}{dt} \left(\frac{X_W^T V_L X_L + X_L^T V_L^T X_W}{2} + \frac{\dot{X}_W^T V_R X_R + X_R^T V_R^T \dot{X}_W}{2} \right) .$$

Observando que o lado esquerdo desta equação é a derivada temporal de H_W , e que V_L foi definida de maneira que $X_W^T V_L X_L = X_L^T V_L^T X_W$, obtemos

$$\dot{H}_W = -\dot{X}_W^T V_L X_L - \dot{X}_W^T V_R X_R \quad . \quad (2.64)$$

Multipliquemos agora a equação de Heisenberg para o reservatório esquerdo,

$$M_L \ddot{X}_L + \Phi_L X_L = -V_L^T X_W \quad ,$$

à esquerda por \dot{X}_L^T . Temos

$$\dot{X}_L^T M_L \ddot{X}_L + \dot{X}_L^T \Phi_L X_L = -\dot{X}_L^T V_L^T X_W \quad . \quad (2.65)$$

A transposta da Eq. (2.65) se escreve

$$\ddot{X}_L^T M_L \dot{X}_L + X_L^T \Phi_L \dot{X}_L = -X_W^T V_L \dot{X}_L \quad . \quad (2.66)$$

Somando membro a membro as Eqs. (2.65) e (2.66) e dividindo por 2, obtemos

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \dot{X}_L^T M_L \dot{X}_L + \frac{1}{2} X_L^T \Phi_L X_L \right) = -\frac{d}{dt} \left(\frac{X_L^T V_L^T X_W + X_W^T V_L X_L}{2} \right) \quad ,$$

logo

$$\dot{H}_L = -\dot{X}_L^T V_L^T X_W \quad . \quad (2.67)$$

Analogamente, obtemos para o reservatório direito

$$\dot{H}_R = -\dot{X}_R^T V_R^T X_W \quad . \quad (2.68)$$

Das definições dos potenciais de interação entre a rede e os banhos, obtemos ainda

$$\dot{\mathcal{V}}_L = \dot{X}_L^T V_L^T X_W + \dot{X}_W^T V_L X_L \quad , \quad (2.69)$$

$$\dot{\mathcal{V}}_R = \dot{X}_R^T V_R^T X_W + \dot{X}_W^T V_R X_R \quad . \quad (2.70)$$

Observe-se que a energia total é conservada: $\dot{H}_L + \dot{\mathcal{V}}_L + \dot{H}_W + \dot{\mathcal{V}}_R + \dot{H}_R = 0$. Tomando as médias térmicas nas Eqs. (2.67), (2.69), (2.64), (2.70) e (2.68), obtemos

$$\langle \dot{H}_L \rangle = -\langle \dot{X}_L^T V_L^T X_W \rangle \quad , \quad (2.71)$$

$$\langle \dot{\mathcal{V}}_L \rangle = \langle \dot{X}_L^T V_L^T X_W \rangle - \left[-\langle \dot{X}_W^T V_L X_L \rangle \right] \quad , \quad (2.72)$$

$$\langle \dot{H}_W \rangle = \left[-\langle \dot{X}_W^T V_L X_L \rangle \right] - \langle \dot{X}_W^T V_R X_R \rangle \quad , \quad (2.73)$$

$$\langle \dot{\mathcal{V}}_R \rangle = \langle \dot{X}_W^T V_R X_R \rangle - \left[-\langle \dot{X}_R^T V_R^T X_W \rangle \right] \quad , \quad (2.74)$$

$$\langle \dot{H}_R \rangle = \left[-\langle \dot{X}_R^T V_R^T X_W \rangle \right] \quad . \quad (2.75)$$

As Eqs. (2.71)-(2.75) exprimem as transferências de energia entre as partes do

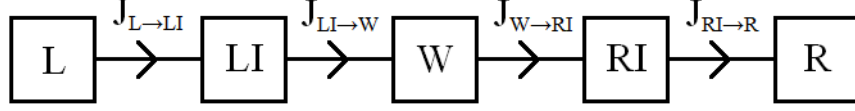


Figura 2.3: Representação esquemática das transferências de energia entre as partes do sistema.

sistema. Chamemos de “interface esquerda” (LI) o conjunto formado pelas partículas do banho esquerdo que interagem com alguma partícula da rede e também pelas partículas desta que interagem com alguma partícula daquele. A Eq. (2.71) mostra que o fluxo de energia do reservatório esquerdo (L) para a interface esquerda (LI) é dado por $\langle \dot{X}_L^T V_L^T X_W \rangle \equiv J_{L \rightarrow LI}$.

Da Eq. (2.72), depreende-se que a energia da interface esquerda varia a uma taxa igual à diferença entre o fluxo de energia proveniente do reservatório esquerdo, $\langle \dot{X}_L^T V_L^T X_W \rangle = J_{L \rightarrow LI}$, e o fluxo da interface esquerda para a rede, $-\langle \dot{X}_W^T V_L X_L \rangle \equiv J_{LI \rightarrow W}$. Analogamente, as Eqs. (2.73) e (2.74) nos permitem interpretar o termo $\langle \dot{X}_W^T V_R X_R \rangle \equiv J_{W \rightarrow RI}$ como a corrente de energia da rede (W) para a interface direita (RI) e as Eqs. (2.74) e (2.75) mostram que $-\langle \dot{X}_R^T V_R^T X_W \rangle \equiv J_{RI \rightarrow R}$ representa a corrente da interface direita (RI) para o reservatório direito (R).

Em resumo, as equações (2.71) - (2.75) podem ser reescritas na forma

$$\begin{aligned}
 \langle \dot{H}_L \rangle &= -J_{L \rightarrow LI} \quad , \\
 \langle \dot{V}_L \rangle &= J_{L \rightarrow LI} - J_{LI \rightarrow W} \quad , \\
 \langle \dot{H}_W \rangle &= J_{LI \rightarrow W} - J_{W \rightarrow RI} \quad , \\
 \langle \dot{V}_R \rangle &= J_{W \rightarrow RI} - J_{RI \rightarrow R} \quad , \\
 \langle \dot{H}_R \rangle &= J_{RI \rightarrow R} \quad .
 \end{aligned}
 \tag{2.76}$$

As equações de transferência de energia (2.76) estão representadas no diagrama da Fig. 2.3.

Cálculo da corrente $J_{LI \rightarrow W}$

Já mostramos que a corrente da interface esquerda para a rede é dada pela função de correlação

$$J_{LI \rightarrow W} = - \left\langle \dot{X}_W^T(t) V_L X_L(t) \right\rangle .$$

Usaremos as soluções estacionárias das equações de “movimento” para deduzir uma expressão para a corrente estacionária entre a interface esquerda e a rede.

Lembrando que

$$\begin{aligned} \dot{X}_W^T(t) &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \tilde{X}_W^T(\omega) \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \omega \tilde{X}_W^T(\omega) \end{aligned}$$

e que

$$X_L(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega' t} \tilde{X}_L(\omega') ,$$

temos

$$J_{LI \rightarrow W} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \left\langle \tilde{X}_W^T(\omega) V_L \tilde{X}_L(\omega') \right\rangle$$

Da transposta da Eq. (2.49) ,

$$\tilde{X}_W^T(\omega) = [\tilde{\eta}_L^T(\omega) + \tilde{\eta}_R^T(\omega) G_W^T(\omega)] ,$$

e da equação (2.52), temos

$$\begin{aligned} J_{LI \rightarrow W} &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \left\langle [\tilde{\eta}_L^T(\omega) + \tilde{\eta}_R^T(\omega)] G_W^T(\omega) \{ \tilde{\eta}_L(\omega') + \right. \\ &\quad \left. + \Sigma_L(\omega') G_W(\omega') [\tilde{\eta}_L(\omega') + \tilde{\eta}_R(\omega')] \} \right\rangle , \quad (2.77) \end{aligned}$$

Consideremos o termo

$$\begin{aligned} J_{LI \rightarrow W}^R &\equiv - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \left\langle \tilde{\eta}_R^T(\omega) G_W^T(\omega) \Sigma_L(\omega') G_W(\omega') \tilde{\eta}_R(\omega') \right\rangle \\ &= - \sum_{j, k, l} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \left\langle [\tilde{\eta}_R^T(\omega)]_j [G_W^T(\omega)]_{jk} [\Sigma_L(\omega')]_{kl} [G_W(\omega')]_{lj} [\tilde{\eta}_R(\omega')]_j \right\rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \left\langle \text{Tr} [\tilde{\eta}_R^T(\omega) G_W^T(\omega) \Sigma_L(\omega') G_W(\omega') \tilde{\eta}_R(\omega')] \right\rangle . \end{aligned}$$

Usando a invariância do traço sob permutações cíclicas, podemos escrever

$$\begin{aligned} J_{LI \rightarrow W}^R &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \langle \text{Tr} [G_W^T(\omega) \Sigma_L(\omega') G_W(\omega') \tilde{\eta}_R(\omega') \tilde{\eta}_R^T(\omega)] \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \text{Tr} [G_W^T(\omega) \Sigma_L(\omega') G_W(\omega') \langle \tilde{\eta}_R(\omega') \tilde{\eta}_R^T(\omega) \rangle] \quad . \end{aligned}$$

Substituindo na equação acima o análogo da Eq. (2.61) para o reservatório direito, obtemos (no limite $\xi \rightarrow 0^*$)

$$\begin{aligned} J_{LI \rightarrow W}^R &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} \delta(\omega + \omega') \text{Tr} [G_W^T(\omega) \Sigma_L(\omega') G_W(\omega') \Gamma_R(\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_L)] \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [G_W^T(\omega) \Sigma_L(-\omega) G_W(-\omega) \Gamma_R(\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_R)] \quad . \end{aligned}$$

Como a matriz $G_W(\omega)$ é simétrica, podemos escrever

$$J_{LI \rightarrow W}^R = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [G_W(\omega) \Sigma_L(-\omega) G_W(-\omega) \Gamma_R(\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_R)] \quad . \quad (2.78)$$

Note-se que $J_{LI \rightarrow W}^R$ é independente do tempo.

Consideremos agora o termo

$$\begin{aligned} J_{LI \rightarrow W}^L &\equiv - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \langle \tilde{\eta}_L^T(\omega) G_W^T(\omega) [I + \Sigma_L(\omega') G_W(\omega')] \tilde{\eta}_L(\omega') \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \text{Tr} \langle G_W^T(\omega) [I + \Sigma_L(\omega') G_W(\omega')] \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \text{Tr} \{ G_W(\omega) [I + \Sigma_L(\omega') G_W(\omega')] \langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle \} \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{ G_W(\omega) [I + \Sigma_L(-\omega) G_W(-\omega)] \Gamma_L(\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_L)] \quad . \end{aligned} \quad (2.79)$$

Observando que $\langle \tilde{\eta}_L(\omega) \tilde{\eta}_R^T(\omega') \rangle = 0 \quad \forall \omega, \omega'$ (os ruídos esquerdo e direito são

*Observe-se que o limite está bem definido, já que a função $\omega f_b(\omega, T_L)$ possui apenas uma singularidade removível em $\omega = 0$.

independentes) e trocando a variável $\omega \leftrightarrow -\omega$ nas equações (2.78) e (2.79), obtemos

$$J_{LI \rightarrow W} = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \text{Tr} \{ G_W(-\omega) [I + \Sigma_L(\omega) G_W(\omega)] \Gamma_L(-\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \right. \\ \left. + \text{Tr} [G_W(-\omega) \Sigma_L(\omega) G_W(\omega) \Gamma_R(-\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) \right\} ,$$

onde usamos que $1 + f_b(-\omega, T_R) = -f_b(\omega, T_R)$.

Como $\Gamma_{L,R}(-\omega) = \text{Im}[\Sigma_{L,R}(-\omega)] = \text{Im}[\Sigma_{L,R}(\omega)]^* = -\text{Im}[\Sigma_{L,R}(\omega)] = -\Gamma_{L,R}(\omega)$, temos

$$J_{LI \rightarrow W} = i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \text{Tr} \{ G_W(-\omega) [I + \Sigma_L(\omega) G_W(\omega)] \Gamma_L(\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \right. \\ \left. + \text{Tr} [G_W(-\omega) \Sigma_L(\omega) G_W(\omega) \Gamma_R(\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) \right\} , \quad (2.80)$$

que é independente do tempo.

Denotando

$$G_W(\omega) \equiv G_W^+ , \quad G_W(-\omega) \equiv G_W^- , \quad \Sigma_{L,R}(\omega) \equiv \Sigma_{L,R}^+ , \quad \Sigma_{L,R}(-\omega) \equiv \Sigma_{L,R}^- ,$$

temos

$$J_{LI \rightarrow W} = i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [G_W^- \Gamma_L] \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) - \\ - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{ G_W^- \text{Im} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_L \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \\ + i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{ G_W^- \text{Re} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_L(\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) \\ - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{ G_W^- \text{Im} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) \\ + i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{ G_W^- \text{Re} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) . \quad (2.81)$$

Observando que

$$\left. \begin{aligned} (G_W^+)^{-1} &= -(\omega + i0)^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L^+ - \Sigma_R^+ \\ (G_W^-)^{-1} &= -(\omega - i0)^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L^- - \Sigma_R^- \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
(G_W^-)^{-1} - (G_W^+)^{-1} &= (\Sigma_L^+ - \Sigma_L^-) + (\Sigma_R^+ - \Sigma_R^-) + 4i\epsilon\omega M_W \\
&= 2i(\Gamma_L + \Gamma_R) + 4i\epsilon\omega M_W
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow G_W^+ - G_W^- = 2iG_W^-(\Gamma_L + \Gamma_R)G_W^+ + 4i\epsilon\omega G_W^- M_W G_W^+ \quad , \quad \text{temos}$$

$$\text{Im}[G_W^+] = G_W^-(\Gamma_L + \Gamma_R)G_W^+ + 2\epsilon\omega G_W^- M_W G_W^+ \quad , \quad \text{logo}$$

$$G_W^-\Gamma_L G_W^+ = -G_W^-\Gamma_R G_W^+ + \text{Im}[G_W^+] - 2\epsilon\omega G_W^- M_W G_W^+ \quad . \quad (2.82)$$

Usando a Eq. (2.82) na (2.81), obtemos

$$\begin{aligned}
J_{LI \rightarrow W} &= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [G_W^- \Gamma_L] \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \\
&+ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{G_W^- \Gamma_R G_W^+ \Gamma_L\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) - \\
&- \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [\text{Im}[G_W^+] \Gamma_L] \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \\
&+ \lim_{\epsilon \downarrow 0} 2\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [G_W^- M_W G_W^+ \Gamma_L] \frac{\hbar\omega^2}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \\
&+ i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{G_W^- \text{Re} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_L(\omega)\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) - \\
&- \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{G_W^- \text{Im} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_R\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) + \\
&+ i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \{G_W^- \text{Re} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_R\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) \quad .
\end{aligned}$$

Como $i G_W^- - \text{Im}[G_W^+] = i \text{Re}[G_W^+] \quad e$

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} 2\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} [G_W^- M_W G_W^+ \Gamma_L] \frac{\hbar\omega^2}{\pi} f_b(\omega, T_L) = 0 \quad , \quad \text{temos}$$

$$\begin{aligned}
J_{LI \rightarrow W} = & i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \left\{ \operatorname{Re}[G_W^+] \Gamma_L \right\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \\
& + \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \Gamma_R G_W^+ \Gamma_L \right\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) + \\
& + i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \operatorname{Re} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_L(\omega) \right\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) - \\
& - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \operatorname{Im} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_R \right\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) + \\
& + i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \operatorname{Re} [\Sigma_L^+] G_W^+ \Gamma_R \right\} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) \quad , \quad (2.83)
\end{aligned}$$

No cálculo do limite $\epsilon \downarrow 0$ acima teríamos, a rigor, dois parâmetros diferentes, digamos ϵ_+ e ϵ_- , associados, respectivamente, às funções de Green $G_W^+(\omega)$ e $G_W^-(\omega)$. Este fato decorre da Eq. (2.79), que envolvia originalmente uma integral nas duas variáveis ω e ω' : o fator $G_W^-(\omega) = G_W^+(-\omega)$ advém precisamente da substituição da variável ω' por $-\omega$, devida à presença do fator $\delta(\omega + \omega')$. Em outros termos, teríamos de avaliar o limite da integral acima quando as duas variáveis independentes ϵ_+ e ϵ_- tendem a zero simultaneamente. Isto equivaleria a calcular o limite ao longo de uma curva arbitrária convergindo para a origem no plano $\epsilon_+ \times \epsilon_-$. Nas passagens acima, restringimo-nos à reta $\epsilon_1 = \epsilon_2$, seguindo os passos de [20]. Não faremos aqui o cálculo a duas variáveis, mas supondo que o limite de fato exista, o mesmo é independente da curva ao longo da qual é tomado.

Observando que

$$\begin{aligned}
\left\{ \operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \operatorname{Re} [\Sigma_{L,R}^+] G_W^+ \Gamma_{L,R}(\omega) \right\} \right\}^* &= \operatorname{Tr} \left\{ G_W^+ \operatorname{Re} [\Sigma_{L,R}^+] G_W^- \Gamma_{L,R}(\omega) \right\} \\
&= \operatorname{Tr} \left\{ \Gamma_{L,R}(\omega) G_W^+ \operatorname{Re} [\Sigma_{L,R}^+] G_W^- \right\} \\
&= \operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \operatorname{Re} [\Sigma_{L,R}^+] G_W^+ \Gamma_{L,R}(\omega) \right\} \quad ,
\end{aligned}$$

i.e., $\operatorname{Tr} \left\{ G_W^- \operatorname{Re} [\Sigma_{L,R}^+] G_W^+ \Gamma_{L,R}(\omega) \right\}$ é real, e observando que $J_{LI \rightarrow W}$ é real por primeiros princípios*, descartamos os termos imaginários (que somam zero) da Eq. (2.83) e

*Das Eqs. (2.76), vemos que \dot{H}_L auto-adjunto $\Rightarrow \langle \dot{H}_L \rangle$ real $\Rightarrow J_{L \rightarrow LI}$ real e \dot{V}_L auto-adjunto $\Rightarrow \langle \dot{V}_L \rangle$ real, logo $J_{LI \rightarrow W}$ é real, e assim por diante.

obtemos

$$\begin{aligned} J_{LI \rightarrow W} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^- \Gamma_R G_W^+ \Gamma_L \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^- \Gamma_L G_W^+ \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ \Gamma_R G_W^+ \Gamma_L G_W^- \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L) - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^- \Gamma_L G_W^+ \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R) . \end{aligned}$$

Então temos

$$J_{LI \rightarrow W} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^- \Gamma_L G_W^+ \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_b(\omega, T_L) - f_b(\omega, T_R)] . \quad (2.84)$$

Mudando a variável de integração de ω para $-\omega$, obtemos

$$J_{LI \rightarrow W} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^+ \Gamma_L G_W^- \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [-f_b(-\omega, T_L) + f_b(-\omega, T_R)] .$$

Observando que $-f_b(-\omega, T) = 1 + f_b(\omega, T)$, finalmente obtemos

$$J_{LI \rightarrow W} = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^+ \Gamma_L G_W^- \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_b(\omega, T_L) - f_b(\omega, T_R)] . \quad (2.85)$$

Note-se que $J_{LI \rightarrow W} = 0$ para $T_L = T_R$, como deveria ser.

2.2.1 Igualdade das correntes e a relação flutuação-dissipação

Nesta subsecção, mostraremos que $J_{L \rightarrow LI} = J_{LI \rightarrow W}$, o que implica, por simetria, que todas as correntes são iguais.

A corrente $J_{L \rightarrow LI}$ é dada por

$$\begin{aligned} J_{L \rightarrow LI} &= \left\langle \dot{X}_L^T(t) V_L^T X_W(t) \right\rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} i\omega \left\langle \tilde{X}_L^T(\omega) V_L^T \tilde{X}_W(\omega') \right\rangle . \end{aligned}$$

Usando as soluções (2.49) e (2.52), obtemos

$$\begin{aligned}
J_{L \rightarrow LI} &= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} \omega \langle \{ \tilde{\eta}_L^T(\omega) + \\
&\quad + [\tilde{\eta}_L^T(\omega) + \tilde{\eta}_R^T(\omega)] G_W^T(\omega) \Sigma_L^T(\omega) \} G_W(\omega') [\tilde{\eta}_L(\omega') + \tilde{\eta}_R(\omega')] \rangle \\
&= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega+\omega')t} \omega \{ \text{Tr} \{ \langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_L^T(\omega) \rangle [I + G_W^T(\omega) \Sigma_L^T(\omega)] G_W(\omega') \} \\
&\quad + \text{Tr} [\langle \tilde{\eta}_L(\omega') \tilde{\eta}_R^T(\omega) \rangle G_W^T(\omega) \Sigma_L^T(\omega) G_W(\omega')] \} \\
&= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \text{Tr} \{ \Gamma_L(\omega) [I + G_W(\omega) \Sigma_L(\omega)] G_W(-\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_L)] \right. \\
&\quad \left. + \text{Tr} [\Gamma_R(\omega) G_W(\omega) \Sigma_L(\omega) G_W(-\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_R)] \right\} \\
&= i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \text{Tr} \{ G_W(-\omega) [I + \Sigma_L(\omega) G_W(\omega)] \Gamma_L(\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_L)] \right. \\
&\quad \left. + \text{Tr} [G_W(-\omega) \Sigma_L(\omega) G_W(\omega) \Gamma_R(\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} [1 + f_b(\omega, T_R)] \right\} .
\end{aligned}$$

Usando a Eq. (2.80), obtemos

$$\begin{aligned}
J_{L \rightarrow LI} &= J_{LI \rightarrow W} + i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left\{ \text{Tr} \{ G_W(-\omega) [I + \Sigma_L(\omega) G_W(\omega)] \Gamma_L(\omega) \} \frac{\hbar\omega}{\pi} \right. \\
&\quad \left. + \text{Tr} [G_W(-\omega) \Sigma_L(\omega) G_W(\omega) \Gamma_R(\omega)] \frac{\hbar\omega}{\pi} \right\} .
\end{aligned}$$

O cálculo do segundo termo da equação anterior é idêntico ao da corrente $J_{LI \rightarrow W}$, mas com $\frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L)$ substituído por $\frac{\hbar\omega}{\pi}$, logo é nulo pela Eq. (2.84), pois a forma específica dos fatores $\frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_L)$ e $\frac{\hbar\omega}{\pi} f_b(\omega, T_R)$ não foi utilizada nos passos que levam da Eq. (2.80) à Eq. (2.84). Isto implica que $J_{L \rightarrow LI} = J_{LI \rightarrow W}$.

Também é fácil verificar que $J_{LI \rightarrow W} = J_{W \rightarrow RI}$. Com efeito, por simetria a corrente

$-J_{W \rightarrow RI}$ pode ser obtida da troca $L \leftrightarrow R$ na expressão da corrente $J_{LI \rightarrow W}$:

$$\begin{aligned}
-J_{W \rightarrow RI} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} [G_W^+ \Gamma_R G_W^- \Gamma_L] \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_b(\omega, T_R) - f_b(\omega, T_L)] \\
J_{W \rightarrow RI} &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} [\Gamma_R G_W^- \Gamma_L G_W^+] \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_b(\omega, T_L) - f_b(\omega, T_R)] \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} [G_W^+ \Gamma_L G_W^- \Gamma_R] \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_b(\omega, T_L) - f_b(\omega, T_R)] \\
&= J_{LI \rightarrow W} \quad .
\end{aligned}$$

Como $J_{RI \rightarrow R} = -J_{R \rightarrow RI} = -J_{RI \rightarrow W} = J_{W \rightarrow RI}$, vemos que todas as correntes são iguais e independentes do tempo:

$$J_{L \rightarrow LI} = J_{LI \rightarrow W} = J_{W \rightarrow RI} = J_{RI \rightarrow R} \equiv J \quad . \quad (2.86)$$

Da igualdade das correntes, deduzimos (cf. Eq. (2.76)) que

$$\langle \dot{\Psi}_L \rangle = \langle \dot{H}_W \rangle = \langle \dot{\Psi}_R \rangle = 0 \quad . \quad (2.87)$$

Note-se que $\langle \dot{H}_L \rangle$ e $\langle \dot{H}_R \rangle$ são diferentes de zero, mas na hipótese de banhos infinitos, estes são fontes inesgotáveis de energia térmica, de modo que as temperaturas T_L e T_R permanecem inalteradas.

A existência de um estado estacionário de não-equilíbrio decorre especificamente da Eq. (2.61) e da equação análoga para o reservatório direito. Tais equações podem ser interpretadas como relações flutuação-dissipação: as correlações dos ruídos estão relacionadas às suas flutuações estatísticas, enquanto os termos $\Gamma_{L,R}(\omega)$ da Eq. (2.61) estão relacionados à dissipação da energia do sistema. A perfeita sintonia entre as forças aleatórias e a força dissipativa exercidas por cada reservatório é que sustenta o regime permanente.

2.3 Cadeia de osciladores harmônicos quânticos com massas alternadas

Nesta seção, estudaremos o transporte de calor no caso específico de uma cadeia de N osciladores harmônicos quânticos com massas alternadas.

O hamiltoniano da cadeia é dado pela forma quadrática

$$H_W = \sum_{r=1}^N \frac{m_r}{2} (\dot{x}_r^2 + \omega_0^2 x_r^2) + \sum_{r=1}^{N+1} \frac{1}{2} (x_r - x_{r-1})^2 \quad , \quad (2.88)$$

sendo

$$m_r = \begin{cases} m_1 & , \text{ se } r \text{ é ímpar} \\ m_2 & , \text{ se } r \text{ é par} \end{cases} \quad . \quad (2.89)$$

Cada extremidade da cadeia é ligada a um reservatório térmico ôhmico, i.e., um reservatório tal que a força dissipativa é proporcional à velocidade instantânea da partícula que interage com o mesmo. Para $r = 1, 2, \dots, N$, a equação de Langevin quântica para o r -ésimo sítio se escreve

$$m_r \ddot{x}_r = x_{r-1} - 2x_r + x_{r+1} - m_r \omega_0^2 x_r + \delta_{r1} (-\gamma_L \dot{x}_1 - x_0 + [\eta_L]_1) + \delta_{rN} (-\gamma_R \dot{x}_N - x_{N+1} + [\eta_R]_N) \quad . \quad (2.90)$$

Adaptando as idéias de [24] ao formalismo da função de Green de não-equilíbrio, mostraremos que para uma determinada classe de reservatórios térmicos, os efeitos de memória são desprezíveis no limite de infinitos graus de liberdade. Em outras palavras, encontraremos uma classe de reservatórios quase ôhmicos, para a qual a dinâmica de Langevin é aproximadamente markoviana.

A idéia é encontrar uma classe de matrizes de interações Φ_L para a qual, no limite de infinitos graus de liberdade do reservatório (digamos) esquerdo, o núcleo $V_L g_L(t) V_L^T$ da integral no lado direito da Eq. (2.26) pode ser aproximado por uma combinação linear das distribuições $\delta'(t)$ e $\delta(t)$.

Para um reservatório constituído de massas unitárias, i.e., com $M_L = I$, a matriz U_L da Eq. (2.12) é uma matriz ortogonal que diagonaliza a matriz positiva-definida Φ_L . A escolha da matriz de interações Φ_L é equivalente à escolha do conjunto de autovalores $\{\Omega_j^2\}$ e do conjunto dos elementos da matriz U_L , com a restrição $U_L^T U_L = I$ (i.e., as linhas ou as colunas da matriz U_L formam conjuntos ortonormais).

Pela Eq. (2.58), no domínio das frequências o núcleo $V_L g_L V_L^T$ é dado por

$$\Sigma_L(\omega) = V_L g_L(\omega) V_L^T = V_L U_L \left\{ \frac{i\pi}{2\Omega_L} [\delta(\omega - \Omega_L) - \delta(\omega + \Omega_L)] + P \frac{1}{\Omega_L^2 - \omega^2} \right\} U_L^T V_L^T \quad .$$

Supondo que apenas uma partícula do reservatório esquerdo interaja com a partícula da extremidade esquerda da cadeia, temos

$$[V_L]_{rs} = [V_L]_{11} \delta_{r1} \delta_{s1} \quad , \quad (2.91)$$

logo

$$[\Sigma_L(\omega)]_{rs} = [\Sigma_L(\omega)]_{11} \delta_{r1} \delta_{s1} \quad , \quad (2.92)$$

com

$$[\Sigma_L(\omega)]_{11} = [V_L]_{11}^2 \sum_{j=1}^n [U_L]_{1j}^2 \left\{ \frac{i\pi}{2\Omega_j} [\delta(\omega - \Omega_j) - \delta(\omega + \Omega_j)] + P \frac{1}{\Omega_j^2 - \omega^2} \right\} \quad . \quad (2.93)$$

Consideremos a escolha

$$\Omega_j = \frac{j}{n} \Omega_{\text{co}} \quad , \quad (2.94)$$

$$[U_L]_{1j}^2 = \frac{\Omega_j f(\Omega_j)}{\sum_{j=1}^n \Omega_j f(\Omega_j)} \quad , \quad (2.95)$$

onde Ω_{co} é uma frequência de “cut-off” e $f(\Omega)$ é uma função a ser escolhida posteriormente. Note-se que a condição de normalização $\sum_{j=1}^n [U_L]_{1j}^2 = 1$ é satisfeita. Os demais elementos de U_L não serão especificados, de modo que a escolha acima abrange uma classe de matrizes de interações Φ_L .

Levando (2.94) e (2.95) na Eq. (2.93), obtemos

$$[\Sigma_L(\omega)]_{11} = \frac{1}{2} [V_L]_{11}^2 \frac{\sum_{j=1}^n \left\{ i\pi [\delta(\omega - \Omega_j) - \delta(\omega + \Omega_j)] + P \frac{2\Omega_j}{\Omega_j^2 - \omega^2} \right\} f(\Omega_j) \Delta\Omega_j}{\sum_{j=1}^n \Omega_j f(\Omega_j) \Delta\Omega_j} \quad ,$$

onde multiplicamos o numerador e o denominador por $\Delta\Omega_j \equiv \frac{\Omega_{\text{co}}}{n}$.

Observando que o numerador e o denominador desta última expressão são somas de Riemann e tomando o limite $n \rightarrow \infty$, obtemos

$$[\Sigma_L(\omega)]_{11}^{n \rightarrow \infty} = \frac{1}{2} [V_L]_{11}^2 \frac{\int_0^{\Omega_{\text{co}}} \left\{ i\pi [\delta(\omega - \Omega) - \delta(\omega + \Omega)] + P \frac{2\Omega}{\Omega^2 - \omega^2} \right\} f(\Omega) d\Omega}{\int_0^{\Omega_{\text{co}}} \Omega f(\Omega) d\Omega} \quad .$$

Escolhendo $f(\Omega) = \Omega$, obtemos

$$\begin{aligned} [\Sigma_L(\omega)]_{11}^{n \rightarrow \infty} &= \frac{3}{2\Omega_{\text{co}}^3} [V_L]_{11}^2 \left[i\pi \omega \operatorname{rect}\left(\frac{\omega}{2\Omega_{\text{co}}}\right) + P \int_0^{\Omega_{\text{co}}} \frac{2\Omega^2}{\Omega^2 - \omega^2} d\Omega \right] \\ &= \frac{3}{2\Omega_{\text{co}}^3} [V_L]_{11}^2 \left[i\pi \omega \operatorname{rect}\left(\frac{\omega}{2\Omega_{\text{co}}}\right) + 2\Omega_{\text{co}} - \omega \ln \left| \frac{\Omega_{\text{co}} + \omega}{\Omega_{\text{co}} - \omega} \right| \right] , \end{aligned}$$

onde

$$\operatorname{rect}(x) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } |x| < \frac{1}{2} \\ 0 & , \text{ se } |x| > \frac{1}{2} \end{cases} .$$

Para Ω_{co} suficientemente grande, temos aproximadamente

$$[\Sigma_L(\omega)]_{11}^{n \rightarrow \infty} \cong \frac{3}{2\Omega_{\text{co}}^3} [V_L]_{11}^2 (\pi i\omega + 2\Omega_{\text{co}}) \operatorname{rect}\left(\frac{\omega}{2\Omega_{\text{co}}}\right) .$$

Tomando a transformada de Fourier, obtemos

$$[\Sigma_L(t)]_{11}^{n \rightarrow \infty} = [V_L g_L(t) V_L^T]_{11}^{n \rightarrow \infty} \cong \frac{3}{2\Omega_{\text{co}}^3} [V_L]_{11}^2 \left(-\pi \frac{d}{dt} + 2\Omega_{\text{co}} \right) \frac{\sin(2\Omega_{\text{co}}t)}{t} .$$

Para Ω_{co} muito grande (mas finito), a função $\frac{\sin(2\Omega_{\text{co}}t)}{t}$ é aproximadamente uma função delta de Dirac, logo

$$[V_L g_L(t) V_L^T]_{11}^{n \rightarrow \infty} \cong \frac{3}{2\Omega_{\text{co}}^3} [V_L]_{11}^2 [-\pi \delta'(t) + 2\Omega_{\text{co}}\delta(t)] .$$

Ressaltamos que a introdução de uma frequência de “cut-off” no espectro de frequências do reservatório é um procedimento recorrente na literatura [24, 25].

Definindo

$$\gamma_L \equiv \frac{3\pi}{2\Omega_{\text{co}}^3} [V_L]_{11}^2 , \quad (2.96)$$

escrevemos

$$[V_L g_L(t) V_L^T]_{11}^{n \rightarrow \infty} \cong -\gamma_L \delta'(t) + \left(\frac{2\sqrt{3}\gamma_L [V_L]_{11}}{\pi} \right)^{2/3} \delta(t) . \quad (2.97)$$

Neste caso, a r -ésima componente do termo

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' V_L g_L(t-t') V_L^T X_W(t')$$

da equação de Langevin quântica (2.26) se reduz a

$$\begin{aligned} \sum_s \int_{-\infty}^{\infty} dt' [V_L g_L(t-t') V_L^T]_{rs} x_s(t') &= \delta_{r1} \int_{-\infty}^{\infty} dt' [V_L g_L(t-t') V_L^T]_{11} x_1(t') \\ &\cong \delta_{r1} \left[-\gamma_L \dot{x}_1(t) + \left(\frac{2\sqrt{3}\gamma_L [V_L]_{11}}{\pi} \right)^{2/3} x_1(t) \right] . \end{aligned} \quad (2.98)$$

O termo linear em $\dot{x}_1(t)$ representa uma força dissipativa instantânea, tal como havíamos suposto na Eq. (2.90). Pela Eq. (2.96), a condição de que a frequência de “cut-off” seja muito grande é satisfeita ao supormos que o coeficiente de dissipação γ_L seja muito pequeno. Para γ_L suficientemente pequeno, o termo linear em $x_1(t)$ na equação acima pode ser absorvido no termo da equação de Langevin correspondente à força harmônica sobre a partícula que interage com o banho esquerdo, logo o segundo termo da Eq. (2.97) pode ser ignorado:

$$[V_L g_L(t) V_L^T]_{11}^{n \rightarrow \infty} \cong -\gamma_L \delta'(t) .$$

Tomando a transformada de Fourier, obtemos

$$[\Sigma_L(\omega)]_{11} = [V_L g_L(\omega) V_L^T]_{11}^{n \rightarrow \infty} \cong i\omega\gamma_L , \quad (2.99)$$

logo

$$[\Gamma_L(\omega)]_{11} = \text{Im} [\Sigma_L(\omega)]_{11} \cong \omega\gamma_L . \quad (2.100)$$

De modo análogo, obtemos para o reservatório direito

$$[V_R]_{rs} = [V_R]_{NN} \delta_{rN} \delta_{sN} , \quad (2.101)$$

$$[\Sigma_R(\omega)]_{rs} \cong i\omega\gamma_R \delta_{rN} \delta_{sN} , \quad (2.102)$$

$$[\Gamma_R(\omega)]_{rs} = \text{Im} [\Sigma_R(\omega)]_{rs} \cong \omega\gamma_R \delta_{rN} \delta_{sN} . \quad (2.103)$$

Pela Eq. (2.85), a corrente de calor é dada por

$$J_N = \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ \epsilon \rightarrow 0}} J_N^\pm , \quad (2.104)$$

onde J_N^\pm se escreve

$$J_N^\pm = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Tr} \{ G_W^+ \Gamma_L G_W^- \Gamma_R \} \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad , \quad (2.105)$$

sendo

$$f_{L,R}(\omega) \equiv f_b(\omega, T_{L,R}) = \left[\exp \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}} \right) - 1 \right]^{-1} \quad .$$

Das Eqs. (2.91), (2.92), (2.100), (2.101) e (2.103), segue que

$$\begin{aligned} J_N^\pm &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [G_W^+]_{N1} [\Gamma_L]_{11} [G_W^-]_{1N} [\Gamma_R]_{NN} \frac{\hbar\omega}{\pi} [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \\ &= \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega [G_W^+]_{N1} [G_W^-]_{1N} \omega^2 \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad , \end{aligned} \quad (2.106)$$

sendo

$$G_W^\pm = \frac{1}{-(\pm\omega + i\epsilon_\pm)^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L - \Sigma_R} \quad , \quad (2.107)$$

com

$$\begin{aligned} [\Sigma_L]_{rs} &= i\omega \gamma_L \delta_{r1} \delta_{s1} \quad , \\ [\Sigma_R]_{rs} &= i\omega \gamma_R \delta_{rN} \delta_{sN} \quad . \end{aligned} \quad (2.108)$$

Da equação de Langevin quântica (2.90), segue que a matriz de interações da cadeia é dada por

$$\Phi_W = M_W \omega_0^2 - \Delta \quad ,$$

com

$$\begin{aligned} [M_W]_{rs} &= \begin{cases} m_1 \delta_{rs} \quad , & \text{se } r \text{ é ímpar} \\ m_2 \delta_{rs} \quad , & \text{se } r \text{ é par} \end{cases} \quad , \\ \Delta_{rs} &= -2\delta_{rs} + \delta_{r,s+1} + \delta_{r,s-1} \quad . \end{aligned}$$

Em notação matricial, temos

$$\Phi = \begin{pmatrix} 2 + m_1\omega_0^2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 + m_2\omega_0^2 & -1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}_{N \times N} . \quad (2.109)$$

Definindo

$$Z^\pm \equiv -(\pm\omega + i\epsilon_\pm)^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L - \Sigma_R , \quad (2.110)$$

podemos escrever a Eq. (2.107) na forma

$$G_W^\pm = (Z^\pm)^{-1} , \quad (2.111)$$

logo a corrente (Eq. (2.106)) é dada por

$$J_N^\pm = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[(Z^+)^{-1} \right]_{N1} \left[(Z^-)^{-1} \right]_{1N} \omega^2 \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] . \quad (2.112)$$

Vamos definir a “matriz de impedância” Z^0 como

$$Z^0 \equiv Z^+|_{\epsilon_+=0} = -\omega^2 M_W + \Phi_W - \Sigma_L - \Sigma_R . \quad (2.113)$$

Os elementos desta matriz são dados por

$$Z_{rs}^0 = \begin{cases} z_1 \delta_{rs} - \delta_{r,s+1} - \delta_{r,s-1} - i\omega(\gamma_L \delta_{r1} \delta_{s1} + \gamma_R \delta_{rN} \delta_{sN}) , & \text{se } r \text{ é ímpar} \\ z_2 \delta_{rs} - \delta_{r,s+1} - \delta_{r,s-1} - i\omega(\gamma_L \delta_{r1} \delta_{s1} + \gamma_R \delta_{rN} \delta_{sN}) , & \text{se } r \text{ é par} \end{cases} .$$

onde

$$\begin{aligned} z_1 &\equiv 2 + m_1\omega_0^2 - m_1\omega^2 , \\ z_2 &\equiv 2 + m_2\omega_0^2 - m_2\omega^2 . \end{aligned} \quad (2.114)$$

$$\begin{aligned}
&= (z_1 - i\omega\gamma_L)(z_{1,2} - i\omega\gamma_R)D_{N-2}^{(2)} + (z_1 - i\omega\gamma_L) \left| \begin{array}{cccc} z_2 & -1 & & \\ -1 & z_1 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & z_{2,1} & -1 \\ & & & & -1 & z_{1,2} \\ & & & & & -1 & -1 \end{array} \right|_{(N-2)\times(N-2)} \\
&- \left| \begin{array}{cccc} z_1 & -1 & & \\ -1 & z_2 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & z_{2,1} & -1 \\ & & & & -1 & (z_{1,2} - i\omega\gamma_R) \end{array} \right|_{(N-2)\times(N-2)},
\end{aligned}$$

sendo $D_N^{(2)}$ definido por

$$D_N^{(2)} \equiv \left| \begin{array}{cccc} z_2 & -1 & & \\ -1 & z_1 & -1 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & z_{1,2} & -1 \\ & & & & -1 & z_{2,1} \end{array} \right|_{N \times N}. \quad (2.119)$$

Então temos

$$\det Z^0 = (z_1 - i\omega\gamma_L)(z_{1,2} - i\omega\gamma_R)D_{N-2}^{(2)} - (z_1 - i\omega\gamma_L)D_{N-3}^{(2)} - (z_{1,2} - i\omega\gamma_R)D_{N-3}^{(1)} + D_{N-4}^{(1)}, \quad (2.120)$$

onde $k = 1, 2, 3, \dots$ e $\beta > 0$ é dado por

$$e^\beta = \frac{z}{2} + \left(\frac{z^2}{4} + 1 \right)^{1/2} .$$

Demonstração. Com efeito, para $z > 0$ temos (cf. Eqs. (A.25) e (A.26))

$$D_{N-1}^0(iz) = \frac{\sinh(N\alpha)}{\sinh \alpha} ,$$

com

$$e^\alpha = \frac{iz}{2} + \left[\left(\frac{iz}{2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} = i \left[\frac{z}{2} + \left(\frac{z^2}{4} + 1 \right)^{1/2} \right] .$$

Como $z > 0$, temos $\frac{z}{2} + \left(\frac{z^2}{4} + 1 \right)^{1/2} > 1$, logo podemos definir

$$\beta \equiv \ln \left[\frac{z}{2} + \left(\frac{z^2}{4} + 1 \right)^{1/2} \right] > 0 ,$$

de modo que

$$e^\alpha = i e^\beta .$$

Então temos

$$D_{N-1}^0(iz) = \frac{e^{N\alpha} - e^{-N\alpha}}{e^\alpha - e^{-\alpha}} = i^{N-1} \frac{e^{N\beta} + (-1)^{N-1} e^{-N\beta}}{e^\beta - e^{-\beta}} .$$

Se $N = 2k$ ($k = 1, 2, 3, \dots$), temos

$$D_{N-1}^0(iz) = i (-1)^{k-1} \frac{e^{N\beta} - e^{-N\beta}}{e^\beta + e^{-\beta}} = i (-1)^{k-1} \frac{\sinh(N\beta)}{\cosh \beta} .$$

Se $N = 2k - 1$ ($k = 1, 2, 3, \dots$), temos

$$D_{N-1}^0(iz) = (-1)^{k-1} \frac{e^{N\beta} + e^{-N\beta}}{e^\beta + e^{-\beta}} = (-1)^{k-1} \frac{\cosh(N\beta)}{\cosh \beta} .$$

□

Se $z_1 z_2 < 0$, o Lema 2.3.1 implica

$$D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) = \begin{cases} i (-1)^{k-1} \frac{\sinh(N\beta)}{\cosh \beta} & \text{se } N = 2k \\ (-1)^{k-1} \frac{\cosh(N\beta)}{\cosh \beta} & \text{se } N = 2k - 1 \end{cases}, \quad (2.126)$$

onde $k = 1, 2, 3, \dots$ e $\beta > 0$ é dado por

$$e^\beta = \frac{\sqrt{|z_1 z_2|}}{2} + \left(\frac{|z_1 z_2|}{4} + 1 \right)^{1/2} > 1. \quad (2.127)$$

Se $z_1 z_2 = 0$, temos $e^\alpha = i \Rightarrow \alpha = i\pi/2$, logo

$$D_{N-1}^0(0) = \frac{\sin\left(N\frac{\pi}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2}\right)} = \sin\left(N\frac{\pi}{2}\right) = \begin{cases} 0 & \text{se } N = 2k \\ (-1)^{k-1} & \text{se } N = 2k - 1 \end{cases} \quad (k = 1, 2, 3, \dots),$$

portanto a fórmula (2.126) também é válida para $z_1 z_2 = 0$, mas com $\beta = 0$.

Lema 2.3.2. *Se $z_1 z_2 \neq 0$, então*

$$\operatorname{Re} [\det Z^0] = \sqrt{z_1 z_2} D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) - (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) D_{N-2}^0(\sqrt{z_1 z_2}), \quad (2.128)$$

$$\operatorname{Im} [\det Z^0] = - \left(\gamma_L s_1 \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R s_2 \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) \omega D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}). \quad (2.129)$$

Demonstração. Com efeito, se $z_1 z_2 > 0$, então pelas Eqs. (A.25) e (A.26), $D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})$ é real $\forall N$ e as expressões (2.128) e (2.129) decorrem imediatamente da Eq. (2.125).

Se, por outro lado, $z_1 z_2 < 0$, pela Eq. (2.125) só precisamos verificar que as expressões (2.128) e (2.129) são reais.

Neste caso, a equação (2.126) mostra que $D_{N-2}^0(\sqrt{z_1 z_2})$ é real. Além disso, temos

$$\sqrt{z_1 z_2} D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) = i \sqrt{|z_1 z_2|} D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}),$$

que é real, pois as Eqs. (2.126) e (2.127) mostram que $D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})$ é imaginário puro para N par.

Temos ainda

$$- \left(\gamma_L s_1 \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R s_2 \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) \omega D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) = - \left(\gamma_L s_1 \sqrt{\left| \frac{z_2}{z_1} \right|} + \gamma_R s_2 \sqrt{\left| \frac{z_1}{z_2} \right|} \right) \omega i D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) \quad ,$$

que é real, pois $D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})$ neste caso é imaginário puro.

Acabamos de verificar que as expressões de $\text{Re} [\det Z^0]$ e $\text{Im} [\det Z^0]$ são reais, o que completa a prova. □

No Apêndice C, os seguintes lemas são demonstrados:

Lema 2.3.3. *A matriz $Z^0(\omega)$ é invertível na linha real $\text{Im}(\omega) = 0$.*

Lema 2.3.4. *A matriz $Z^0(\omega)$ é invertível se $\text{Im} \omega > 0$.*

Corolário 2.3.1. *Seja $G_W^0(\omega) \equiv [Z^0(\omega)]^{-1}$. Então*

$$\text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} G_W^+(\omega) = G_W^0(\omega) \quad , \quad \text{i.e.,}$$

G_W^0 é a (única) função de Green que satisfaz a condição de causalidade $G_W^0(t) \propto \theta(t)$.

Demonstração. Com efeito, dos Lemas 2.3.3 e 2.3.4, segue que $G_W^0(\omega) = [Z^0(\omega)]^{-1}$ é analítica no semi-plano superior e na linha real (i.e., para $\text{Im} \omega \geq 0$), logo a transformada de Fourier inversa desta função satisfaz a condição de causalidade $G_W^0(t) \propto \theta(t)$ (cf. discussão que se segue à Eq. (2.48)). Como já havíamos argumentado após a Eq. (2.48), a função de Green causal é única, logo concluímos que $\text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} G_W^+(\omega) = G_W^0(\omega)$. □

Do corolário acima, também concluímos que

$$\text{wlim}_{\epsilon \downarrow 0} G_W^-(\omega) = [G_W^0(\omega)]^* \quad .$$

Do corolário acima e das Eqs. (2.104) e (2.118), concluímos que a corrente de calor é dada por

$$J_N = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\omega^2}{|\det Z^0|^2} \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad , \quad (2.130)$$

pois a analiticidade de $[Z^0(\omega)]^{-1}$ no semi-plano superior $\text{Im } \omega \geq 0$ implica a igualdade

$$\lim_{\substack{\epsilon_+ \downarrow 0 \\ \epsilon_- \downarrow 0}} J_N^\pm = J_N^\pm|_{\epsilon_+ = \epsilon_- = 0} \quad .$$

2.3.1 Limite termodinâmico e estrutura de bandas

Nesta subseção, mostraremos que $|\det Z^0| \rightarrow \infty$ no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, a não ser em determinadas faixas de frequências. Primeiro, obteremos estimativas para as contribuições à corrente das faixas de frequências nas quais $|\det Z^0| \rightarrow \infty$; em seguida, deduziremos uma expressão para a corrente no limite termodinâmico.

Sejam

$$\begin{aligned} m_< &\equiv \min\{m_1, m_2\} \quad , \\ m_> &\equiv \max\{m_1, m_2\} \quad . \end{aligned} \quad (2.131)$$

Considerando as Eqs. (2.114), podemos definir

$$\begin{aligned} z_< &\equiv 2 + m_<(\omega_0^2 - \omega^2) \quad , \\ z_> &\equiv 2 + m_>(\omega_0^2 - \omega^2) \quad . \end{aligned} \quad (2.132)$$

Ainda que não se tenha necessariamente $z_< = \min\{z_1, z_2\}$, $z_> = \max\{z_1, z_2\}$, adotaremos a notação $z_<$, $z_>$, identificando $z_< \leftrightarrow m_<$ e $z_> \leftrightarrow m_>$.

Pelas Eqs. (2.126), (2.127), (A.25) e (A.26), o comportamento de $|D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})|$ em função da frequência muda conforme seja $z_1 z_2 < 0$, $z_1 z_2 = 0$ ou $z_1 z_2 > 0$. No Apêndice A, mostramos que $z_1 z_2 = 4$ deve ser analisado como um caso à parte, sugerindo que os casos $0 < z_1 z_2 < 4$ e $z_1 z_2 > 4$ também devam ser analisados separadamente.

Das Eqs. (2.132), segue que

$$\text{I) } z_1 z_2 < 0 \quad , \quad \text{se} \quad \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} < |\omega| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}}$$

- II) $0 < z_1 z_2 < 4$, se $\omega_0 < |\omega| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}}$ ou $\sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}} < |\omega| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$
- III) $z_1 z_2 > 4$, se $|\omega| < \omega_0^2$ ou $|\omega| > \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_<}}$

Analisemos os três casos enumerados acima.

$$\text{I)} \quad \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} < |\omega| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}}$$

Neste caso, $z_1 z_2 < 0$ e da Eq. (2.129) temos

$$|\text{Im} [\det Z^0]|^2 = \frac{(\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|)^2 \omega^2 [D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})]^2}{|z_1 z_2|} . \quad (2.133)$$

As raízes de $\text{Im} [\det Z^0]$ são

$$\omega_{\pm} \equiv \pm \left[\omega_0^2 + 2 \left(\frac{\gamma_L}{\gamma_L + \gamma_R} m_2 + \frac{\gamma_R}{\gamma_L + \gamma_R} m_1 \right)^{-1} \right]^{1/2} , \text{ i.e. ,} \quad (2.134)$$

$$\text{Im} [\det Z^0] = 0 \Leftrightarrow \omega = \omega_{\pm}$$

Como $m_< < \frac{\gamma_L}{\gamma_L + \gamma_R} m_2 + \frac{\gamma_R}{\gamma_L + \gamma_R} m_1 < m_>$, temos

$$\sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} < |\omega_{\pm}| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}} . \quad (2.135)$$

Sejam

$$\gamma_< \equiv \begin{cases} \gamma_L & , \text{ se } m_< = m_1 \\ \gamma_R & , \text{ se } m_< = m_2 \end{cases} , \quad (2.136)$$

$$\gamma_> \equiv \begin{cases} \gamma_L & , \text{ se } m_> = m_1 \\ \gamma_R & , \text{ se } m_> = m_2 \end{cases} . \quad (2.137)$$

A equação (2.133) pode ser escrita na forma

$$|\text{Im} [\det Z^0]|^2 = \frac{(\gamma_< |z_>| - \gamma_> |z_<|)^2 \omega^2 [D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})]^2}{|z_1 z_2|} .$$

Seja

$$2\delta \equiv \min \left\{ \omega_{\pm}^2 - \omega_0^2 - \frac{2}{m_{>}} , \frac{2}{m_{<}} + \omega_0^2 - \omega_{\pm}^2 \right\} . \quad (2.138)$$

Se $0 < \omega^2 - \omega_0^2 - \frac{2}{m_{>}} \leq \delta$ ou $0 < \frac{2}{m_{<}} + \omega_0^2 - \omega^2 \leq \delta$, então $(\gamma_{<}|z_{>}| - \gamma_{>}|z_{<}|)^2 \geq \tilde{C}$ para alguma constante $\tilde{C} > 0$.

Das Eqs. (2.126) e (2.127), temos

$$|D_{N-1}^0| = \frac{\sinh(N\beta)}{\cosh \beta} ,$$

com

$$|z_1 z_2| = 4 \sinh^2 \beta ,$$

logo

$$|\text{Im} [\det Z^0]|^2 \geq \frac{\tilde{C}\omega^2 \sinh^2(N\beta)}{4 \sinh^2 \beta \cosh^2 \beta} .$$

Observando que

$$\begin{aligned} \frac{\sinh(N\beta)}{\sinh \beta} &= \frac{e^{N\beta} - e^{-N\beta}}{e^{\beta} - e^{-\beta}} = e^{-(N-1)\beta} \frac{e^{2N\beta} - 1}{e^{2\beta} - 1} = e^{-(N-1)\beta} \sum_{k=0}^{N-1} e^{2k\beta} \geq \\ &\geq e^{-(N-1)\beta} \sum_{k=N/2}^{N-1} e^{2k\beta} \geq e^{-(N-1)\beta} \frac{N}{2} e^{2\frac{N}{2}\beta} \geq \frac{N}{2} , \end{aligned}$$

concluimos que se $\omega_0^2 + \frac{2}{m_{>}} < \omega^2 \leq \omega_0^2 + \frac{2}{m_{>}} + \delta$ ou $\omega_0^2 + \frac{2}{m_{<}} - \delta \leq \omega^2 < \omega_0^2 + \frac{2}{m_{<}}$, então

$$|\text{Im} [\det Z^0]|^2 \geq \frac{\tilde{C}\omega^2 N^2}{16 \cosh^2 \beta} . \quad (2.139)$$

Se $\omega^2 = \omega_0^2 + \frac{2}{m_{>}}$, então $z_{>} = 0$ e temos

$$|\text{Im} [\det Z^0]| = \gamma_{>}|\omega||z_{<}|\frac{N+2}{2} > \gamma_{>}|\omega||z_{<}|\frac{N}{2} .$$

Se $m_< \neq m_>$, então neste caso $|z_<| > 0$, logo

$$|\text{Im} [\det Z^0]|^2 \geq \frac{C\omega^2 N^2}{\cosh^2 \beta} \quad \forall \omega^2 \in \left[\omega_0^2 + \frac{2}{m_>} , \omega_0^2 + \frac{2}{m_>} + \delta \right] , \quad (2.140)$$

para alguma constante positiva C .

Analogamente, se $\omega^2 = \omega_0^2 + \frac{2}{m_<}$ e $m_< \neq m_>$, então $z_< = 0$ e temos

$$|\text{Im} [\det Z^0]|^2 \geq \frac{C\omega^2 N^2}{\cosh^2 \beta} \quad \forall \omega^2 \in \left[\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} , \omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \delta \right] , \quad (2.141)$$

para alguma constante positiva C .

Note-se que se $m_1 = m_2$, a faixa de frequências com $z_1 z_2 \leq 0$ desaparece, já que neste caso $z_1 = z_2 \Rightarrow z_1 z_2 = z_1^2$.

Se $\omega_0^2 + \frac{2}{m_>} + \delta \leq \omega^2 \leq \omega_0^2 + \frac{2}{m_<} - \delta$, então segue da Eq. (2.128) que

$$|\text{Re} [\det Z^0]|^2 \geq |D_N^0(\sqrt{z_1 z_2})|^2 = \frac{\cosh^2[(N+1)\beta]}{\cosh^2 \beta} \geq \frac{e^{2(N+1)\beta}}{4e^{2\beta}} = \frac{e^{2N\beta}}{4} \geq \frac{\xi^N}{4} , \quad (2.142)$$

onde ξ é uma constante. Como $\beta > 0$ em todo o intervalo $\left[\omega_0^2 + \frac{2}{m_>} + \delta , \omega_0^2 + \frac{2}{m_<} - \delta \right]$, temos $\xi > 1$.

Das equações acima, concluímos:

$$|\det Z^0|^2 \geq |\text{Im} [\det Z^0]|^2 \geq \frac{C\omega^2 N^2}{\cosh^2 \beta} , \text{ se} \\ \omega^2 \in W_I \equiv \left[\omega_0^2 + \frac{2}{m_>} , \omega_0^2 + \frac{2}{m_>} + \delta \right] \cup \left[\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} - \delta , \omega_0^2 + \frac{2}{m_<} \right] . \quad (2.143)$$

$$|\det Z^0|^2 \geq |\text{Re} [\det Z^0]|^2 \geq \frac{\xi^N}{4} \quad (\xi > 1) , \text{ se} \\ \omega^2 \in W_R \equiv \left[\omega_0^2 + \frac{2}{m_>} + \delta , \omega_0^2 + \frac{2}{m_<} - \delta \right] . \quad (2.144)$$

A contribuição à corrente das frequências no intervalo

$$\sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} \leq |\omega| \leq \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}}$$

tende a zero no limite $N \rightarrow \infty$, pois (cf. Eq. (2.130))

$$\begin{aligned} & \int_{\sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} \leq |\omega| \leq \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}}} d\omega \frac{\omega^2}{|\det Z^0|^2} \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \leq \\ & \leq \frac{1}{CN^2} \int_{\omega^2 \in W_I} d\omega \cosh^2 \beta \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] + \frac{4}{\xi^N} \int_{\omega^2 \in W_R} d\omega \omega^2 \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad , \end{aligned}$$

uma vez que $\xi > 1$ e as integrais convergem (pois $|\omega| > 0$ e $|\omega|$ é limitado).

$$\text{II) } |\omega| < \omega_0 \quad \text{ou} \quad |\omega| > \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$$

Neste caso, $z_1 z_2 > 4$.

Observe-se que $z_1 z_2 = 4$ nos extremos $|\omega| = \omega_0$ e $|\omega| = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$. Da Eq. (C.11), obtemos

$$|\det Z^0|^2 \geq |\text{Im} [\det Z^0]|^2 = \frac{(\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|)^2 \omega^2 \sinh^2(N\alpha)}{z_1 z_2 \sinh^2 \alpha} \quad ,$$

onde $\alpha > 0$. Usando a Eq. (A.26), obtemos

$$\begin{aligned} |\det Z^0|^2 & \geq (\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|)^2 \omega^2 \frac{\sinh^2(N\alpha)}{4 \cosh^2 \alpha \sinh^2 \alpha} \\ & = (\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|)^2 \omega^2 \frac{\sinh^2\left(\frac{N}{2} 2\alpha\right)}{\sinh^2(2\alpha)} \\ & \geq (\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|)^2 \omega^2 \frac{N^2}{16} \quad , \end{aligned}$$

onde usamos a desigualdade $\frac{\sinh(nx)}{\sinh x} \geq \frac{n}{2}$ para n inteiro positivo e $x > 0$.

Esta última desigualdade já foi provada para n par. Se n for ímpar, a prova é similar:

$$\begin{aligned} \frac{\sinh(nx)}{\sinh x} &= e^{-(n-1)x} \frac{e^{2nx} - 1}{e^{2x} - 1} = e^{-(n-1)x} \sum_{k=0}^{n-1} e^{2kx} \geq \\ &\geq e^{-(n-1)x} \sum_{k=\frac{n+1}{2}}^{n-1} e^{2kx} \geq e^{-(n-1)x} \frac{n+1}{2} e^{(n+1)x} = \frac{n+1}{2} e^{2x} \geq \frac{n}{2} . \end{aligned}$$

Portanto, temos

$$|\det Z^0|^2 \geq (\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|)^2 \omega^2 \frac{N^2}{16} \geq C \omega^2 N^2 ,$$

onde usamos o fato de que as raízes de $\gamma_L |z_2| - \gamma_R |z_1|$ estão fora dos intervalos $|\omega| < \omega_0$ ou $|\omega| > \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$ (cf. Eq. (2.135)).

No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, mostraremos a seguir que também inexistente transporte de calor nas faixas de frequências $|\omega| \leq \omega_0$ ou $|\omega| \geq \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$.

Com efeito, os valores absolutos das respectivas contribuições à corrente são cotados por

$$\frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi C N^2} \int_{|\omega| \leq \omega_0} d\omega \left[\frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T_L}} - 1} + \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T_R}} - 1} \right] \leq \frac{2\omega_0 \gamma_L \gamma_R}{\pi C N^2} k_B (T_L + T_R) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 ,$$

onde usamos a desigualdade $e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1 \geq \frac{\hbar \omega}{k_B T}$, e

$$\frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi C N^2} \int_{|\omega| \geq \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}} d\omega \left[\frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T_L}} - 1} + \frac{\hbar \omega}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T_R}} - 1} \right] \leq \frac{C'}{N^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 ,$$

pois claramente a integral converge.

$$\text{III) } \omega_0 < |\omega| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} \quad \text{ou} \quad \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}} < |\omega| < \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$$

Neste caso, $0 < z_1 z_2 < 4$. Observe-se que $z_1 z_2 = 0$ nos extremos $|\omega| = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}}$ e $|\omega| = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}}$ e que $z_1 z_2 = 4$ nos extremos $|\omega| = \omega_0$ e $|\omega| = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}}$.

Definindo

$$\begin{aligned} B_1 &\equiv \left[\omega_0, \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_>}} \right] , \\ B_2 &\equiv \left[\sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<}}, \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_<} + \frac{2}{m_>}} \right] , \end{aligned} \quad (2.145)$$

segue dos itens (I) e (II) e da Eq. (2.130) que a expressão da corrente J_N em uma cadeia de tamanho N é dada por

$$J_N = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi} \int_{|\omega| \in B_1 \cup B_2} d\omega \frac{\omega^2}{|\det Z^0|^2} \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) . \quad (2.146)$$

Nas próximas páginas, deduziremos uma expressão para a corrente no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$.

Das Eqs. (C.6) e (C.7), obtemos

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta |\det Z^0|^2 &= \left\{ \sqrt{z_1 z_2} \sin(N\theta) - (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \sin[(N-1)\theta] \right\}^2 + \\ &\quad + \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right)^2 \omega^2 \sin^2(N\theta) \\ &= \left\{ \left[\sqrt{z_1 z_2} - (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \cos \theta \right] \sin(N\theta) + \left[(1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \sin \theta \right] \cos(N\theta) \right\}^2 + \\ &\quad + \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right)^2 \omega^2 \sin^2(N\theta) . \end{aligned} \quad (2.147)$$

Sejam

$$A(\theta) \equiv (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \sin \theta \quad , \quad (2.148)$$

$$B(\theta) \equiv \sqrt{z_1 z_2} - (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \cos \theta \quad , \quad (2.149)$$

$$C(\theta) \equiv \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) \omega \quad . \quad (2.150)$$

Usando as definições (2.148)-(2.150), a Eq. (2.147) se escreve

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta |\det Z^0|^2 &= [A \cos(N\theta) + B \sin(N\theta)]^2 + C^2 \sin^2(N\theta) \\ &= A^2 \cos^2(N\theta) + B^2 \sin^2(N\theta) + 2AB \sin(N\theta) \cos(N\theta) + C^2 \sin^2(N\theta) \\ &= A^2 \cos^2(N\theta) + (B^2 + C^2) \sin^2(N\theta) + AB \sin(2N\theta) \\ &= \frac{A^2}{2} [1 + \cos(2N\theta)] + \frac{B^2 + C^2}{2} [1 - \cos(2N\theta)] + AB \sin(2N\theta) \quad , \end{aligned}$$

logo

$$\sin^2 \theta |\det Z^0|^2 = \frac{1}{2} (A^2 + B^2 + C^2) + \frac{1}{2} [A^2 - (B^2 + C^2)] \cos(2N\theta) + AB \sin(2N\theta) \quad . \quad (2.151)$$

Na proposição seguinte, sugerida por Casher e Lebowitz [23], apresentamos uma técnica para calcular a corrente no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$.

Proposição 2.3.1. [Casher-Lebowitz] *Seja $F : [0, p] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $(x, y) \mapsto F(x, y)$, uma função contínua, diferenciável em relação a x em $(0, p) \times \mathbb{R}$ e tal que a derivada parcial $\frac{\partial F}{\partial x}$ é limitada em $(0, p) \times \mathbb{R}$. Então se $F(x, y)$ é periódica de período p em relação a y ,*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^p F(x, Nx) dx = \frac{1}{p} \int_0^p \int_0^p F(x, y) dx dy \quad .$$

Demonstração.

$$\begin{aligned} \int_0^p F(x, Nx) dx &= \sum_{j=0}^{N-1} \int_{pj/N}^{p(j+1)/N} F(x, Nx) dx \\ &= \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_{pj}^{p(j+1)} F\left(\frac{y}{N}, y\right) dy \quad . \end{aligned}$$

Como $F(x, y)$ é contínua em $[0, p] \times \mathbb{R}$ e diferenciável em relação a x em $(0, p) \times \mathbb{R}$, pelo Teorema do Valor Médio temos

$$F\left(\frac{y}{N}, y\right) = F\left(\frac{pj}{N}, y\right) + \frac{\partial F}{\partial x}\left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y\right) \frac{y - pj}{N},$$

onde $0 < \xi_j < \frac{y - pj}{N}$.

Então escrevemos

$$\int_0^p F(x, Nx) dx = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_{pj}^{p(j+1)} F\left(\frac{pj}{N}, y\right) dy + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_{pj}^{p(j+1)} \frac{\partial F}{\partial x}\left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y\right) \frac{y - pj}{N} dy.$$

Mudando a variável de integração de y para $y - pj$, obtemos

$$\int_0^p F(x, Nx) dx = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p F\left(\frac{pj}{N}, y + pj\right) dy + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p \frac{\partial F}{\partial x}\left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y + pj\right) \frac{y}{N} dy,$$

com $0 < \xi_j < \frac{y}{N}$.

Como $F(x, y)$ é periódica de período p em relação a y , temos $F(x, y + pj) = F(x, y)$ e $\frac{\partial F}{\partial x}(x, y + pj) = \frac{\partial F}{\partial x}(x, y)$, logo

$$\int_0^p F(x, Nx) dx = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p F\left(\frac{pj}{N}, y\right) dy + \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p \frac{\partial F}{\partial x}\left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y\right) \frac{y}{N} dy, \quad (2.152)$$

onde $0 < \xi_j < \frac{y}{N}$.

O primeiro termo da Eq. (2.152) é uma soma de Riemann, de modo que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p F\left(\frac{pj}{N}, y\right) dy = \frac{1}{p} \int_0^p \int_0^p F(x, y) dx dy.$$

Resta-nos apenas demonstrar que o segundo termo da Eq. (2.152) se anula no limite $N \rightarrow \infty$.

Com efeito, $0 < \xi_j < \frac{y}{N}$ e $0 \leq j \leq N - 1$ implicam

$$0 \leq \frac{pj}{N} < \frac{pj}{N} + \xi_j < \frac{pj}{N} + \frac{y}{N} \leq \frac{p(N-1)}{N} + \frac{y}{N} . \quad (2.153)$$

Como $0 \leq y \leq p$, temos $\frac{p(N-1)}{N} + \frac{y}{N} \leq \frac{p(N-1)}{N} + \frac{p}{N} = p$, logo a Eq. (2.153) implica $0 < \frac{pj}{N} + \xi_j < p$.

Como $0 < \frac{pj}{N} + \xi_j < p$ e a derivada parcial é limitada em $(0, p) \times \mathbb{R}$, temos

$$\left| \frac{\partial F}{\partial x} \left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y \right) \right| \leq M ,$$

onde M é uma constante (i.e., independente de x, y). Então temos

$$\begin{aligned} \left| \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p \frac{\partial F}{\partial x} \left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y \right) \frac{y}{N} dy \right| &\leq \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p \left| \frac{\partial F}{\partial x} \left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y \right) \right| \frac{y}{N} dy \\ &\leq \frac{M}{N^2} \sum_{j=0}^{N-1} \int_0^p y dy \\ &= \frac{Mp^2}{2} \frac{1}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 , \end{aligned}$$

logo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{N} \int_0^p \frac{\partial F}{\partial x} \left(\frac{pj}{N} + \xi_j, y \right) \frac{y}{N} dy = 0 ,$$

donde concluimos que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^p F(x, Nx) dx = \frac{1}{p} \int_0^p \int_0^p F(x, y) dx dy .$$

□

Da Eq. (2.146), segue que a corrente é dada por

$$J_N = \int_0^{\pi/2} F_1(\theta, N\theta) d\theta + \int_0^{\pi/2} F_2(\theta, N\theta) d\theta + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N^2} \right) , \quad (2.154)$$

onde as funções $F_1(\theta, \varphi)$ e $F_2(\theta, \varphi)$, definidas em \mathbb{R}^2 , são dadas por

$$F_{1,2}(\theta, \varphi) = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi} \frac{(d\omega/d\theta) \omega^2 \sin^2 \theta}{G_{1,2}(\theta, \varphi)} \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad (2.155)$$

(a função $G(\theta, \varphi)$ será definida adiante). Os contra-domínios de F_1 e F_2 são, respectivamente, os conjuntos

$$\begin{aligned} & \{F_1(\theta, \varphi) ; (\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2, |\omega(\theta)| \in B_1\} \quad , \\ & \{F_2(\theta, \varphi) ; (\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2, |\omega(\theta)| \in B_2\} \quad . \end{aligned}$$

Invertendo a relação $z_<z_> = [2 - m_<(\omega^2 - \omega_0^2)] [2 - m_>(\omega^2 - \omega_0^2)] = 4 \cos^2 \theta$ (Eqs. (C.5) e (2.132)), obtemos ω^2 como função de θ

$$\omega^2 - \omega_0^2 = \begin{cases} \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} - \sqrt{\left(\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}\right)^2 - \frac{4 \sin^2 \theta}{m_< m_>}} \quad , & \text{se } |\omega| \in B_1 \\ \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} + \sqrt{\left(\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}\right)^2 - \frac{4 \sin^2 \theta}{m_< m_>}} \quad , & \text{se } |\omega| \in B_2 \end{cases} \quad (2.156)$$

Das Eqs. (2.151) e (2.148)-(2.150), temos para $(\theta, \varphi) \in \mathbb{R}^2 - \{k\pi/2; k \in \mathbb{Z}\}$

$$\begin{aligned} G_{1,2}(\theta, \varphi) = & \frac{1}{2} [A^2(\theta) + B^2(\theta) + C^2(\theta)] + \frac{1}{2} [A^2(\theta) - B^2(\theta) - C^2(\theta)] \cos(2\varphi) + \\ & + A(\theta)B(\theta) \sin(2\varphi) \quad , \end{aligned} \quad (2.157)$$

$$\begin{aligned} \text{com} \quad A(\theta) & \equiv (1 + \gamma_<\gamma_> \omega^2) \sin \theta \quad , \\ B(\theta) & \equiv (1 - \gamma_<\gamma_> \omega^2) \cos \theta \quad , \\ C^2(\theta) & \equiv (\gamma_<|z_>| + \gamma_>|z_<|)^2 \frac{\omega^2}{4 \cos^2 \theta} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{e} \quad z_< & = 2 - m_<(\omega^2 - \omega_0^2) \quad , \\ z_> & = 2 - m_>(\omega^2 - \omega_0^2) \quad . \end{aligned}$$

Como $F_{1,2}(\theta, \varphi)$ é função par e periódica de período π com relação a θ , temos

$$\int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, N\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, N\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} F_{1,2}(\theta, N\theta) d\theta \quad . \quad (2.158)$$

Dada a dificuldade da análise, não mostraremos aqui que a função F satisfaz as hipóteses da Proposição 2.3.1. Aceitaremos este fato sem demonstração.

Aplicando a Proposição 2.3.1 à integral do lado direito da Eq. (2.158), obtemos

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, N\theta) d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi \quad . \quad (2.159)$$

Como $F_{1,2}(\theta, \varphi)$ é função periódica de período π em relação a θ , podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_{-\pi/2}^0 F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi \quad , \end{aligned}$$

Como a função $F_{1,2}(\theta, \varphi)$ é par, segue que

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^0 \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi \quad ,$$

Como $F_{1,2}(\theta, \varphi)$ é função periódica de período π em relação a φ , temos

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^0 \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi \quad ,$$

logo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, N\theta) d\theta = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi/2} F_{1,2}(\theta, \varphi) d\theta d\varphi \quad . \quad (2.160)$$

Das Eqs. (2.154), (2.155), (2.157) e (2.160), concluimos que o limite $N \rightarrow \infty$ da

corrente é dado por

$$J \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} J_N = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi^2} \int_{|\omega| \in B_1 \cup B_2} d\omega \omega^2 \sin^2 \theta \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \int_0^\pi 2 d\varphi \left\{ (A^2 + B^2 + C^2) + [A^2 - (B^2 + C^2)] \cos(2\varphi) + 2AB \sin(2\varphi) \right\}^{-1} .$$

Seja

$$I(\theta) \equiv 2 \int_0^\pi d\varphi \left\{ (A^2 + B^2 + C^2) + [A^2 - (B^2 + C^2)] \cos(2\varphi) + 2AB \sin(2\varphi) \right\}^{-1} . \quad (2.161)$$

Então

$$J = \lim_{N \rightarrow \infty} J_N = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi^2} \int_{|\omega| \in B_1 \cup B_2} d\omega \omega^2 \sin^2 \theta \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] I(\theta) , \quad (2.162)$$

com

$$\begin{aligned} I(\theta) &= \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{(A^2 + B^2 + C^2) + [A^2 - (B^2 + C^2)] \cos(2\varphi) + 2AB \sin(2\varphi)} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\varphi}{(A^2 + B^2 + C^2) + [A^2 - (B^2 + C^2)] \cos(2\varphi) + 2AB \sin(2\varphi)} . \end{aligned}$$

A integral $I(\theta)$ pode ser calculada a partir de uma substituição de Weierstrass, $t \equiv \tan\left(\frac{\varphi}{2}\right)$. Temos, portanto,

$$\sin \varphi = \frac{2t}{1+t^2} , \quad \cos \varphi = \frac{1-t^2}{1+t^2} , \quad d\varphi = \frac{2 dt}{1+t^2} .$$

Na nova variável, a integral $I(\theta)$ se escreve

$$\begin{aligned}
I(\theta) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2 dt}{(A^2 + B^2 + C^2)(1 + t^2) + [A^2 - (B^2 + C^2)](1 - t^2) + 4 AB t} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{(B^2 + C^2)t^2 + 2 AB t + A^2} \\
&= \frac{1}{B^2 + C^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\left(t + \frac{AB}{B^2 + C^2}\right)^2 + \frac{A^2}{B^2 + C^2} - \frac{A^2 B^2}{(B^2 + C^2)^2}} \\
&= \frac{1}{B^2 + C^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{t^2 + \frac{A^2}{B^2 + C^2} - \frac{A^2 B^2}{(B^2 + C^2)^2}} \\
&= (B^2 + C^2) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{(B^2 + C^2)^2 t^2 + A^2(B^2 + C^2) - A^2 B^2} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{t^2 + A^2(B^2 + C^2) - A^2 B^2} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{A^2 C^2 + t^2} \quad ,
\end{aligned}$$

logo

$$I(\theta) = \frac{\pi}{|AC|} \quad . \quad (2.163)$$

Das Eqs. (2.162) e (2.163), obtemos

$$J = \lim_{N \rightarrow \infty} J_N = \frac{\gamma_L \gamma_R}{\pi} \int_{|\omega| \in B_1 \cup B_2} d\omega \frac{\omega^2 \sin^2 \theta}{|A(\theta)C(\theta)|} \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad . \quad (2.164)$$

Das Eqs. (2.148) e (2.150), obtemos

$$\begin{aligned}
|A(\theta)C(\theta)| &= \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) |\omega \sin \theta| \\
&= \left(\gamma_{<} \sqrt{\frac{z_{>}}{z_{<}}} + \gamma_{>} \sqrt{\frac{z_{<}}{z_{>}}} \right) (1 + \gamma_{<} \gamma_{>} \omega^2) |\omega \sin \theta| \\
&= (\gamma_{<} |z_{>}| + \gamma_{>} |z_{<}|) (1 + \gamma_{<} \gamma_{>} \omega^2) \frac{|\omega \sin \theta|}{\sqrt{z_{<} z_{>}}} \quad .
\end{aligned}$$

Usando a Eq. (C.5), obtemos

$$|A(\theta)C(\theta)| = (\gamma_{<} |z_{>}| + \gamma_{>} |z_{<}|) (1 + \gamma_{<} \gamma_{>} \omega^2) \frac{|\omega \sin \theta|}{2 \cos \theta} \quad . \quad (2.165)$$

Levando esta expressão na Eq. (2.164), obtemos

$$J = \frac{2\gamma_{<}\gamma_{>}}{\pi} \int_{|\omega| \in B_1 \cup B_2} d\omega \frac{|\omega| \sin \theta \cos \theta}{(\gamma_{<}|z_{>}| + \gamma_{>}|z_{<}|)(1 + \gamma_{<}\gamma_{>}\omega^2)} \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad , \quad (2.166)$$

onde lembramos (cf. Eqs. (C.5), (2.132) e (2.145)) que

$$\cos \theta = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} \quad , \quad (2.167)$$

$$z_{<} = 2 + m_{<}(\omega_0^2 - \omega^2) \quad , \quad (2.168)$$

$$z_{>} = 2 + m_{>}(\omega_0^2 - \omega^2) \quad , \quad (2.169)$$

$$B_1 = \left[\omega_0, \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_{>}}} \right] \quad , \quad B_2 = \left[\sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_{<}}} , \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2}{m_{<}} + \frac{2}{m_{>}}} \right] \quad . \quad (2.170)$$

Como o integrando na Eq. (2.166) é uma função par de ω (o fator $\hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)]$ é uma função par de ω), escrevemos

$$J = \frac{4\gamma_{<}\gamma_{>}}{\pi} \int_{\omega \in B_1 \cup B_2} d\omega \frac{\omega \sin \theta \cos \theta}{(\gamma_{<}|z_{>}| + \gamma_{>}|z_{<}|)(1 + \gamma_{<}\gamma_{>}\omega^2)} \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad .$$

Das Eqs. (2.168), (2.169) e (2.170), segue que

$$|z_{<}| = \begin{cases} z_{<} & , \text{ se } \omega \in B_1 \\ -z_{<} & , \text{ se } \omega \in B_2 \end{cases} \quad ,$$

$$|z_{>}| = \begin{cases} z_{>} & , \text{ se } \omega \in B_1 \\ -z_{>} & , \text{ se } \omega \in B_2 \end{cases} \quad .$$

Temos, portanto

$$J = \frac{4\gamma_{<}\gamma_{>}}{\pi} \left[\int_{B_1} d\omega - \int_{B_2} d\omega \right] \frac{\omega \sin \theta \cos \theta}{(\gamma_{<}z_{>} + \gamma_{>}z_{<})(1 + \gamma_{<}\gamma_{>}\omega^2)} \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] \quad .$$

No modelo em questão, temos $\gamma_{<} = \zeta_{<}m_{<}$ e $\gamma_{>} = \zeta_{>}m_{>}$ (i.e., a força dissipativa

sobre uma partícula da extremidade da cadeia é proporcional ao seu momento), logo

$$J = \frac{4m_{<}m_{>}\zeta_{<}\zeta_{>}}{\pi} \left[\int_{B_1} d\omega - \int_{B_2} d\omega \right] \frac{\omega \sin \theta \cos \theta \hbar \omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)]}{(\zeta_{<}m_{<}z_{>} + \zeta_{>}m_{>}z_{<}) (1 + \zeta_{<}\zeta_{>}m_{<}m_{>} \omega^2)} . \quad (2.171)$$

Esta última expressão será estudada analiticamente em dois casos limites: altas temperaturas, correspondendo ao limite clássico; baixas temperaturas, em que os efeitos quânticos são mais pronunciados.

2.3.2 Limite de altas temperaturas (clássico)

No limite $\frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}} \rightarrow 0$, a Eq. (2.171) se escreve

$$\frac{J_{cl}}{k_B(T_L - T_R)} = \frac{4m_{<}m_{>}\zeta_{<}\zeta_{>}}{\pi} \left[\int_{B_1} d\omega - \int_{B_2} d\omega \right] \frac{\omega \sin \theta \cos \theta}{(\zeta_{<}m_{<}z_{>} + \zeta_{>}m_{>}z_{<}) (1 + \zeta_{<}\zeta_{>}m_{<}m_{>} \omega^2)} . \quad (2.172)$$

Usando a mudança de variável $x \equiv \omega^2 - \omega_0^2$ e a Eq. (2.167), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{J_{cl}}{k_B(T_L - T_R)} &= \\ &= \frac{m_{<}m_{>}\zeta_{<}\zeta_{>}}{\pi} \left[\int_0^{2/m_{>}} dx - \int_{2/m_{<}}^{2/m_{<}+2/m_{>}} dx \right] \frac{\sqrt{z_1 z_2} \sqrt{1 - \frac{z_1 z_2}{4}}}{(\zeta_{<}m_{<}z_{>} + \zeta_{>}m_{>}z_{<}) [1 + \zeta_{<}\zeta_{>}m_{<}m_{>} (x + \omega_0^2)]} , \end{aligned} \quad (2.173)$$

onde (cf. Eqs. (2.168) e (2.169))

$$\begin{aligned} z_{<} &= 2 - m_{<}x , \\ z_{>} &= 2 - m_{>}x . \end{aligned} \quad (2.174)$$

Observando que

$$z_{<}z_{>} \left(1 - \frac{z_{<}z_{>}}{4} \right) = 1 - \frac{1}{4} (z_{<}z_{>} - 2)^2 ,$$

a Eq. (2.173) pode ser reescrita como

$$\frac{J_{cl}}{k_B(T_L - T_R)} = \frac{m_{<}m_{>}\zeta^2}{\pi(\zeta_{<} + \zeta_{>})} \left[\int_0^{2/m_{>}} h(x; \zeta, \zeta_{<}, \zeta_{>}, \omega_0) dx - \int_{2/m_{<}}^{2/m_{<}+2/m_{>}} h(x; \zeta, \zeta_{<}, \zeta_{>}, \omega_0) dx \right], \quad (2.175)$$

onde definimos

$$\zeta \equiv \sqrt{\zeta_{<}\zeta_{>}} \quad (2.176)$$

e sendo

$$h(x; \zeta, \zeta_{<}, \zeta_{>}, \omega_0) \equiv \frac{(\zeta_{<} + \zeta_{>})\sqrt{1 - \frac{1}{4}(z_{<}z_{>} - 2)^2}}{(\zeta_{<}m_{<}z_{>} + \zeta_{>}m_{>}z_{<}) [1 + \zeta^2 m_{<}m_{>} (x + \omega_0^2)]}. \quad (2.177)$$

Das Eqs. (2.174), obtemos

$$\zeta_{<}m_{<}z_{>} + \zeta_{>}m_{>}z_{<} = (\zeta_{<} + \zeta_{>}) \left(2 \frac{\zeta_{<}m_{<} + \zeta_{>}m_{>}}{\zeta_{<} + \zeta_{>}} - m_{<}m_{>}x \right),$$

logo

$$\begin{aligned} h(x; \zeta, \zeta_{<}, \zeta_{>}, \omega_0) &= \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2 - m_{<}x)(2 - m_{>}x) - 2]^2}}{\left(2 \frac{\zeta_{<}m_{<} + \zeta_{>}m_{>}}{\zeta_{<} + \zeta_{>}} - m_{<}m_{>}x \right) [1 + \zeta^2 m_{<}m_{>} (x + \omega_0^2)]} \\ &= \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4}[(2 - m_{<}x)(2 - m_{>}x) - 2]^2}}{\left[2 \left(\frac{\zeta_{<}m_{<} + \zeta_{>}m_{>}}{\zeta_{<} + \zeta_{>}} - \frac{m_{<} + m_{>}}{2} \right) + m_{<} + m_{>} - m_{<}m_{>}x \right] [1 + \zeta^2 m_{<}m_{>} (x + \omega_0^2)]}. \end{aligned}$$

Denotemos a média ponderada na equação anterior por

$$W\{m_{<}, m_{>}; \zeta_{<}, \zeta_{>}\} \equiv \frac{\zeta_{<}m_{<} + \zeta_{>}m_{>}}{\zeta_{<} + \zeta_{>}} \quad (2.178)$$

e a média aritmética por

$$A\{m_{<}, m_{>}\} \equiv \frac{m_{<} + m_{>}}{2}. \quad (2.179)$$

Então escrevemos

$$h(x; \zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0) = \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4} [(2 - m_<x)(2 - m_>x) - 2]^2}}{[2(W - A) + m_< + m_> - m_<m_>x] [1 + \zeta^2 m_<m_> (x + \omega_0^2)]} , \quad (2.180)$$

onde omitimos os argumentos para simplificar a notação.

Observando que

$$h(x; \zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0) = \frac{1}{\zeta^2} \left(\frac{\zeta^2}{1 + \zeta^2 m_<m_> \omega_0^2} \right) \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4} [(2 - m_<x)(2 - m_>x) - 2]^2}}{[2(W - A) + m_< + m_> - m_<m_>x] \left[1 + \left(\frac{\zeta^2}{1 + \zeta^2 m_<m_> \omega_0^2} \right) m_<m_>x \right]} ,$$

definimos o coeficiente de dissipação reescalado

$$\zeta' \equiv \frac{\zeta}{\sqrt{1 + \zeta^2 m_<m_> \omega_0^2}} \quad (2.181)$$

e escrevemos

$$h(x; \zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0) = \left(\frac{\zeta'}{\zeta} \right)^2 h(x; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0) , \quad (2.182)$$

onde

$$h(x; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0) = \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4} [(2 - m_<x)(2 - m_>x) - 2]^2}}{[2(W - A) + m_< + m_> - m_<m_>x] [1 + \zeta'^2 m_<m_>x]} . \quad (2.183)$$

Explicitando os argumentos ζ , $\zeta_<$, $\zeta_>$ e ω_0 da corrente J_{cl} na Eq. (2.175), temos

$$\frac{J_{cl}(\zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0)}{k_B(T_L - T_R)} = \frac{m_<m_>\zeta^2}{\pi(\zeta_< + \zeta_>)} \left[\int_0^{2/m_>} h(x; \zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0) dx - \int_{2/m_<}^{2/m_<+2/m_>} h(x; \zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0) dx \right] . \quad (2.184)$$

Das Eqs. (2.182) e (2.184), concluímos que

$$J_{cl}(\zeta, \zeta_<, \zeta_>, \omega_0) = J_{cl}(\zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0) , \quad (2.185)$$

com ζ' dado pela Eq. (2.181).

No Apêndice D, obtém-se o resultado exato (cf. Eq. (D.30))

$$J_{cl} = \frac{k_B(T_L - T_R)}{2m_1m_2\zeta'^2(\zeta_L + \zeta_R)} \left\{ 1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) - 2\zeta'^2(W - A) - \frac{\zeta'^4 \sqrt{[(m_1 - m_2)^2 - 4(W - A)^2][(m_1 + m_2)^2 - 4(W - A)^2]}}{1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) + 2\zeta'^2(W - A)} - \frac{\sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_1 + m_2)](1 + 2\zeta'^2m_1)(1 + 2\zeta'^2m_2)}}{1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) + 2\zeta'^2(W - A)} \right\}, \quad (2.186)$$

onde lembramos (cf. Eqs. (2.181), (2.176), (2.178) e (2.179)) que

$$\zeta' = \sqrt{\frac{\zeta_L \zeta_R}{1 + \zeta_L \zeta_R m_1 m_2 \omega_0^2}},$$

$$W = \frac{\zeta_L m_1 + \zeta_R m_2}{\zeta_L + \zeta_R},$$

$$A = \frac{m_1 + m_2}{2}.$$

Em particular, para $\zeta_L = \zeta_R \equiv \zeta$ temos $W = A$ e a Eq. (2.186) se reduz a (Ref. [29])

$$J_{cl} = \frac{k_B(T_L - T_R)}{4m_1m_2\zeta\zeta'^2} \left\{ 1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) - \frac{\zeta'^4 |m_1^2 - m_2^2|}{1 + \zeta'^2(m_1 + m_2)} - \frac{\sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_1 + m_2)](1 + 2\zeta'^2m_1)(1 + 2\zeta'^2m_2)}}{1 + \zeta'^2(m_1 + m_2)} \right\}. \quad (2.187)$$

No limite $m_1 \rightarrow m_2 = m$ e para $\omega_0 = 0$, a Eq. (2.187) se reduz a

$$J_{cl} = \frac{k_B(T_L - T_R)}{4m^2\zeta^3} \left(1 + 2m\zeta^2 - \sqrt{1 + 4m\zeta^2} \right), \quad (2.188)$$

que é o mesmo resultado obtido por Rieder, Lebowitz e Lieb para o fluxo de calor em uma cadeia clássica homogênea, na ausência de qualquer potencial *on-site* [4].

No limite assintótico $m \rightarrow \infty$, a corrente na cadeia homogênea com $\omega_0 = 0$ decai

como

$$\frac{J_{cl}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0)}{k_B(T_L - T_R)} \sim \frac{1}{2\zeta m} \quad .$$

Escrevendo $m = 1/\epsilon$, onde $\epsilon \ll 1$ (o sistema de unidades é definido de tal forma que a massa seja adimensional), temos

$$\frac{J_{cl}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0)}{k_B(T_L - T_R)} \sim \frac{\epsilon}{2\zeta} \quad . \quad (2.189)$$

Para $\omega_0 \neq 0$, temos

$$\frac{J_{cl}^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0)}{k_B(T_L - T_R)} \sim \frac{\epsilon^2}{2\zeta\omega_0^2} \quad . \quad (2.190)$$

Observe-se que o potencial *on-site* produz o efeito de diminuir a corrente.

Consideremos agora uma cadeia com massas muito grandes e muito pequenas se alternando, mais precisamente com

$$\begin{aligned} m_{<} &= \epsilon \ll 1 \quad , \\ m_{>} &= 1/\epsilon \quad , \end{aligned} \quad (2.191)$$

em que o sistema de unidades é definido de maneira que as massas sejam adimensionais.

Levando (2.191) na Eq. (2.187) e expandindo em potências de ϵ , obtemos

$$\frac{J_{cl}^{\text{alt}}}{k_B(T_L - T_R)} = \frac{\zeta'^2}{4\zeta} \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad .$$

Da Eq. (2.181), segue que

$$\frac{J_{cl}^{\text{alt}}}{k_B(T_L - T_R)} = \frac{\zeta}{4(1 + \zeta^2\omega_0^2)} \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad . \quad (2.192)$$

Note-se que esta expressão é válida para ambos os casos $\omega_0 = 0$ e $\omega_0 \neq 0$. Novamente, o potencial *on-site* produz o efeito de diminuir a corrente. Esta expressão já havia sido obtida nas Refs. [28, 36] para o caso $\omega_0 = 0$.

Para $\omega_0 = 0$, segue das Eqs. (2.189) e (2.192) que

$$\frac{J_{cl}^{\text{alt}}(\omega_0 = 0)}{J_{cl}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0)} \sim \frac{\zeta^2}{2} \epsilon \quad . \quad (2.193)$$

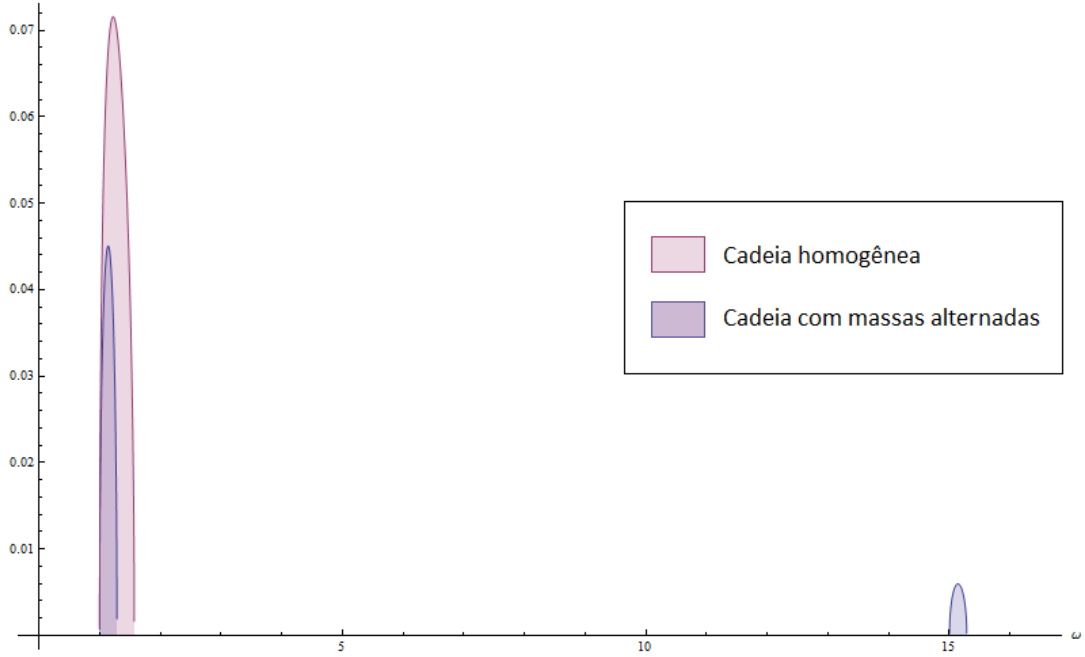


Figura 2.4: Contribuição das frequências para a corrente em uma cadeia homogênea com $m = 7$ vs. cadeia com massas alternadas $m_{<} = 1/7$, $m_{>} = 7$, para $\zeta_L = \zeta_R = 1$ e $\omega_0 = 1$.

Para $\omega_0 \neq 0$, segue das Eqs. (2.190) e (2.192) que

$$\frac{J_{cl}^{alt}(\omega_0 \neq 0)}{J_{cl}^{hom}(\omega_0 \neq 0)} \sim \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^2 \omega_0^2}{\zeta^2 \omega_0^2 + 1} \right) < \frac{1}{2} . \quad (2.194)$$

As Eqs. (2.193) e (2.194) mostram que a alternância de massas ora muito grandes, ora muito pequenas ao longo da cadeia é um mecanismo de isolamento térmico mais eficiente do que o simples aumento das massas numa cadeia homogênea. No caso $\omega_0 = 0$, tal efeito já havia sido apresentado nas Refs. [28,36]. O gráfico do integrando da Eq. (2.172) em função da frequência, mostrado na Fig. 2.4, evidencia que há mais frequências contribuindo significativamente para a corrente na cadeia homogênea, originando o efeito isolante observado na cadeia de massas alternadas. Nos gráficos das Figs. 2.5 e 2.6, observa-se que o decaimento da corrente é mais acentuado ao longo da diagonal $m_1 = m_2$ do que ao longo da hipérbole $m_1 m_2 = 1$. Note-se também que o efeito é mais acentuado para $\omega_0 = 0$, tal como previsto nas Eqs. (2.193) e (2.194).

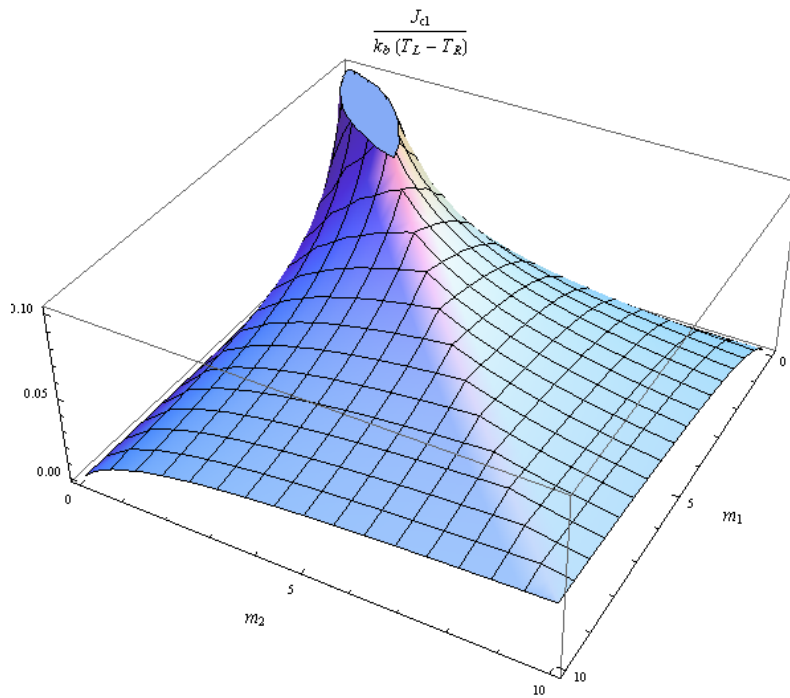


Figura 2.5: Corrente por diferença de temperatura em função das massas m_1 e m_2 para $\zeta_L = \zeta_R = 1$ e $\omega_0 = 0$ (cf. Eq. (2.187)).

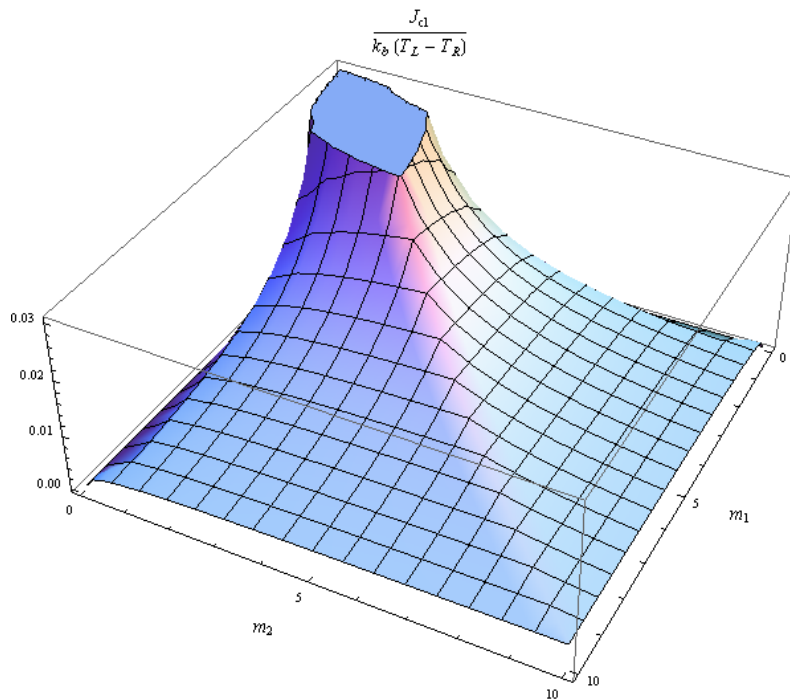


Figura 2.6: Corrente por diferença de temperatura em função das massas m_1 e m_2 para $\zeta_L = \zeta_R = 1$ e $\omega_0 = 1$ (cf. Eq. (2.187)).

Corrente em uma cadeia homogênea com massas tendendo a zero

Para uma cadeia homogênea (i.e., com $m_1 = m_2 = m$) mostraremos que o limite da corrente quando $m \rightarrow 0$ muda abruptamente do regime clássico (limite de altas temperaturas) para o quântico.

Pondo $m_< = m_> = m$ na Eq. (2.187) e expandindo mJ_{cl} em série de Taylor para pequenas massas, obtemos

$$\frac{J_{cl}}{k_B(T_L - T_R)} = \frac{1}{2\zeta m} [1 + \mathcal{O}(m)] \xrightarrow{m \rightarrow 0} \infty . \quad (2.195)$$

Consideremos agora o regime quântico. Para $\zeta_< = \zeta_> = \zeta$ e $m_< = m_> = m$, a Eq. (2.171) se escreve

$$J = \frac{m\zeta}{\pi} \int_{\omega_0}^{\sqrt{\omega_0^2 + \frac{4}{m}}} d\omega \frac{\omega \sqrt{1 - [1 - \frac{1}{2}m(\omega^2 - \omega_0^2)]^2}}{1 + \zeta^2 m^2 \omega^2} \hbar\omega [f_L(\omega) - f_R(\omega)] .$$

Usando a mudança de variável $u \equiv m(\omega^2 - \omega_0^2)$, temos

$$J = \frac{\hbar\zeta}{2\pi} \int_0^4 du \frac{\sqrt{u} \sqrt{1 - \frac{u}{4}}}{1 + \zeta^2 m^2 \omega_0^2 + \zeta^2 m u} \frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \left[f_L \left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) - f_R \left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) \right] ,$$

logo

$$|J| \leq \frac{\hbar\zeta\sqrt{m}}{2\pi} \int_0^4 du \sqrt{1 - \frac{u}{4}} \left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right)^2 \left[f_L \left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) + f_R \left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) \right] . \quad (2.196)$$

Observando que

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}}\right) - 1 &\geq \frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}} + \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}}\right)^2 \geq \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}}\right)^2 \Rightarrow \\ \Rightarrow \omega^2 \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T_{L,R}}\right) - 1 \right]^{-1} &\leq \frac{2k_B^2 T_{L,R}^2}{\hbar^2} , \end{aligned}$$

obtemos

$$\omega^2 f_{L,R}(\omega) \leq \frac{2 k_B^2 T_{L,R}^2}{\hbar^2} ,$$

logo a desigualdade (2.196) implica

$$|J| \leq \frac{\zeta \sqrt{m}}{\pi \hbar} k_B^2 (T_L^2 + T_R^2) \int_0^4 du \sqrt{1 - \frac{u}{4}} ,$$

i.e.,

$$|J| \leq \frac{8\zeta \sqrt{m}}{3\pi \hbar} k_B^2 (T_L^2 + T_R^2) \xrightarrow{m \rightarrow 0} 0 . \quad (2.197)$$

Em resumo, no regime quântico a corrente decai a zero não mais lentamente que \sqrt{m} , em contraste com o regime clássico, no qual a corrente tende a infinito proporcionalmente a $1/m$.

2.3.3 Limite de baixas temperaturas

Nesta subseção, obteremos estimativas para a corrente no limite de baixas temperaturas, tanto para $\omega_0 = 0$ quanto $\omega_0 \neq 0$, em dois casos distintos: cadeia homogênea com $m_1 = m_2 = 1/\epsilon \gg 1$ e cadeia com massas grandes e pequenas se alternando, tal como na Eq. (2.191).

Usando novamente a mudança de variável $x \equiv \omega^2 - \omega_0^2$ e lembrando da relação $\cos \theta = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2}$, para $\zeta_< = \zeta_> = \zeta$ a integral (2.171) pode ser escrita como

$$J = \frac{m_< m_> \zeta}{\pi} \left[\int_0^{2/m_>} dx - \int_{2/m_<}^{2/m_< + 2/m_>} dx \right] \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4} (z_< z_> - 2)^2}}{(m_< z_> + m_> z_<) [1 + \zeta^2 m_< m_> (x + \omega_0^2)]} \times \\ \times \hbar \sqrt{\omega_0^2 + x} \left[f_L(\sqrt{\omega_0^2 + x}) - f_R(\sqrt{\omega_0^2 + x}) \right] , \quad (2.198)$$

onde $z_<$ e $z_>$ são dados pelas Eqs. (2.174).

I) $\omega_0 = 0$

No regime de baixas temperaturas, apenas valores de x próximos de zero contribuem substancialmente para a integral (2.198), logo a corrente numa cadeia com massas $m_< = \epsilon \ll 1$, $m_> = 1/\epsilon$ é dada por

$$J_{LT}^{\text{alt}} = \frac{\zeta\epsilon}{2\pi} \int_0^{2\epsilon} dx \frac{\sqrt{\frac{x}{\epsilon} \left(2 - \frac{x}{\epsilon}\right)}}{1 + \zeta^2\omega_0^2 + \zeta^2x} \hbar\sqrt{\omega_0^2 + x} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + x}}{k_B T_L}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + x}}{k_B T_R}\right) \right].$$

Mudando a variável de integração para $y = \frac{x}{2\epsilon}$, obtemos

$$\begin{aligned} J_{LT}^{\text{alt}} &= \frac{2\zeta\epsilon^2}{\pi} \int_0^1 dy \frac{\sqrt{y(1-y)}}{1 + \zeta^2\omega_0^2 + 2\zeta^2\epsilon y} \times \\ &\quad \times \hbar\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y}}{k_B T_L}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y}}{k_B T_R}\right) \right] \\ &\cong \frac{2\zeta\epsilon^2}{\pi(1 + \zeta^2\omega_0^2)} \int_0^1 dy \left(1 - \frac{2\zeta^2\epsilon}{1 + \zeta^2\omega_0^2} y\right) \sqrt{y(1-y)} \times \\ &\quad \times \hbar\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y}}{k_B T_L}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y}}{k_B T_R}\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.199)$$

Para $\omega_0 = 0$, temos

$$\begin{aligned} J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 = 0) &\cong \\ &\cong \frac{2\sqrt{2}\hbar\zeta\epsilon^{5/2}}{\pi} \int_0^1 dy (1 - 2\zeta^2\epsilon y) y\sqrt{1-y} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon\sqrt{y}}}{k_B T_L}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon\sqrt{y}}}{k_B T_R}\right) \right] \\ &= \frac{4\sqrt{2}\hbar\zeta\epsilon^{5/2}}{\pi} \int_0^1 du u^3 (1 - 2\zeta^2\epsilon u^2) \sqrt{1-u^2} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T_L} u\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T_R} u\right) \right] \\ &\cong \frac{4\sqrt{2}\hbar\zeta\epsilon^{5/2}}{\pi} \int_0^1 du u^3 \sqrt{1-u^2} \left[\exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T_L} u\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T_R} u\right) \right]. \end{aligned} \quad (2.200)$$

No regime de resposta linear $T_L - T_R \ll \frac{T_L + T_R}{2} \equiv T$, temos

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T_L}\right) &= \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) + \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) (T_L - T) + \mathcal{O}(T_L - T)^2 \quad , \\ \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T_R}\right) &= \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) + \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) (T_R - T) + \mathcal{O}(T_L - T_R)^2 \quad ,\end{aligned}$$

logo

$$\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T_L}\right) - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T_R}\right) = \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) (T_L - T_R) + \mathcal{O}(T_L - T_R)^2 \quad . \quad (2.201)$$

Usando esta expansão na Eq. (2.200), obtemos

$$\frac{J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 = 0)}{k_B (T_L - T_R)} \cong \frac{8\hbar^2 \zeta \epsilon^3}{\pi (k_B T)^2} \int_0^1 du u^4 \sqrt{1-u^2} \exp\left(-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T} u\right) \quad . \quad (2.202)$$

Observando que

$$\begin{aligned}\frac{8\hbar^2 \zeta \epsilon^3 e^{-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T}}}{\pi (k_B T)^2} \int_0^1 du u^4 \sqrt{1-u^2} &\leq \frac{8\hbar^2 \zeta \epsilon^3}{\pi (k_B T)^2} \int_0^1 du u^4 \sqrt{1-u^2} e^{-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T} u} \leq \frac{8\hbar^2 \zeta \epsilon^3}{\pi (k_B T)^2} \int_0^1 du u^4 \sqrt{1-u^2} \\ \Rightarrow \frac{\hbar^2 \zeta \epsilon^3 e^{-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T}}}{4 (k_B T)^2} &\leq \frac{8\hbar^2 \zeta \epsilon^3}{\pi (k_B T)^2} \int_0^1 du u^4 \sqrt{1-u^2} e^{-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T} u} \leq \frac{\hbar^2 \zeta \epsilon^3}{4 (k_B T)^2}\end{aligned}$$

e que o erro devido à substituição de $J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 = 0)$ pela expressão do lado direito da Eq. (2.202) é de ordem superior à mesma, existem constantes $0 < C_1 < 1$ e $C_2 > 1$ tais que $\forall \epsilon$ e $\forall (T_L - T_R)$ suficientemente pequenos

$$C_1 \frac{\hbar^2 \zeta e^{-\frac{\hbar\sqrt{2\epsilon}}{k_B T}}}{4 (k_B T)^2} \epsilon^3 \leq \frac{J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 = 0)}{k_B (T_L - T_R)} \leq C_2 \frac{\hbar^2 \zeta}{4 (k_B T)^2} \epsilon^3 \quad . \quad (2.203)$$

Consideremos agora a cadeia homogênea a baixas temperaturas, com $\omega_0 = 0$. A

corrente neste caso é obtida da Eq. (2.198) pondo-se $m_< = m_> \equiv m$,

$$\begin{aligned}
J^{\text{hom}} &= \frac{m\hbar\zeta}{4\pi} \left[\int_0^{2/m} dx + \int_{2/m}^{4/m} dx \right] \frac{\sqrt{4 - (z^2 - 2)^2}}{|z| [1 + \zeta^2 m^2 (x + \omega_0^2)]} \times \\
&\quad \times \sqrt{\omega_0^2 + x} \left[f_L(\sqrt{\omega_0^2 + x}) - f_R(\sqrt{\omega_0^2 + x}) \right] \\
&= \frac{m\hbar\zeta}{4\pi} \int_0^{4/m} dx \frac{\sqrt{4 - z^2}}{[1 + \zeta^2 m^2 (x + \omega_0^2)]} \times \\
&\quad \times \sqrt{\omega_0^2 + x} \left[f_L(\sqrt{\omega_0^2 + x}) - f_R(\sqrt{\omega_0^2 + x}) \right] .
\end{aligned}$$

Lembrando que $z = 2 - mx$ (Eqs. (2.174)), obtemos

$$\begin{aligned}
J^{\text{hom}} &= \frac{m\hbar\zeta}{4\pi} \int_0^{4/m} dx \frac{\sqrt{mx(4 - mx)}}{[1 + \zeta^2 m^2 (x + \omega_0^2)]} \sqrt{\omega_0^2 + x} \left[f_L(\sqrt{\omega_0^2 + x}) - f_R(\sqrt{\omega_0^2 + x}) \right] \\
&= \frac{\hbar\zeta}{4\pi\sqrt{m}} \int_0^4 du \frac{\sqrt{u(4 - u)}\sqrt{u + m\omega_0^2}}{[1 + \zeta^2 m (u + m\omega_0^2)]} \left[f_L\left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}}\right) - f_R\left(\frac{\sqrt{u + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}}\right) \right] .
\end{aligned}$$

Mudando a variável para $y = \sqrt{u}$, segue que

$$J^{\text{hom}} = \frac{\hbar\zeta}{\pi\sqrt{m}} \int_0^2 dy \frac{\sqrt{y^2 + m\omega_0^2}\sqrt{1 - \frac{y^2}{4}}}{1 + \zeta^2 m (y^2 + m\omega_0^2)} y^2 \left[f_L\left(\frac{\sqrt{y^2 + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}}\right) - f_R\left(\frac{\sqrt{y^2 + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}}\right) \right] . \tag{2.204}$$

Para $\omega_0 = 0$, temos

$$J^{\text{hom}}(\omega_0 = 0) = \frac{\hbar\zeta}{\pi\sqrt{m}} \int_0^2 dy \frac{y\sqrt{1 - \frac{y^2}{4}}}{1 + \zeta^2 m y^2} y^2 \left[f_L\left(\frac{y}{\sqrt{m}}\right) - f_R\left(\frac{y}{\sqrt{m}}\right) \right] .$$

Para baixas temperaturas e no regime de resposta linear (cf. Eq. (2.201)), obtemos

$$\begin{aligned} J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0) &= \frac{\hbar^2 \zeta(T_L - T_R)}{\pi m k_B T^2} \int_0^2 dy \frac{y^4 \sqrt{1 - \frac{y^2}{4}}}{1 + \zeta^2 m y^2} \exp\left(-\frac{\hbar y}{k_B T \sqrt{m}}\right) \\ &= \frac{32 \hbar^2 \zeta(T_L - T_R)}{\pi m k_B T^2} \int_0^1 dx \frac{x^4 \sqrt{1 - x^2}}{1 + 4 \zeta^2 m x^2} \exp\left(-\frac{2 \hbar x}{k_B T \sqrt{m}}\right) , \end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned} \frac{8 \hbar^2 (T_L - T_R)}{\pi \zeta m^2 k_B T^2} \exp\left(-\frac{2 \hbar}{k_B T \sqrt{m}}\right) \int_0^1 dx \frac{x^4 \sqrt{1 - x^2}}{1 + x^2} &\leq J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0) \leq \frac{8 \hbar^2 (T_L - T_R)}{\pi \zeta m^2 k_B T^2} \int_0^1 dx x^2 \sqrt{1 - x^2} \\ \Rightarrow \frac{(8\sqrt{2} - 11) \hbar^2 (T_L - T_R)}{2 \zeta k_B T^2 m^2} \exp\left(-\frac{2 \hbar}{k_B T \sqrt{m}}\right) &\leq J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0) \leq \frac{\hbar^2 (T_L - T_R)}{2 \zeta k_B T^2 m^2} . \end{aligned}$$

Para $m = 1/\epsilon$, temos

$$\frac{\hbar^2 (8\sqrt{2} - 11) e^{-\frac{2 \hbar \sqrt{\epsilon}}{k_B T}}}{2 \zeta (k_B T)^2} \epsilon^2 \leq \frac{J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0)}{k_B (T_L - T_R)} \leq \frac{\hbar^2}{2 \zeta (k_B T)^2} \epsilon^2 . \quad (2.205)$$

Das desigualdades (2.203) e (2.205), concluimos que

$$C_1 \frac{\zeta^2 e^{-\frac{\hbar \sqrt{2 \epsilon}}{k_B T}}}{2} \epsilon \leq \frac{J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 = 0)}{J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 = 0)} \leq C_2 \frac{\zeta^2 e^{\frac{2 \hbar \sqrt{\epsilon}}{k_B T}}}{2 (8\sqrt{2} - 11)} \epsilon . \quad (2.206)$$

Portanto, o efeito termo-isolante observado em cadeias clássicas com massas alternadas e com $\omega_0 = 0$ (cf. Eq. (2.193)) continua sendo válido no regime de baixas temperaturas (v. gráfico da Fig. 2.7).

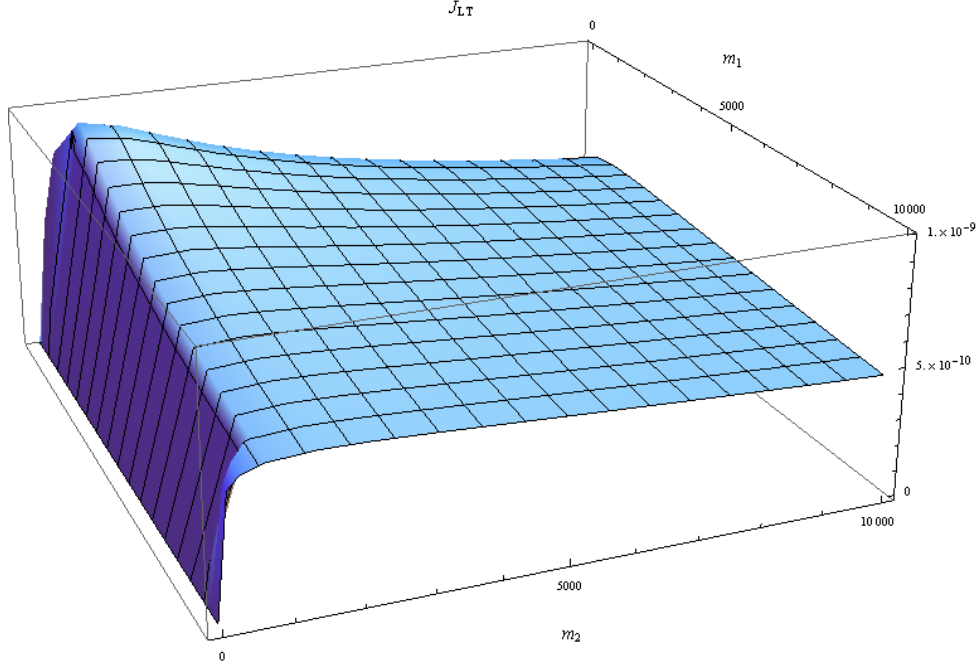


Figura 2.7: Corrente em função das massas m_1 e m_2 para $\zeta_L = \zeta_R = 1$, $\omega_0 = 0$, $k_B T_L = 1/1000$, $k_B T_R = 1/1050$, sendo $\hbar = 1$. Gráfico obtido por integração numérica (cf. Eq. (2.198)).

II) $\omega_0 \neq 0$

Neste caso, temos $\sqrt{\omega_0^2 + 2\epsilon y} \cong \omega_0 + \frac{\epsilon y}{\omega_0}$, logo a Eq. (2.199) implica

$$\begin{aligned}
 J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 \neq 0) &\cong \frac{2\hbar\zeta\epsilon^2}{\pi(1+\zeta^2\omega_0^2)} \int_0^1 dy \sqrt{y(1-y)} \omega_0 \left(e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_L}} e^{-\frac{\hbar\epsilon}{k_B T_L \omega_0} y} - e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_R}} e^{-\frac{\hbar\epsilon}{k_B T_R \omega_0} y} \right) \\
 &\cong \frac{2\hbar\omega_0\zeta\epsilon^2}{\pi(1+\zeta^2\omega_0^2)} \int_0^1 dy \sqrt{y(1-y)} \left(e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_L}} - e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_R}} \right). \quad (2.207)
 \end{aligned}$$

No regime de resposta linear $T_L - T_R \ll \frac{T_L + T_R}{2} \equiv T$, segue da Eq. (2.201) que

$$\begin{aligned}
 J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 \neq 0) &\cong \frac{2\hbar\omega_0\zeta\epsilon^2}{\pi(1+\zeta^2\omega_0^2)} \int_0^1 dy \sqrt{y(1-y)} \frac{\hbar\omega_0}{(k_B T)^2} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} \\
 &= \frac{2\hbar^2\omega_0^2\zeta\epsilon^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}}{\pi(1+\zeta^2\omega_0^2)(k_B T)^2} \int_0^1 dy \sqrt{y(1-y)}.
 \end{aligned}$$

logo

$$J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 \neq 0) \cong \frac{\hbar^2 \omega_0^2 \zeta \epsilon^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}}{4(1 + \zeta^2 \omega_0^2) (k_B T)^2} . \quad (2.208)$$

Consideremos agora uma cadeia homogênea a baixas temperaturas, com $\omega_0 \neq 0$. A corrente neste caso é dada pela Eq. (2.204),

$$\begin{aligned} J^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0) &= \frac{\hbar \zeta}{\pi \sqrt{m}} \int_0^2 dy \frac{\sqrt{y^2 + m\omega_0^2} \sqrt{1 - \frac{y^2}{4}}}{1 + \zeta^2 m (y^2 + m\omega_0^2)} y^2 \times \\ &\quad \times \left[f_L \left(\frac{\sqrt{y^2 + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) - f_R \left(\frac{\sqrt{y^2 + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) \right] \\ &= \frac{8\hbar \zeta}{\pi \sqrt{m}} \int_0^1 du \frac{\sqrt{4u^2 + m\omega_0^2} \sqrt{1 - u^2}}{1 + \zeta^2 m^2 \omega_0^2 + 4\zeta^2 m u^2} u^2 \times \\ &\quad \times \left[f_L \left(\frac{\sqrt{4u^2 + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) - f_R \left(\frac{\sqrt{4u^2 + m\omega_0^2}}{\sqrt{m}} \right) \right] . \end{aligned}$$

No limite de baixas temperaturas, obtemos

$$\begin{aligned} J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0) &\cong \frac{8\hbar \zeta}{\pi \sqrt{m}} \int_0^1 du \frac{\sqrt{4u^2 + m\omega_0^2} \sqrt{1 - u^2}}{1 + \zeta^2 m^2 \omega_0^2 + 4\zeta^2 m u^2} u^2 \times \\ &\quad \times \left[\exp \left(-\frac{\hbar \sqrt{4u^2 + m\omega_0^2}}{k_B T_L \sqrt{m}} \right) - \exp \left(-\frac{\hbar \sqrt{4u^2 + m\omega_0^2}}{k_B T_R \sqrt{m}} \right) \right] . \end{aligned}$$

Para $m = 1/\epsilon \gg 1$, obtemos

$$J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0) \cong \frac{8\hbar \epsilon^2}{\pi \zeta \omega_0} \left(e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_L}} - e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T_R}} \right) \int_0^1 du u^2 \sqrt{1 - u^2} .$$

No regime de resposta linear $T_L - T_R \ll \frac{T_L + T_R}{2} \equiv T$, segue da Eq. (2.201) que

$$J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0) \cong \frac{8\hbar^2 \epsilon^2}{\pi \zeta (k_B T)^2} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} \int_0^1 du u^2 \sqrt{1 - u^2} ,$$

logo

$$J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0) \cong \frac{\hbar^2 \epsilon^2}{2\zeta (k_B T)^2} e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}} . \quad (2.209)$$

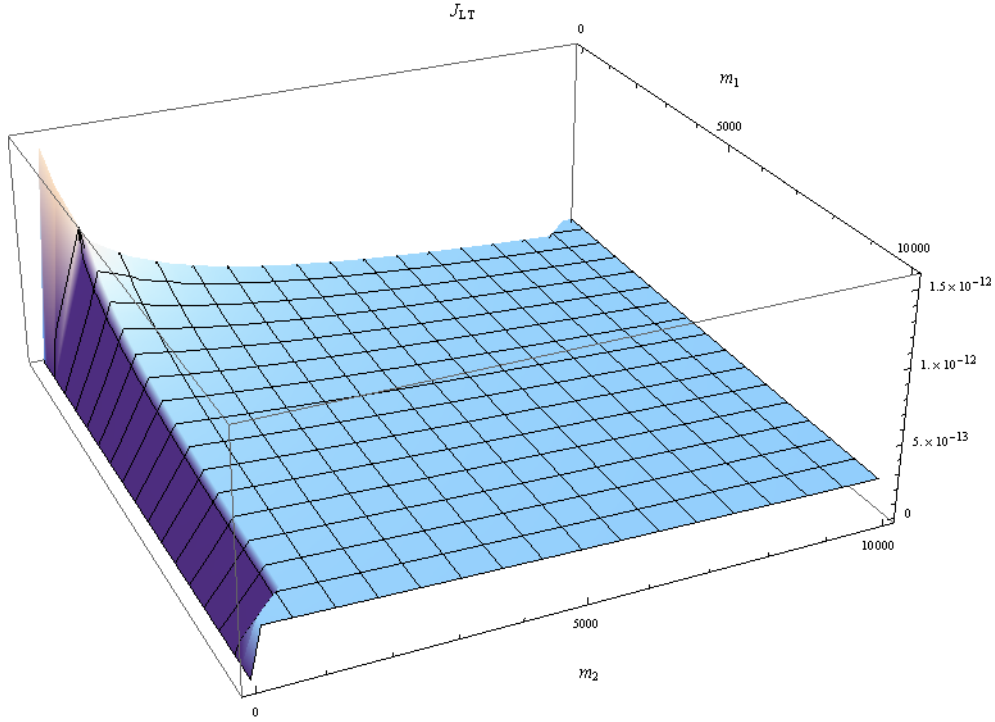


Figura 2.8: Corrente em função das massas m_1 e m_2 para $\zeta_L = \zeta_R = 1$, $\omega_0 = 0.01$, $k_B T_L = 1/1000$, $k_B T_R = 1/1050$, sendo $\hbar = 1$. Gráfico obtido por integração numérica (cf. Eq. (2.198)).

Das Eqs. (2.208) e (2.209), finalmente obtemos

$$\frac{J_{LT}^{\text{alt}}(\omega_0 \neq 0)}{J_{LT}^{\text{hom}}(\omega_0 \neq 0)} \cong \frac{1}{2} \left(\frac{\zeta^2 \omega_0^2}{\zeta^2 \omega_0^2 + 1} \right) < \frac{1}{2} . \quad (2.210)$$

Neste caso, o efeito é idêntico ao observado em cadeias clássicas com massas alternadas e com $\omega_0 \neq 0$ (cf. Eq. (2.194)). O gráfico da corrente em função das massas para este caso pode ser visto na Fig. 2.8.

Capítulo 3

Cadeia clássica fora do equilíbrio sujeita a um potencial *on-site* anarmônico

Neste capítulo, estudaremos um modelo clássico para o transporte de calor em uma cadeia de osciladores fora do equilíbrio térmico. Enquanto a interação entre os osciladores será puramente harmônica, cada partícula estará sujeita a um potencial *on-site* anarmônico, composto de um termo quadrático e um termo quártico. As extremidades da cadeia serão mantidas em contato com banhos térmicos reais a duas temperaturas distintas e os sítios internos serão conectados a reservatórios estocásticos (supostamente) representando o efeito residual de interações não lineares ausentes na hamiltoniana do sistema.

O capítulo será organizado como segue: primeiro, descreveremos o modelo; em seguida, apresentaremos um método aproximativo que tornará possível o cálculo de grandezas físicas relevantes; finalmente, o referido método será aplicado ao cálculo do fluxo de calor e do perfil auto-consistente de temperaturas. Mostraremos que um “efeito isolante” similar ao observado em cadeias harmônicas clássicas e quânticas com massas alternadas (Cap. 2) também ocorre em cadeias harmônicas e anarmônicas com massas alternadas e com reservatórios auto-consistentes ligados aos sítios internos.

3.1 Descrição do modelo

Nesta seção, descreveremos em detalhes a dinâmica do sistema, que consistirá de uma parte determinística (hamiltoniana) e de uma parte estocástica. Como já dissemos anteriormente, as extremidades da cadeia serão mantidas em contato com reservatórios térmicos reais a duas temperaturas distintas, enquanto os sítios internos serão conectados a reservatórios estocásticos que satisfazem a chamada condição de auto-consistência, garantindo-se que tais reservatórios, na média, não injetam nem absorvem energia dos sítios internos no estado estacionário. A introdução deste artifício na dinâmica de Langevin foi proposta em [10] sob a justificativa de se simularem interações anarmônicas ausentes na hamiltoniana do sistema. No caso harmônico, verificou-se que tal mecanismo é suficiente para destruir a coerência dos fônons que realizam o transporte da energia através da cadeia, levando ao equilíbrio local e à Lei de Fourier (v. Ref. [10] e, para um argumento rigoroso e válido no caso multidimensional, v. Ref. [11]).

A particularidade do modelo estudado neste capítulo será a presença de um potencial *on-site* anarmônico em cada sítio da cadeia, consistindo de um termo quadrático e um termo quártico. Enquanto a introdução de um termo quártico no potencial tornará o modelo mais realista, será inevitável introduzir ruídos estocásticos nos sítios internos da cadeia, por razões técnicas que ficarão claras na Seção 3.3. Por outro lado, a presença de reservatórios auto-consistentes não é determinante para que algumas propriedades do transporte de calor sejam observadas. Por exemplo, a cadeia harmônica clássica não-homogênea, mesmo com reservatórios nos sítios internos, não apresenta retificação [33], mas tal fenômeno pode ser observado em cadeias sujeitas a potenciais *on-site* anarmônicos, em que os reservatórios internos estão presentes [34].

Consideremos uma cadeia de osciladores regida pela hamiltoniana

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + U_j^{(1)}(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^{N+1} U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) \right]. \quad (3.1)$$

Para $j = 1, \dots, N$, as equações de movimento (dinâmica de Langevin) são obtidas acrescentando-se a cada equação de Hamilton $\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$ a força dissipativa ôhmica

$-\zeta_j p_j$ e a força aleatória $\gamma_j^{1/2} \eta_j(t)$, sendo $\eta_j(t) = \frac{dB_j}{dt}$ ($j = 1, \dots, N$) ruídos brancos independentes e gaussianos, i.e., variáveis estocásticas gaussianas satisfazendo as seguintes propriedades:

i) $\langle \eta_j(t) \rangle = 0$;

ii) $\langle \eta_j(s) \eta_l(t) \rangle = \delta(t - s) \delta_{jl}$.

Portanto, as equações dinâmicas para $j = 1, \dots, N$ se escrevem

$$dq_j = \frac{p_j}{m_j} dt \quad , \quad (3.2)$$

$$dp_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} dt - \zeta_j p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j \quad , \quad (3.3)$$

em que a intensidade do ruído em cada sítio está relacionada ao coeficiente de dissipação e à temperatura do sítio através da relação de Einstein

$$\gamma_j = 2\zeta_j m_j T_j \quad , \quad (3.4)$$

onde adotamos o valor $k_B = 1$ para a constante de Boltzmann. Esta condição é um tipo de relação flutuação-dissipação, necessária para que o equilíbrio seja atingido quando todas as temperaturas forem iguais.

Nas extremidades da cadeia, impomos condições de contorno de Dirichlet homogêneas, i.e.,

$$q_0 = q_{N+1} = 0 \quad ,$$

$$p_0 = p_{N+1} = 0 \quad .$$

Consideremos o caso em que o potencial *on-site* $U_j^{(1)}(q_j)$ é dado por

$$U_j^{(1)}(q_j) = \frac{1}{2} K_{jj} q_j^2 + \lambda_j \mathcal{P}(q_j) \quad , \quad (3.5)$$

sendo

$$\mathcal{P}(q_j) = \frac{q_j^4}{4} \quad . \quad (3.6)$$

Os potenciais de interação entre as partículas da cadeia, $U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l)$, são harmônicos,

i.e.,

$$U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) = \frac{1}{2}K_{jl}(q_j - q_l)^2 \quad , \quad (3.7)$$

onde K é uma matriz simétrica, cujos elementos são todos não-negativos.

Neste caso, a Eq. (3.1) se escreve

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2}K_{jj}q_j^2 + \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^{N+1} \frac{1}{4}K_{jl}(q_j - q_l)^2 \right] \quad . \quad (3.8)$$

e a Eq. (3.3), para $j = 1, \dots, N$, se escreve na forma

$$dp_j = - \left[K_{jj}q_j + \sum_l K_{jl}(q_j - q_l) + \lambda_j \mathcal{P}'(q_j) \right] dt - \zeta_j p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j \quad . \quad (3.9)$$

Considerando apenas interações entre vizinhos próximos, a matriz simétrica K se reduz a uma matriz tridiagonal e a Eq. (3.9) pode ser escrita na forma

$$dp_j = - [K_{jj}q_j + K_{j,j-1}(q_j - q_{j-1}) + K_{j,j+1}(q_j - q_{j+1}) + \lambda_j \mathcal{P}'(q_j)] dt - \zeta_j p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j \quad , \quad (3.10)$$

sendo $j = 1, \dots, N$ e com a convenção $q_0 = q_{N+1} = 0$ (i.e., condições de contorno de Dirichlet homogêneas).

Seja J uma matriz simétrica (de elementos J_{lj}) e M uma matriz diagonal (de elementos diagonais M_j), definidas de tal forma que

$$\sum_j \frac{1}{2}K_{jj}q_j^2 + \sum_{\substack{j,l \\ j \neq l}} \frac{1}{4}K_{jl}(q_j - q_l)^2 = \sum_j \frac{1}{2}M_j q_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,l} q_l J_{lj} q_j \quad .$$

Esta última equação mostra que $J + M$ é uma matriz positiva-definida. Seguem as seguintes relações entre a matriz K e as matrizes M e J :

$$K_{jl} = -J_{jl} \quad , \quad \text{se } j \neq l \quad , \quad (3.11)$$

$$K_{jj} = M_j + J_{jj} + \sum_{\substack{k \\ k \neq j}} J_{jk} \quad . \quad (3.12)$$

(observe-se que para $j \neq l$ temos $J_{jl} \leq 0$).

A hamiltoniana (3.8) pode ser expressa em termos das matrizes M e J como segue:

$$H(q, p) = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} M_j q_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{N+1} q_l J_{lj} q_j + \lambda_j \mathcal{P}(q_j) \right] . \quad (3.13)$$

Em termos das matrizes M e J , a Eq. (3.10) se escreve

$$dp_j = [-(M_j + J_{jj})q_j - J_{j,j-1}q_{j-1} - J_{j,j+1}q_{j+1} - \lambda_j \mathcal{P}'(q_j)] dt - \zeta_j p_j dt + \gamma_j^{1/2} dB_j , \quad (3.14)$$

sendo $j = 1, \dots, N$.

3.2 Fluxos de energia em uma cadeia clássica fora do equilíbrio

Nesta seção, será deduzida a expressão geral da conservação local da energia em uma cadeia clássica fora do equilíbrio.

Consideremos uma cadeia clássica descrita pela hamiltoniana (3.1) e com as equações de movimento (3.2) e (3.3). Podemos definir a energia local do j -ésimo sítio como

$$H_j(q, p) = \frac{p_j^2}{2m_j} + U_j^{(1)}(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l=1 \\ (l \neq j)}}^{N+1} U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) . \quad (3.15)$$

Note-se que $\sum_{j=1}^N H_j = H$.

A diferencial da Eq. (3.15) é dada pela Fórmula de Itô [26],

$$dH_j = \frac{\partial H_j}{\partial t} dt + \sum_k \frac{\partial H_j}{\partial \phi_k} d\phi_k + \sum_{k,m} \frac{\partial H_j}{\partial \phi_k \partial \phi_m} d\phi_k d\phi_m .$$

Como $\frac{\partial H_j}{\partial t} = 0$, temos

$$dH_j = \nabla U_j^{(1)}(q_j) dq_j + \frac{1}{2} \sum_{\substack{l \\ (l \neq j)}} \nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) (\delta_{kj} - \delta_{kl}) dq_k + \frac{p_j}{m_j} dp_j + \frac{1}{2} \sum_k \frac{\partial^2 H_j}{\partial p_k^2} dp_k dp_k .$$

Aplicando as regras do Cálculo de Itô, deduzimos da Eq. (3.3) que $dp_k dp_k = \gamma_j dt$, logo

$$dH_j = \nabla U_j^{(1)}(q_j) \frac{p_j}{m_j} dt + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} \nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) (dq_j - dq_l) + \frac{p_j}{m_j} dp_j + \frac{\gamma_j}{2m_j} dt \quad .$$

Usando a relação de Einstein (3.4) e as Eqs. (3.2) e (3.3), obtemos

$$dH_j = \frac{p_j}{m_j} \nabla U_j^{(1)}(q_j) dt + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} \nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) \left(\frac{p_j}{m_j} - \frac{p_l}{m_l} \right) dt - \\ - \frac{p_j}{m_j} \left[\nabla U_j^{(1)}(q_j) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} \nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) + \zeta_j p_j \right] dt + \frac{\gamma_j^{1/2}}{m_j} p_j dB_j + \zeta_j T_j dt \quad .$$

Escrevendo $dB_j = \eta_j(t) dt$, temos

$$\frac{dH_j}{dt} = \zeta_j \left(T_j - \frac{p_j^2}{m_j} \right) - \frac{1}{2} \sum_{l \neq j} \nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) \left(\frac{p_j}{m_j} + \frac{p_l}{m_l} \right) + \gamma_j^{1/2} \frac{p_j}{m_j} \eta_j(t) \quad . \quad (3.16)$$

A esperança desta última expressão é dada por

$$\left\langle \frac{dH_j}{dt} \right\rangle = \langle R_j(t) \rangle - \langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} - \mathcal{F}_{\rightarrow j} \rangle \quad , \quad (3.17)$$

em que

$$\langle R_j(t) \rangle = \zeta_j \left(T_j - \frac{\langle p_j^2 \rangle}{m_j} \right) \quad , \quad (3.18)$$

$$\langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l=2 \\ (l>j)}}^{N+1} \left\langle \left[\nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) \right] \left(\frac{p_j}{m_j} + \frac{p_l}{m_l} \right) \right\rangle \quad , \quad (3.19)$$

$$\langle \mathcal{F}_{\rightarrow j} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\substack{l=1 \\ (l<j)}}^{N-1} \left\langle \left[\nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) \right] \left(\frac{p_l}{m_l} + \frac{p_j}{m_j} \right) \right\rangle \quad . \quad (3.20)$$

A Eq. (3.18) representa o fluxo de calor entre o j -ésimo reservatório e o j -ésimo sítio da cadeia. As Eqs. (3.19) e (3.20) representam, respectivamente, o fluxo de calor

que sai do j -ésimo sítio pela direita e o fluxo que entra no mesmo pela esquerda. Note-se que os fluxos de calor entre os sítios da cadeia dependem apenas dos potenciais de interação entre as partículas.

Consideremos o caso em que a interação entre as partículas é puramente harmônica, i.e., o potencial é dado pela Eq. (3.7),

$$U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) = \frac{1}{2}K_{jl}(q_j - q_l)^2 \quad .$$

Neste caso, temos

$$\nabla U_{jl}^{(2)}(q_j - q_l) = K_{jl}(q_j - q_l) = -J_{jl}(q_j - q_l) \quad .$$

Caso haja interações apenas entre vizinhos próximos, as Eqs. (3.19) e (3.20) se escrevem

$$\langle \mathcal{F}_{j \rightarrow j+1} \rangle = -\frac{1}{2}J_{j,j+1} \left\langle (q_j - q_{j+1}) \left(\frac{p_j}{m_j} + \frac{p_{j+1}}{m_{j+1}} \right) \right\rangle \quad , \quad (3.21)$$

$$\langle \mathcal{F}_{j-1 \rightarrow j} \rangle = -\frac{1}{2}J_{j,j-1} \left\langle (q_{j-1} - q_j) \left(\frac{p_{j-1}}{m_{j-1}} + \frac{p_j}{m_j} \right) \right\rangle \quad , \quad (3.22)$$

isto é, a corrente de calor está associada às correlações posição-momento.

No estado estacionário de não-equilíbrio, a energia média de cada sítio é constante, logo

$$\left\langle \frac{dH_j}{dt} \right\rangle = 0 \quad .$$

Neste caso, a Eq. (3.17) se reduz a

$$\langle R_j(t) \rangle = \langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle - \langle \mathcal{F}_{\rightarrow j} \rangle \quad . \quad (3.23)$$

Para os reservatórios internos ($j = 2, \dots, N-1$), usaremos a chamada condição de auto-consistência [10] para garantir que, em média, não haja transferência de calor entre cada sítio interno da cadeia e respectivo reservatório no estado estacionário. Esta condição pode ser expressa como $\langle R_j(t) \rangle = 0$ e obtida a partir da escolha particular de temperaturas (Eq. (3.18))

$$T_j = \frac{\langle p_j^2 \rangle}{m_j} \quad , \quad (3.24)$$

de modo que

$$\langle \mathcal{F}_{j \rightarrow} \rangle = \langle \mathcal{F}_{\rightarrow j} \rangle \quad , \quad (3.25)$$

isto é, a energia apenas passa através do j -ésimo sítio, sem que haja qualquer retenção.

3.3 Um método aproximativo para o estudo do modelo anarmônico

Nesta seção, será apresentado um método aproximativo, proposto na Ref. [34], que possibilitará o cálculo da corrente de calor e do perfil de temperatura no modelo descrito na Seção 3.1.

Antes de prosseguirmos, será útil introduzirmos a notação mais compacta do vetor no espaço de fase $\varphi = (q, p)$, com $2N$ coordenadas. As equações dinâmicas (3.14), juntamente com as relações $dq_j = \frac{p_j}{m_j} dt$, podem ser escritas na forma matricial

$$\dot{\varphi} = -A\varphi - \Lambda \mathcal{P}'(\varphi) + \sigma \eta \quad , \quad (3.26)$$

onde $A = A^0 + \mathcal{J}$ e σ são matrizes $2N \times 2N$ dadas por

$$\begin{aligned} A^0 &= \begin{pmatrix} 0 & -m^{-1} \\ M & \Gamma \end{pmatrix} \quad , \quad \mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ J & 0 \end{pmatrix} \quad , \\ \Lambda &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\Gamma m T} \end{pmatrix} \quad , \end{aligned} \quad (3.27)$$

onde I é a matriz identidade $N \times N$; M é uma parte diagonal da matriz de interações Φ e J é uma matriz simétrica tridiagonal $N \times N$ igual à diferença entre a matriz de interações Φ e a matriz M (i.e., $\Phi = M + J$); Γ , m , T , λ são matrizes diagonais $N \times N$ cujos elementos diagonais são, respectivamente, ζ_j , m_j , T_j , λ_j ; o vetor η contém os ruídos brancos independentes e gaussianos; $\mathcal{P}'(\varphi)$ é uma matriz $2N \times 1$ com $\mathcal{P}'(\varphi)_j = 0$ para $j = 1, \dots, N$ e $\mathcal{P}'(\varphi)_i = d\mathcal{P}(\varphi_{i-N})/d\varphi_{i-N}$ para $i = N + 1, \dots, 2N$.

No que se segue, adotaremos a seguinte notação indicial: usaremos o índice i para valores no conjunto $\{N + 1, N + 2, \dots, 2N\}$, j para valores em $\{1, 2, \dots, N\}$ e k para valores em $\{1, 2, \dots, 2N\}$.

A fim de simplificar os cálculos, o sistema será mapeado em um sistema de massas

unitárias, i.e., $m_j = 1 \forall j$, através da mudança de variáveis e parâmetros (Ref. [34])

$$\begin{cases} \tilde{q}_j = m_j^{1/2} q_j \\ \tilde{p}_j = p_j m_j^{-1/2} \end{cases}, \quad \begin{cases} \tilde{J}_{jk} = m_j^{-1/2} J_{jk} m_k^{-1/2} \\ \tilde{\lambda}_j = \lambda_j / m_j^2 \\ \tilde{M}_j = M_j / m_j \end{cases}. \quad (3.28)$$

As equações dinâmicas para \tilde{q}_j , \tilde{p}_j são semelhantes às de q_j , p_j , porém com $m_j = 1 \forall j$ e com J_{jk} , λ_j e M_j substituídos por \tilde{J}_{jk} , $\tilde{\lambda}_j$ e \tilde{M}_j , respectivamente. Para simplificar a notação, escreveremos por exemplo q_j ao invés de \tilde{q}_j , mas posteriormente todas as variáveis e parâmetros serão reescalados, de modo a recuperarmos a dependência com relação às massas da corrente e do perfil de temperatura.

A fim de calcularmos a corrente de calor através da cadeia (Eqs. (3.21), (3.22) e (3.25)), precisaremos obter alguns elementos da matriz de covariância $\langle \varphi(t) \varphi^T(t) \rangle$ no limite de tempos longos $t \rightarrow \infty$, i.e., no estado estacionário de não equilíbrio. Descreveremos agora o método proposto na Ref. [34] para o cálculo da covariância. O método consistirá em aplicarmos o Teorema de Girsanov [26], também conhecido como fórmula de Cameron-Martin, para estabelecermos uma representação integral para a função de correlação de dois pontos.

Seja $\phi(t)$ o vetor no espaço de fase quando o potencial de interação entre as partículas da cadeia é desligado, i.e., quando $J = 0$, e seja $\varphi(t)$ o vetor que representa o processo completo, com $J \neq 0$. Usando o Teorema de Girsanov, podemos relacionar as distribuições de probabilidade $d\mu_\varphi$ e $d\mu_\phi$ associadas, respectivamente, às variáveis estocásticas $\varphi(t)$ e $\phi(t)$ como segue:

$$d\mu_\varphi = Z(\phi(t)) d\mu_\phi, \quad (3.29)$$

onde o fator $Z(\phi(t))$ é dado por

$$Z(\phi(t)) = \exp \left(\int_0^t u \cdot dB(s) - \frac{1}{2} \int_0^t u^2 ds \right), \quad (3.30)$$

sendo u um vetor cujas coordenadas satisfazem

$$\gamma_{i-N}^{1/2} u_i = - \sum_k \mathcal{J}_{ik} \phi_k = - \sum_j \mathcal{J}_{ij} \phi_j. \quad (3.31)$$

Nesta última equação fica claro que o teorema se aplica somente na presença de ruídos nos sítios internos da cadeia.

Temos

$$u \cdot dB = - \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1/2} \mathcal{J}_{ij} \phi_j dB_i \quad .$$

A equação de Langevin (3.26) pode ser escrita na forma

$$d\phi_i = - \sum_{k'} A_{ik'}^0 \phi_{k'} ds - \lambda_{i-N} \mathcal{P}'(\phi)_i ds + \gamma_{i-N}^{1/2} dB_i \quad . \quad (3.32)$$

Das duas últimas equações, segue que

$$u \cdot dB = - \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1/2} \mathcal{J}_{ij} \phi_j \left(d\phi_i + \sum_{k'} A_{ik'}^0 \phi_{k'} ds + \lambda_{i-N} \mathcal{P}'(\phi)_i ds \right) \quad . \quad (3.33)$$

Segue do cálculo de Itô e da Eq. (3.32) que

$$d(\gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_j) = \gamma_{i-N}^{-1} \mathcal{J}_{ij} (\phi_j d\phi_i + \phi_i d\phi_j) \quad .$$

Como $d\phi_j = \phi_{j+N} ds$, temos

$$d(\gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_j) = \gamma_{i-N}^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i + \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_{j+N} ds \quad .$$

Somando nos índices i, j em ambos os lados desta última equação, obtemos

$$- \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i = - \sum_{i,j} d(\gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_j) + \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_{j+N} ds \quad .$$

Substituindo o termo $-\sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \mathcal{J}_{ij} \phi_j d\phi_i$ da Eq. (3.33) por esta última expressão, obtemos

$$u \cdot dB = - \sum_{i,j} d(\gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_j) + \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i \mathcal{J}_{ij} \phi_{j+N} ds - \sum_{i,j,k} \phi_j \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} A_{ik}^0 \phi_k ds + \sum_{i,j} \phi_j \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} \lambda_{i-N} \mathcal{P}'(\phi)_i ds \quad . \quad (3.34)$$

Da Eq. (3.31), temos

$$u^2 = \sum_i u_i u_i = \sum_{i,j,j'} \phi_j \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} \mathcal{J}_{ij'}^T \phi_{j'} \quad . \quad (3.35)$$

Levando as expressões (3.34) e (3.35) na Eq. (3.30), finalmente obtemos

$$\begin{aligned} Z(\phi(t)) = & \exp \left(- \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i(t) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(t) + \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i(0) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(0) \right) \times \\ & \times \exp \left[\sum_{i,j} \int_0^t ds \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} \phi_{j+N}(s) - \sum_{i,j,k} \int_0^t ds \phi_j(s) \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} A_{ik}^0 \phi_k(s) - \right. \\ & \left. - \sum_{i,j} \int_0^t ds \phi_j(s) \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} \lambda_{i-N} \mathcal{P}'(\phi)_i(s) - \sum_{i,j,j'} \frac{1}{2} \int_0^t ds \phi_j(s) \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} \mathcal{J}_{ij'} \phi_{j'}(s) \right] \quad , \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde assumimos que a condição inicial $\phi(0)$ é fixa (i.e., determinística).

Da Eq. (3.29), obtemos uma representação integral funcional para a função de correlação de k pontos nos instantes $t_1, \dots, t_k \leq t$,

$$\langle \varphi_{r_1}(t_1) \dots \varphi_{r_k}(t_k) \rangle = \frac{\int \phi_{r_1}(t_1) \dots \phi_{r_k}(t_k) Z(\phi(t)) d\mu_\phi}{\int Z(\phi(t)) d\mu_\phi} \quad , \quad (3.37)$$

onde $Z(\phi(t))$ é dado pela Eq. (3.36) e $d\mu_\phi$ é a distribuição de probabilidade associada ao processo estocástico $\phi(t)$.

Como a variável $\phi(t)$ satisfaz uma equação diferencial estocástica não-linear (o termo quártico do potencial *on-site* gera um termo cúbico na equação diferencial), não será possível calcularmos as funções de correlação ou a distribuição no espaço de fase $d\mu_\phi(t)$ de tal variável, para qualquer instante de tempo. Entretanto, como o processo $\phi(t)$ envolve apenas partículas não interagentes, cada qual em contato com um reservatório térmico, sabemos que a sua distribuição $d\mu_*(\phi)$ para tempos longos (i.e., de equilíbrio) é a distribuição canônica de Boltzmann

$$d\mu_*(\phi) = \exp \left(- \sum_{j=1}^N H_j^{(J=0)} / T_j \right) \prod_{j=1}^N d\phi_j d\phi_{j+N} / \text{norm.} \quad , \quad (3.38)$$

com

$$H_j^{(J=0)} = \frac{1}{2}\phi_{j+N}^2 + \frac{1}{2}M_j\phi_j^2 + \lambda_j\mathcal{P}(\phi_j) \quad . \quad (3.39)$$

Como no caso $J = 0$ não há interação entre as partículas da cadeia, a distribuição conjunta do processo $\phi(t)$ em qualquer tempo é o produto das distribuições marginais de cada sítio $j = 1, \dots, N$. Para verificar que a distribuição de Boltzmann é de fato a distribuição estacionária (neste caso de equilíbrio) do processo $\phi(t)$, basta mostrar que a densidade de probabilidade marginal $e^{-H_j^{(J=0)}/T_j}/\text{norm.}$ é solução estacionária da equação de Fokker-Planck associada à dinâmica de Langevin do j -ésimo sítio.

Pelas Eqs. (3.21) e (3.22), o cálculo da corrente de calor envolverá expressões do tipo $\langle \varphi_u(t)\varphi_v(t) \rangle$, com $u > N$ e $v \leq N$.

Escrevendo o fator $Z(\phi(t))$ (Eq. (3.36)) na forma

$$Z(\phi(t)) = e^{-V(\phi(t))} = \exp \left\{ -[F(\phi(t)) - F(\phi(0))] - \int_0^t W(\phi(s)) ds \right\} \quad , \quad (3.40)$$

podemos expandí-lo ao considerarmos apenas interações fracas entre as partículas da cadeia:

$$Z(\phi(t)) = 1 - V(\phi(t)) + \mathcal{O}(\|J\|^2) = 1 - [F(\phi(t)) - F(\phi(0))] - \int_0^t W(\phi(s)) ds + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad , \quad (3.41)$$

sendo $\|J\| \equiv \max_{j,j'} \{J_{j,j'}\}$ e

$$F(\phi(t)) = \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i(t) \mathcal{J}_{ij} \phi_j(t) \quad , \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} W(\phi(s)) = & - \sum_{i,j} \gamma_{i-N}^{-1} \phi_i(s) \mathcal{J}_{ij} \phi_{j+N}(s) + \sum_{i,j,k} \phi_j(s) \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} A_{ik}^0 \phi_k(s) + \\ & + \sum_{i,j} \phi_j(s) \mathcal{J}_{ji}^T \gamma_{i-N}^{-1} \lambda_{i-N} \mathcal{P}'(\phi)_i(s) + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad . \end{aligned} \quad (3.43)$$

Levando a expansão (3.41) na Eq. (3.37), podemos obter uma expansão pertur-

bativa da covariância $\langle \varphi_u(t)\varphi_v(t) \rangle_\varphi$ em funções de correlação truncadas:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_u(t)\varphi_v(t) \rangle_\varphi &= \frac{\langle \phi_u(t)\phi_v(t)Z(\phi(t)) \rangle_\phi}{\langle Z(\phi(t)) \rangle_\phi} \\
&= \frac{\langle \phi_u(t)\phi_v(t) [1 - V(\phi(t))] + \mathcal{O}(\|J\|^2) \rangle_\phi}{1 - \langle V(\phi(t)) \rangle_\phi + \mathcal{O}(\|J\|^2)} \\
&= \langle \phi_u(t)\phi_v(t) [1 - V(\phi(t))] + \mathcal{O}(\|J\|^2) \rangle_\phi \langle 1 + V(\phi(t)) + \mathcal{O}(\|J\|^2) \rangle_\phi^{-1} \\
&= \langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle_\phi - \left[\langle \phi_u(t)\phi_v(t)V(\phi(t)) \rangle_\phi - \langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle_\phi \langle V(\phi(t)) \rangle_\phi \right] + \mathcal{O}(\|J\|^2) \\
&= \langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle_\phi - \langle \phi_u(t)\phi_v(t); V(\phi(t)) \rangle_\phi + \mathcal{O}(\|J\|^2) \\
&= \langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle_\phi - \langle \phi_u(t)\phi_v(t); F(\phi(t)) \rangle_\phi + \langle \phi_u(t)\phi_v(t); F(\phi(0)) \rangle_\phi - \\
&\quad - \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t); W(\phi(s)) \rangle_\phi ds + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad .
\end{aligned}$$

Nas expressões acima, introduzimos a notação

$$\langle X(\phi(t_1)); Y(\phi(t_2)) \rangle_\phi \equiv \langle X(\phi(t_1))Y(\phi(t_2)) \rangle_\phi - \langle X(\phi(t_1)) \rangle_\phi \langle Y(\phi(t_2)) \rangle_\phi \quad (3.44)$$

para a função de correlação truncada de duas funções quaisquer $X(\phi(t_1))$ e $Y(\phi(t_2))$.

No limite $t \rightarrow \infty$ (estado estacionário), temos $\langle \phi_u(t)\phi_v(t) \rangle_\phi \rightarrow 0$, pois a distribuição de Boltzmann (3.38) não correlaciona os vetores posição e momento, cujas médias são nulas no estado estacionário. Note-se também que $\langle \phi_u(t)\phi_v(t); F(\phi(0)) \rangle_\phi = 0$, pois a condição inicial $\phi(0)$ é fixa. Assim, temos

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_u(t)\varphi_v(t) \rangle_\varphi &= - \langle \phi_u(t)\phi_v(t); F(\phi(t)) \rangle_\phi - \int_0^t \langle \phi_u(t)\phi_v(t); W(\phi(s)) \rangle_\phi ds + \\
&\quad + (\text{termos que se anulam no limite } t \rightarrow \infty) + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad . \quad (3.45)
\end{aligned}$$

Para calcular as funções de correlação no lado direito desta última equação precisaríamos, a princípio, conhecer a distribuição de probabilidade do processo estocástico $\phi(t)$ em qualquer instante de tempo. No entanto, aplicaremos a aproximação proposta na Ref. [34] para separar a dependência temporal no cálculo das correlações.

Integrando a equação de Langevin (3.32) de um instante de tempo fixo s até um

instante t qualquer, obtemos

$$\phi_i(t) - \phi_i(s) = - \sum_k \int_s^t A_{ik}^0 \phi_k(\tau) d\tau - \int_s^t \lambda_{i-N} \mathcal{P}'(\phi(\tau))_i d\tau + \int_s^t \gamma_{i-N}^{1/2} dB_i(\tau) \quad .$$

A esperança com relação à distribuição do ruído desta última equação se escreve

$$\langle \phi_i(t) \rangle - \langle \phi_i(s) \rangle = - \sum_k \int_s^t A_{ik}^0 \langle \phi_k(\tau) \rangle d\tau - \int_s^t \lambda_{i-N} \langle \mathcal{P}'(\phi(\tau))_i \rangle d\tau \quad . \quad (3.46)$$

Ainda que a medida $d\mu_\phi$ seja desconhecida, sabemos que no limite assintótico $t \rightarrow \infty$ a diferença entre a densidade de probabilidade da transição $\phi(s) \rightarrow \phi(t)$ e a distribuição de Boltzmann (3.38) decai exponencialmente, i.e., proporcionalmente a $e^{-\alpha(t-s)}$ para algum $\alpha > 0$ (v. Ref. [27] para um argumento não-riguroso). Observando que no segundo termo do lado direito da Eq. (3.45) apenas os instantes de tempo s próximos de t contribuem significativamente para as médias, a proposta de [34] é substituir a distribuição $d\mu_\phi$ pela distribuição de equilíbrio $d\mu_*$. Entretanto, como esta última não contém nenhuma dependência temporal, ainda precisamos reescrever a Eq. (3.45) de tal forma que todas as variáveis ϕ no segundo termo do lado direito da equação se encontrem no mesmo instante de tempo. A solução aproximada proposta na Ref. [34] para esta incongruência é trocar o termo $\langle \mathcal{P}'(\phi(\tau))_i \rangle$ pelo produto $\langle \mathcal{P}'(\phi)_i / \phi_{i-N} \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_{i-N}(\tau) \rangle$ (em que $\langle \cdot \rangle_{\text{eq}}$ denota a esperança com relação a $d\mu_*$) na Eq. (3.46), que neste caso se reduz a

$$\langle \phi_i(t) \rangle - \langle \phi_i(s) \rangle \cong - \sum_k \int_s^t A_{ik}^0 \langle \phi_k(\tau) \rangle d\tau - \int_s^t \lambda_{i-N} \langle \mathcal{P}'(\phi)_i / \phi_{i-N} \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_{i-N}(\tau) \rangle d\tau \quad . \quad (3.47)$$

Seja \mathcal{A} a matriz definida por

$$\mathcal{A}_{k,k'} = A_{k,k'}^0 + \Lambda_{kk'} \langle \mathcal{P}'(\phi)_{k'} / \phi_{k''} \rangle_{\text{eq}} \quad , \quad (3.48)$$

onde $k'' = \max\{1, k' - N\}$ (para as definições das matrizes A^0 , Λ e $\mathcal{P}'(\phi)$, cf. Eq. (3.27)). Em outros termos, a matriz \mathcal{A} é obtida a partir da matriz A^0 substituindo-se a submatriz M (Eq. (3.27)) pela matriz \mathcal{M} cujos elementos diagonais são

$$\mathcal{M}_j = M_j + \lambda_j \langle \mathcal{P}'(\phi)_{j+N} / \phi_j \rangle_{\text{eq}} \quad (j = 1, \dots, N) \quad . \quad (3.49)$$

Em termos da matriz \mathcal{A} , a Eq. (3.47) pode ser escrita na forma

$$\langle \phi_i(t) \rangle - \langle \phi_i(s) \rangle \cong - \sum_k \int_s^t \mathcal{A}_{ik} \langle \phi_k(\tau) \rangle d\tau \quad , \text{ logo}$$

$$\frac{d \langle \phi_i(t) \rangle}{dt} \cong - \sum_k \mathcal{A}_{ik} \langle \phi_k(t) \rangle \quad , \text{ i.e. ,}$$

$$\frac{d \langle \phi(t) \rangle}{dt} \cong -\mathcal{A} \langle \phi(t) \rangle \quad .$$

A solução formal desta última equação, com a condição inicial $\langle \phi(s) \rangle$, é dada por

$$\langle \phi(t) \rangle \cong e^{-(t-s)\mathcal{A}} \langle \phi(s) \rangle \quad ,$$

que relaciona as médias do processo ϕ nos instantes s e t .

Se no segundo termo da Eq. (3.45) assumirmos que, de modo aproximado, $\phi(s)$ evolui para $\phi(t)$ da mesma forma que a média $\langle \phi(s) \rangle$ evolui para a média $\langle \phi(t) \rangle$, i.e., efetuando a troca

$$\phi(t) \rightarrow e^{-(t-s)\mathcal{A}} \phi(s) \quad , \quad (3.50)$$

separamos efetivamente a dependência temporal do cálculo das médias na Eq. (3.45), que passa a envolver apenas médias de equilíbrio:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_u(t) \varphi_v(t) \rangle \cong & - \langle \phi_u \phi_v ; F(\phi) \rangle_{\text{eq}} - \int_0^t \langle (e^{-(t-s)\mathcal{A}} \phi)_u (e^{-(t-s)\mathcal{A}} \phi)_v ; W(\phi) \rangle_{\text{eq}} ds + \\ & + (\text{termos que se anulam no limite } t \rightarrow \infty) + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad . \end{aligned}$$

Mudando a variável de integração para $\tau = t - s$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle \varphi_u(t) \varphi_v(t) \rangle \cong & - \langle \phi_u \phi_v ; F(\phi) \rangle_{\text{eq}} + \left\langle \int_0^t (e^{-\tau\mathcal{A}} \phi)_u (e^{-\tau\mathcal{A}} \phi)_v d\tau ; W(\phi) \right\rangle_{\text{eq}} + \\ & + (\text{termos que se anulam no limite } t \rightarrow \infty) + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad . \end{aligned}$$

No limite $t \rightarrow \infty$, obtemos uma expressão para a covariância do estado esta-

cionário de não equilíbrio,

$$\begin{aligned} \langle \varphi_u \varphi_v \rangle_{\text{est}} &\equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \varphi_u(t) \varphi_v(t) \rangle \\ &\cong - \langle \phi_u \phi_v; F(\phi) \rangle_{\text{eq}} + \left\langle \int_0^\infty (e^{-\tau \mathcal{A}} \phi)_u (e^{-\tau \mathcal{A}} \phi)_v d\tau; W(\phi) \right\rangle_{\text{eq}} + \mathcal{O}(\|J\|^2) . \end{aligned} \quad (3.51)$$

A exponencial da matriz $-\tau \mathcal{A}$ é dada pela Eq. (E.7),

$$\begin{aligned} e^{-\tau \mathcal{A}} &= \begin{pmatrix} e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}-\rho)} & 0 \\ 0 & e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}+\rho)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} + \frac{1}{2}I & \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{1}{2}\mathcal{M}\rho^{-1} & -\frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} + \frac{1}{2}I \end{pmatrix} - \\ &- \begin{pmatrix} e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}+\rho)} & 0 \\ 0 & e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}-\rho)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} - \frac{1}{2}I & \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{1}{2}\mathcal{M}\rho^{-1} & -\frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} - \frac{1}{2}I \end{pmatrix} , \end{aligned}$$

onde ρ é a matriz diagonal da Eq. (E.2),

$$\rho = \left[\left(\frac{\Gamma}{2} \right)^2 - \mathcal{M} \right] ,$$

com \mathcal{M} dado pela Eq. (3.49).

A ação da matriz $e^{-\tau \mathcal{A}}$ em um vetor qualquer ϕ do espaço de fase é dada por

$$\begin{aligned} (e^{-\tau \mathcal{A}} \phi)_u &= \left[\frac{1}{2} e^{-(\frac{\zeta_u}{2}-\rho_u)\tau} + \frac{1}{2} e^{-(\frac{\zeta_u}{2}+\rho_u)\tau} - \frac{\zeta_u}{4\rho_u} e^{-(\frac{\zeta_u}{2}-\rho_u)\tau} + \frac{\zeta_u}{4\rho_u} e^{-(\frac{\zeta_u}{2}+\rho_u)\tau} \right] \phi_u + \\ &+ \left[-\frac{\mathcal{M}_u}{2\rho_u} e^{-(\frac{\zeta_u}{2}-\rho_u)\tau} + \frac{\mathcal{M}_u}{2\rho_u} e^{-(\frac{\zeta_u}{2}+\rho_u)\tau} \right] \phi_{u-N} , \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} (e^{-\tau \mathcal{A}} \phi)_v &= \left[\frac{1}{2} e^{-(\frac{\zeta_v}{2}-\rho_v)\tau} + \frac{1}{2} e^{-(\frac{\zeta_v}{2}+\rho_v)\tau} + \frac{\zeta_v}{4\rho_v} e^{-(\frac{\zeta_v}{2}-\rho_v)\tau} - \frac{\zeta_v}{4\rho_v} e^{-(\frac{\zeta_v}{2}+\rho_v)\tau} \right] \phi_v + \\ &+ \left[\frac{1}{2\rho_v} e^{-(\frac{\zeta_v}{2}-\rho_v)\tau} - \frac{1}{2\rho_v} e^{-(\frac{\zeta_v}{2}+\rho_v)\tau} \right] \phi_{v+N} , \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde $\zeta_u \equiv \zeta_{u-N}$, $\rho_u \equiv \rho_{u-N}$ e $\mathcal{M}_u \equiv \mathcal{M}_{u-N}$.

Substituindo as expressões (3.42), (3.43), (3.52) e (3.53) na Eq. (3.51), podemos obter uma expressão para a covariância do estado estacionário de não equilíbrio. Primeiramente, analisaremos o caso harmônico $\lambda = 0$.

Para $\lambda = 0$, a distribuição de equilíbrio (3.38) se reduz a uma distribuição gaus-

siana. Neste caso, vale a conhecida propriedade

$$\langle \phi_{k_1} \phi_{k_2} ; \phi_{k_3} \phi_{k_4} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} = \langle \phi_{k_1} \phi_{k_3} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} \langle \phi_{k_2} \phi_{k_4} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} + \langle \phi_{k_1} \phi_{k_4} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} \langle \phi_{k_2} \phi_{k_3} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} . \quad (3.54)$$

A forma geral de uma distribuição gaussiana multivariada de média nula é dada por

$$d\mu_*(\phi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\phi^T C^{-1}\phi\right) \prod_{j=1}^N d\phi_j d\phi_{j+N} / \text{norm.} , \quad (3.55)$$

onde $C = \langle \phi \phi^T \rangle_{\text{eq}}$ é a matriz de covariância.

Comparando as Eqs. (3.55) e (3.38), obtemos imediatamente a covariância de equilíbrio no caso harmônico:

$$\begin{aligned} C_{jj'} &= \langle \phi_j \phi_{j'} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} = \frac{T_j}{M_j} \delta_{jj'} , \\ C_{ii'} &= \langle \phi_i \phi_{i'} \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} = T_i \delta_{ii'} , \\ C_{ji} &= \langle \phi_j \phi_i \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} = 0 , \\ C_{ij} &= \langle \phi_i \phi_j \rangle_{\text{eq}}^{\lambda=0} = 0 , \end{aligned} \quad (3.56)$$

onde lembramos que $j, j' \in \{1, \dots, N\}$ e $i, i' \in \{N+1, \dots, 2N\}$.

Usando as Eqs. (3.54) e (3.56), é possível calcular a covariância do estado estacionário de não equilíbrio no caso harmônico $\lambda = 0$. Reescalando as variáveis φ e os parâmetros M e J para recuperar a dependência com as massas (Eq. (3.28)), encontramos

$$\langle \varphi_u \varphi_v \rangle_{\text{est}}^{\lambda=0} = \frac{\mathcal{J}_{uv} (\zeta_u + \zeta_v) m_v^{-1}}{(m_u^{-1} M_u - m_v^{-1} M_v)^2 + (m_u^{-1} M_u \zeta_v + m_v^{-1} M_v \zeta_u) (\zeta_u + \zeta_v)} (T_u - T_v) + \mathcal{O}(\|J\|^2) . \quad (3.57)$$

Esta última expressão é idêntica ao resultado obtido na Ref. [31] através de cálculos perturbativos sem qualquer aproximação (a não ser o próprio fato de se descartarem termos $\mathcal{O}(\|J\|^2)$). Desta forma, no caso harmônico $\lambda = 0$, o esquema aproximativo proposto na Ref. [34] para o cálculo da covariância elimina apenas termos que desaparecem no limite $t \rightarrow \infty$.

Usando as Eqs. (3.21), (3.22), (3.25) e (3.57) e considerando $J_{j,j+1} = J$, $\zeta_j = \zeta$

$\forall j \in \{1, \dots, N\}$, obtemos a Lei de Fourier (Ref. [31])

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow N}^{\lambda=0} = \kappa \frac{T_1 - T_N}{N - 1} + \mathcal{O}(J^2) \quad , \quad (3.58)$$

sendo a condutividade térmica κ dada pela média harmônica

$$\kappa = (N - 1) \left(\frac{1}{\kappa_1} + \dots + \frac{1}{\kappa_N} \right)^{-1} \quad , \quad (3.59)$$

com

$$\kappa_j = \frac{2\zeta J^2 m_j^{-1} m_{j+1}^{-1}}{\left(\frac{M_j}{m_j} - \frac{M_{j+1}}{m_{j+1}} \right)^2 + 2\zeta^2 \left(\frac{M_j}{m_j} + \frac{M_{j+1}}{m_{j+1}} \right)} \quad . \quad (3.60)$$

Consideremos agora uma cadeia harmônica com massas e potenciais *on-site* alternados, i.e., $M_j = M_1$, $m_j = m_1$, para j ímpar e $M_j = M_2$, $m_j = m_2$, para j par. Neste caso, a condutividade é dada por (Ref. [31])

$$\kappa = \frac{2\zeta J^2 m_1^{-1} m_2^{-1}}{\left(\frac{M_1}{m_1} - \frac{M_2}{m_2} \right)^2 + 2\zeta^2 \left(\frac{M_1}{m_1} + \frac{M_2}{m_2} \right)} \quad . \quad (3.61)$$

Para uma cadeia homogênea ($m_1 = m_2 \equiv m$, $M_1 = M_2 \equiv M$), obtemos $\kappa = \frac{J^2}{2\zeta M m}$. Para $M_1 = M_2 = M$ e $m_1 = \epsilon \ll 1$, $m_2 = 1/\epsilon$, obtemos

$$\kappa = \frac{2\zeta J^2}{(1/\epsilon - \epsilon)^2 M^2 + 2\zeta^2 M (1/\epsilon + \epsilon)} \approx \frac{2\zeta J^2}{M^2} \epsilon^2 \quad . \quad (3.62)$$

Portanto, o efeito isolante que observamos em cadeias harmônicas com massas alternadas e ligadas a banhos térmicos apenas nas extremidades também ocorre em cadeias harmônicas com sítios internos ligados a reservatórios auto-consistentes. Pela Eq. (3.61), o mesmo efeito pode ser obtido alternando-se potenciais *on-site* de intensidades altas e baixas.

3.4 Análise de cadeias anarmônicas

Consideremos agora o caso $\lambda \neq 0$. Substituindo as expressões (3.42), (3.43), (3.52) e (3.53) na Eq. (3.51) e calculando as integrais em τ , obtemos a seguinte expressão

para a covariância do estado estacionário de não equilíbrio:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_u \varphi_v \rangle_{\text{est}} &\cong -\frac{\mathcal{J}_{uv}}{2\zeta_u T_u} \langle \phi_u^2 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}} + \frac{\mathcal{M}_v - \mathcal{M}_u}{D_{uv}} (\gamma_u^{-1} + \gamma_v^{-1}) \mathcal{J}_{uv} \langle \phi_u^2 \phi_{v+N}^2 \rangle_{\text{eq}} + \\
&+ \frac{(\zeta_u + \zeta_v) \mathcal{J}_{uv}}{D_{uv}} \left[\frac{\mathcal{M}_u \zeta_v}{\gamma_v} \langle \phi_{u-N}^2 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_{v+N}^2 \rangle_{\text{eq}} - \frac{\mathcal{M}_v \zeta_u}{\gamma_u} \langle \phi_u^2 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}} \right] + \\
&+ \frac{\mathcal{M}_u}{D_{uv}} \mathcal{J}_{uv} [(\mathcal{M}_u - \mathcal{M}_v) + \zeta_v (\zeta_u + \zeta_v)] \left\{ \left(\frac{\mathcal{M}_u}{\gamma_u} + \frac{\mathcal{M}_v}{\gamma_v} \right) \langle \phi_{u-N}^2 \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}} + \right. \\
&\left. + \frac{\lambda_u}{\gamma_u} \langle \phi_{u-N}^4 \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}} + \frac{\lambda_v}{\gamma_v} \langle \phi_{u-N}^2 \phi_v^4 \rangle_{\text{eq}} \right\} + \mathcal{O}(\|J\|^2) \quad , \quad (3.63)
\end{aligned}$$

onde

$$D_{uv} = (\mathcal{M}_u - \mathcal{M}_v)^2 + (\mathcal{M}_u \zeta_v + \mathcal{M}_v \zeta_u) (\zeta_u + \zeta_v) \quad . \quad (3.64)$$

No cálculo da expressão (3.63), usamos o fato de que na distribuição de equilíbrio (3.38) todas as componentes ϕ_1, \dots, ϕ_{2N} são estatisticamente independentes.

Supondo $J_{jj} = 0$, temos $\langle \varphi_{j+N} \varphi_j \rangle_{\text{est}} = \langle \varphi_{j+1+N} \varphi_{j+1} \rangle_{\text{est}} = 0$. Pela Eq. (3.21), o fluxo de calor neste caso é dado por $\mathcal{F}_{j \rightarrow j+1} = \frac{1}{2} J_{j,j+1} (\langle p_j q_{j+1} \rangle_{\text{est}} - \langle q_j p_{j+1} \rangle_{\text{est}})$, i.e., por

$$\mathcal{F}_{u-N \rightarrow v} = \frac{1}{2} \mathcal{J}_{uv} (\langle \varphi_u \varphi_v \rangle_{\text{est}} - \langle \varphi_{u-N} \varphi_{v+N} \rangle_{\text{est}}) \quad , \quad (3.65)$$

com $u - N = j$ e $v = j + 1$. Como nesta expressão $u - N \neq v$ e como ϕ_1, \dots, ϕ_{2N} são estatisticamente independentes, na Eq. (3.63) temos $\langle \phi_u^2 \phi_{v+N}^2 \rangle_{\text{eq}} = \langle \phi_u^2 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_{v+N}^2 \rangle_{\text{eq}}$, $\langle \phi_{u-N}^2 \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}} = \langle \phi_{u-N}^2 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}}$, $\langle \phi_{u-N}^4 \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}} = \langle \phi_{u-N}^4 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_v^2 \rangle_{\text{eq}}$ e $\langle \phi_{u-N}^2 \phi_v^4 \rangle_{\text{eq}} = \langle \phi_{u-N}^2 \rangle_{\text{eq}} \langle \phi_v^4 \rangle_{\text{eq}}$.

A escolha de temperaturas (3.24), que satisfaz a condição de auto-consistência, nos fornece $\langle \phi_i^2 \rangle_{\text{eq}} = T_i$ para qualquer $i > N$ (lembramos que T_i denota T_{i-N}). No entanto, ainda precisamos calcular as médias $\langle \phi_j^2 \rangle_{\text{eq}}$ e $\langle \phi_j^4 \rangle_{\text{eq}}$. Como agora $\lambda \neq 0$, a distribuição de equilíbrio (3.38) não é gaussiana.

Sejam

$$\begin{aligned}
\alpha_j &\equiv \frac{M_j}{2T_j} \quad , \\
\beta_j &\equiv \frac{\lambda_j}{4T_j} \quad , \\
\xi_j &\equiv \alpha_j \beta_j^{-1/2} \quad .
\end{aligned} \quad (3.66)$$

Precisamos calcular

$$\langle \phi_j^{2k} \rangle_{\text{eq}} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^{2k} e^{-\alpha_j x^2 - \beta_j x^4} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha_j x^2 - \beta_j x^4} dx}$$

para $k = 1, 2$.

Usando a mudança de variável $u \equiv \beta_j^{1/4} x$, obtemos

$$\langle \phi_j^{2k} \rangle_{\text{eq}} = \beta_j^{-k/2} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u^{2k} e^{-\xi_j u^2 - u^4} du}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi_j u^2 - u^4} du}, \quad (3.67)$$

onde ξ_j é dado pela Eq. (3.66).

Vamos introduzir a notação

$$\langle f(u) \rangle_4 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(u) e^{-u^4} du \quad (3.68)$$

para uma função qualquer tal que $\int_{-\infty}^{\infty} |f(u)| e^{-u^4} du < \infty$.

Então podemos escrever

$$\langle \phi_j^{2k} \rangle_{\text{eq}} = \beta_j^{-k/2} \frac{\langle u^{2k} e^{-\xi_j u^2} \rangle_4}{\langle e^{-\xi_j u^2} \rangle_4}. \quad (3.69)$$

Expandindo a função exponencial em potências de ξ_j no numerador e no denominador, obtemos*

$$\langle \phi_j^{2k} \rangle_{\text{eq}} = \beta_j^{-k/2} \frac{\langle u^{2k} \rangle_4 - \langle u^{2k+2} \rangle_4 \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2)}{\langle 1 \rangle_4 - \langle u^2 \rangle_4 \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2)}.$$

Introduzindo a notação

$$\langle\langle f(u) \rangle\rangle_4 \equiv \frac{\langle f(u) \rangle_4}{\langle 1 \rangle_4}, \quad (3.70)$$

escrevemos

$$\langle \phi_j^{2k} \rangle_{\text{eq}} = \beta_j^{-k/2} \frac{\langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4 - \langle\langle u^{2k+2} \rangle\rangle_4 \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2)}{1 - \langle\langle u^2 \rangle\rangle_4 \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2)}.$$

*Usando o teste da razão e a aproximação de Stirling para a função gama, pode-se demonstrar que os raios de convergência de ambas as séries de potências (numerador e denominador) são infinitos.

Para $\xi_j \ll 1$, podemos expandir o fator $[1 - \langle\langle u^2 \rangle\rangle_4 \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2)]^{-1}$ em série geométrica. Assim, obtemos

$$\langle\phi_j^{2k}\rangle_{\text{eq}} = \beta_j^{-k/2} \{ \langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4 - [\langle\langle u^{2k+2} \rangle\rangle_4 - \langle\langle u^2 \rangle\rangle_4 \langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4] \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2) \} . \quad (3.71)$$

Resta-nos calcular $\langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4$. Temos

$$\langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} u^{2k} e^{-u^4} du}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^4} du} = \frac{\int_0^{\infty} u^{2k} e^{-u^4} du}{\int_0^{\infty} e^{-u^4} du} .$$

Usando a mudança de variável $t \equiv u^4$, obtemos

$$\langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4 = \frac{\int_0^{\infty} t^{(2k-3)/4} e^{-t} dt}{\int_0^{\infty} t^{-3/4} e^{-t} dt} .$$

Lembrando da definição da função gama,

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt , \quad (3.72)$$

podemos escrever

$$\langle\langle u^{2k} \rangle\rangle_4 = \frac{\Gamma\left(\frac{2k+1}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} . \quad (3.73)$$

Usando este resultado na Eq. (3.71), obtemos para $\xi_j \ll 1$

$$\langle\phi_j^{2k}\rangle_{\text{eq}} = \beta_j^{-k/2} \left\{ \frac{\Gamma\left(\frac{2k+1}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} - \left[\frac{\Gamma\left(\frac{2k+3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} - \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \frac{\Gamma\left(\frac{2k+1}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \right] \xi_j + \mathcal{O}(\xi_j^2) \right\} . \quad (3.74)$$

Das Eqs. (3.66), temos $\xi_j = \frac{M_j}{\lambda_j^{1/2} T_j^{1/2}}$, logo $\xi_j \ll 1 \Leftrightarrow M_j \ll \lambda_j^{1/2} T_j^{1/2}$. Todos os cálculos a seguir serão válidos apenas neste regime.

Das Eqs. (3.66) e (3.74), deduzimos

$$\begin{aligned}\langle \phi_j^2 \rangle_{\text{eq}} &= \beta_j^{-1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} + \mathcal{O}(\xi_j) \\ &= 2 \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} \frac{T_j^{1/2}}{\lambda_j^{1/2}} + \mathcal{O}\left(\frac{M_j}{\lambda_j^{1/2} T_j^{1/2}}\right) \quad ,\end{aligned}\tag{3.75}$$

$$\begin{aligned}\langle \phi_j^4 \rangle_{\text{eq}} &= \beta_j^{-1} \frac{\Gamma\left(\frac{5}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} + \mathcal{O}(\xi_j) \\ &= \frac{T_j}{\lambda_j} + \mathcal{O}\left(\frac{M_j}{\lambda_j^{1/2} T_j^{1/2}}\right) \quad .\end{aligned}\tag{3.76}$$

Das Eqs. (3.49) e (3.75), segue que

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_j &= M_j + \lambda_j \langle \phi_j^2 \rangle_{\text{eq}} \\ &= 2\lambda_j^{1/2} T_j^{1/2} \frac{\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)} + \mathcal{O}\left(\frac{M_j}{\lambda_j^{1/2} T_j^{1/2}}\right) \quad .\end{aligned}\tag{3.77}$$

Substituindo as expressões (3.75), (3.76) e (3.77) na Eq. (3.63) e usando a fórmula (3.65) para calcular o fluxo de calor, chegamos numa expressão que não é identicamente nula para $T_1 = T_2 = \dots = T_N$, um erro inerente ao esquema aproximativo no qual os cálculos foram baseados. A proposta de [34] para corrigir este erro é introduzir um coeficiente para cada média de equilíbrio $\langle \phi_j^2 \rangle_{\text{eq}}$ e $\langle \phi_j^4 \rangle_{\text{eq}}$ e ajustar cada coeficiente de tal maneira a anular a corrente no equilíbrio térmico, i.e., no caso limite $T_1 = T_2 = \dots = T_N$. Procedendo aos cálculos, a única solução encontrada consiste em trocar o fator $\Gamma\left(\frac{3}{4}\right)/\Gamma\left(\frac{1}{4}\right) \approx 0,338$ por $1/2$ no valor médio $\langle \phi_j^2 \rangle_{\text{eq}}$, mas sem alterar o valor médio $\langle \phi_j^4 \rangle_{\text{eq}}$.

Substituindo as expressões das médias $\langle \phi_j^4 \rangle_{\text{eq}}$ e $\langle \phi_j^2 \rangle_{\text{eq}}$ (esta última ligeiramente modificada) na Eq. (3.63) e utilizando a Eq. (3.65), é possível calcular a expressão local do fluxo. Reescalando as variáveis φ e os parâmetros J e λ para recuperar a dependência com as massas (Eq. (3.28)), finalmente encontramos

$$\mathcal{F}_{j \rightarrow j+1} \cong \frac{(\zeta_j + \zeta_{j+1})(J_{j,j+1})^2}{m_j m_{j+1} D_{j,j+1}} (T_j - T_{j+1}) + \mathcal{O}(\|J\|^3) \quad ,\tag{3.78}$$

onde

$$D_{j,j+1} = \left(\frac{\lambda_j^{1/2}}{m_j} T_j^{1/2} - \frac{\lambda_{j+1}^{1/2}}{m_{j+1}} T_{j+1}^{1/2} \right)^2 + (\zeta_j + \zeta_{j+1}) \left(\zeta_{j+1} \frac{\lambda_j^{1/2}}{m_j} T_j^{1/2} + \zeta_j \frac{\lambda_{j+1}^{1/2}}{m_{j+1}} T_{j+1}^{1/2} \right) . \quad (3.79)$$

Para $J_{j,j+1} = J$, $\zeta_j = \zeta \quad \forall \quad j \in \{1, \dots, N\}$, temos

$$\mathcal{F}_{j \rightarrow j+1} \cong \frac{2\zeta J^2}{m_j m_{j+1} D_{j,j+1}} (T_j - T_{j+1}) + \mathcal{O}(J^3) , \quad (3.80)$$

$$D_{j,j+1} = \left(\frac{\lambda_j^{1/2}}{m_j} T_j^{1/2} - \frac{\lambda_{j+1}^{1/2}}{m_{j+1}} T_{j+1}^{1/2} \right)^2 + 2\zeta^2 \left(\frac{\lambda_j^{1/2}}{m_j} T_j^{1/2} + \frac{\lambda_{j+1}^{1/2}}{m_{j+1}} T_{j+1}^{1/2} \right) . \quad (3.81)$$

Da condição de auto-consistência (3.25), temos

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow 2} = \mathcal{F}_{2 \rightarrow 3} = \dots = \mathcal{F}_{N-1 \rightarrow N} \equiv \mathcal{F}_{1 \rightarrow N} ,$$

logo (para $j = 1, \dots, N-1$)

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow N} \cong \kappa_j (T_j - T_{j+1}) + \mathcal{O}(J^3) , \quad (3.82)$$

com

$$\kappa_j = \frac{2\zeta J^2}{m_j m_{j+1} D_{j,j+1}} . \quad (3.83)$$

Das Eqs. (3.82), segue que

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow N} \cong \left(\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \kappa_j^{-1} \right)^{-1} \frac{T_1 - T_N}{N-1} + \mathcal{O}(J^3) , \quad (3.84)$$

i.e., o sistema obedece a Lei de Fourier, com a condutividade térmica κ dada pela média harmônica das condutividades locais κ_j :

$$\kappa = \left(\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} \kappa_j^{-1} \right)^{-1} . \quad (3.85)$$

Considerando pequenos gradientes de temperatura e escrevendo

$$\begin{aligned} T_1 &= T + a_1 \delta \quad , \\ T_N &= T + a_N \delta \quad , \end{aligned} \quad (3.86)$$

segue que

$$T_j = T + a_j \delta + \mathcal{O}(\delta^2) \quad , \quad (3.87)$$

onde os coeficientes a_j podem ser determinados das Eqs. (3.82). Desta última equação, obtemos

$$T_j^{1/2} = T^{1/2} + a_j \frac{\delta}{2T^{1/2}} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad .$$

Neste regime, a expressão (3.81) se escreve

$$D_{j,j+1} = \left(\frac{\lambda_j^{1/2}}{m_j} - \frac{\lambda_{j+1}^{1/2}}{m_{j+1}} \right)^2 T + 2\zeta^2 T^{1/2} \left(\frac{\lambda_j^{1/2}}{m_j} + \frac{\lambda_{j+1}^{1/2}}{m_{j+1}} \right) + \mathcal{O}(\delta) = D_{j,j+1}|_{\delta=0} + \mathcal{O}(\delta) \quad . \quad (3.88)$$

Usando as Eqs. (3.82), (3.83) e (3.88), encontramos para $j = 1, \dots, N-1$

$$\frac{\mathcal{F}_{1 \rightarrow N}}{2\zeta J^2} \cong \frac{(T_j - T_{j+1})}{m_j m_{j+1} D_{j,j+1}} = \frac{(a_j - a_{j+1}) \delta}{m_j m_{j+1} D_{j,j+1}|_{\delta=0}} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad ,$$

logo

$$(a_l - a_1) \delta \cong -\frac{\mathcal{F}_{1 \rightarrow N}}{2\zeta J^2} \sum_{j=1}^{l-1} m_j m_{j+1} D_{j,j+1}|_{\delta=0} \quad .$$

Em particular, para $l = N$ obtemos

$$(a_N - a_1) \delta \cong -\frac{\mathcal{F}_{1 \rightarrow N}}{2\zeta J^2} \sum_{j=1}^{N-1} m_j m_{j+1} D_{j,j+1}|_{\delta=0} \quad . \quad (3.89)$$

Das duas últimas equações e das Eqs. (3.86) e (3.87), obtemos o perfil de temperatura para $l = 1, \dots, N-1$:

$$T_l = T_1 - (T_1 - T_N) \frac{\sum_{j=1}^{l-1} m_j m_{j+1} D_{j,j+1}|_{\delta=0}}{\sum_{j=1}^{N-1} m_j m_{j+1} D_{j,j+1}|_{\delta=0}} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad . \quad (3.90)$$

Das Eqs. (3.86) e (3.89), obtemos

$$\mathcal{F}_{1 \rightarrow N} \cong 2\zeta J^2 \left[\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} m_j m_{j+1} D_{j,j+1} |_{\delta=0} \right]^{-1} \frac{T_1 - T_N}{N-1} , \quad (3.91)$$

i.e., a Lei de Fourier, com a condutividade térmica dada por

$$\kappa = 2\zeta J^2 \left[\frac{1}{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} m_j m_{j+1} D_{j,j+1} |_{\delta=0} \right]^{-1} + \mathcal{O}(\delta) . \quad (3.92)$$

Para uma cadeia com massas e potenciais *on-site* alternados, i.e., $\lambda_j = \lambda_1$, $m_j = m_1$, para j ímpar e $\lambda_j = \lambda_2$, $m_j = m_2$, para j par, temos para $j = 1, \dots, N-1$

$$m_j m_{j+1} D_{j,j+1} |_{\delta=0} = m_1 m_2 D_{1,2} |_{\delta=0} = m_1 m_2 \left[\left(\frac{\lambda_1^{1/2}}{m_1} - \frac{\lambda_2^{1/2}}{m_2} \right)^2 T + 2\zeta^2 T^{1/2} \left(\frac{\lambda_1^{1/2}}{m_1} + \frac{\lambda_2^{1/2}}{m_2} \right) \right] .$$

Neste caso, o perfil de temperatura (Eq. (3.90)) é linear se desprezarmos correções de segunda ordem na diferença de temperatura $T_1 - T_N$:

$$T_l = T_1 - (T_1 - T_N) \frac{l-1}{N-1} + \mathcal{O}(\delta^2) . \quad (3.93)$$

A condutividade (Eq. (3.92)) é dada por (Ref. [29])

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{2\zeta J^2}{m_1 m_2 D_{1,2} |_{\delta=0}} + \mathcal{O}(\delta) , \text{ i.e.,} \\ \kappa &= \frac{2\zeta J^2 m_1^{-1} m_2^{-1}}{\left(\frac{\lambda_1^{1/2}}{m_1} - \frac{\lambda_2^{1/2}}{m_2} \right)^2 T + 2\zeta^2 T^{1/2} \left(\frac{\lambda_1^{1/2}}{m_1} + \frac{\lambda_2^{1/2}}{m_2} \right)} + \mathcal{O}(\delta) . \end{aligned} \quad (3.94)$$

Esta última equação é idêntica à Eq. (3.61), apenas trocando-se M_j por $\lambda_j^{1/2} T^{1/2}$ para $j = 1, 2$.

Para uma cadeia homogênea ($m_1 = m_2 \equiv m$, $\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$), obtemos

$\kappa = \frac{J^2}{2\zeta\lambda^{1/2}T^{1/2}m}$. Para $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ e $m_1 = \epsilon \ll 1$, $m_2 = 1/\epsilon$, obtemos

$$\kappa = \frac{2\zeta J^2}{(1/\epsilon - \epsilon)^2 \lambda T + 2\zeta^2 \lambda^{1/2} T^{1/2} (1/\epsilon + \epsilon)} \approx \frac{2\zeta J^2}{\lambda T} \epsilon^2 . \quad (3.95)$$

Portanto, o efeito isolante observado em cadeias harmônicas clássicas e quânticas também ocorre no modelo anarmônico em questão. Ao que tudo indica, o efeito parece ser relativamente geral, dada a sua existência em modelos bastante distintos.

Capítulo 4

Conclusão

Nesta dissertação, estudamos as propriedades do transporte de calor em cristais harmônicos e anarmônicos unidimensionais com massas alternadas, cujas extremidades se ligavam a reservatórios térmicos a duas diferentes temperaturas. No Cap. 2, estudamos rigorosamente aspectos gerais do transporte de calor em redes quânticas multidimensionais com hamiltonianos quadráticos e aplicamos as técnicas desenvolvidas nas Refs. [20, 23] ao caso específico de uma cadeia harmônica com massas alternadas. Os reservatórios foram modelados como sistemas de partículas que interagem com o sistema de interesse. No limite clássico de altas temperaturas, calculamos a expressão exata da corrente de calor na cadeia com massas alternadas, estendendo resultados da literatura. Mostramos que tanto a versão quântica como a versão clássica do modelo apresentam um efeito isolante quando se alternam massas ora muito grandes, ora muito pequenas ao longo da cadeia: a corrente de calor neste caso é consideravelmente menor que a corrente numa cadeia homogênea com massas arbitrariamente grandes. Na versão clássica do modelo e na ausência do potencial *on-site*, tal efeito já era conhecido na literatura [28, 36].

No Cap.3, estudamos analiticamente o transporte de calor em uma cadeia clássica sujeita a um potencial *on-site* anarmônico, com reservatórios auto-consistentes ligados aos sítios internos da cadeia. Desta vez, os reservatórios foram modelados através de ruídos brancos gaussianos e independentes. Apresentamos um método aproximativo, desenvolvido na Ref. [34], para reduzir o cálculo das funções de correlações no estado estacionário de não-equilíbrio ao cálculo de correlações de equilíbrio. Mostramos que a técnica fornece o resultado exato quando removemos o potencial *on-site* anarmônico, i.e., no modelo puramente harmônico com reservatórios auto-consistentes. Uma

vez calculadas as funções de correlação do estado estacionário de não-equilíbrio, foi possível calcular a corrente de calor e o perfil de temperatura no regime de resposta linear. Aplicando o resultado ao caso específico de uma cadeia com massas e potenciais on-site alternados, mostramos que o efeito termo-isolante observado em cadeias harmônicas quânticas e clássicas com reservatórios apenas nas extremidades também ocorre no modelo em questão.

A ocorrência de um efeito termo-isolante em modelos tão distintos indica que esta deve ser uma propriedade geral de cadeias com massas alternadas, sendo pouco relevantes a natureza clássica ou quântica do modelo, a presença ou ausência de ruídos nos sítios internos da cadeia e a presença ou ausência de termos anarmônicos no potencial *on-site*.

Apêndice A

Cálculo do determinante D_n^0

Neste apêndice, será calculado o determinante tridiagonal $n \times n$

$$D_n^0 \equiv \begin{vmatrix} z & -1 & & & & \\ -1 & z & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & z & -1 \\ & & & & -1 & z \end{vmatrix}_{n \times n} . \quad (\text{A.1})$$

Este resultado será necessário ao cálculo do determinante $D_n^{(1)}$ no Apêndice B.

Expandindo o determinante em cofatores da primeira linha, obtemos

$$D_n^0 = zD_{n-1}^0 + \begin{vmatrix} -1 & -1 & & & \\ & z & -1 & & \\ & -1 & z & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & -1 & z & -1 \\ & & & & & -1 & z \end{vmatrix}_{(n-1) \times (n-1)} .$$

Expandindo o segundo termo do lado direito em cofatores da primeira coluna,

obtemos a relação de recorrência

$$D_n^0 = zD_{n-1}^0 - D_{n-2}^0 \quad (n = 3, 4, 5, \dots) \quad , \quad (\text{A.2})$$

cujas condições iniciais são dadas por

$$D_1^0 = z \quad , \quad (\text{A.3})$$

$$D_2^0 = z^2 - 1 \quad . \quad (\text{A.4})$$

Definindo $D_{-1}^0 \equiv 0$ e $D_0^0 \equiv 1$ e usando as Eqs. (A.3) e (A.4), verifica-se que a Eq. (A.2) pode ser estendida para $n = 1, 2$. Então podemos escrever

$$D_{-1}^0 = 0 \quad , \quad (\text{A.5})$$

$$D_0^0 = 1 \quad , \quad (\text{A.6})$$

$$D_n^0 = zD_{n-1}^0 - D_{n-2}^0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad . \quad (\text{A.7})$$

Ao resolvermos a recorrência (A.7) sujeita às condições iniciais (A.5) e (A.6), há três casos a considerar:

i) $z \neq \pm 2$

ii) $z = 2$

iii) $z = -2$

1º caso: $z \neq \pm 2$

Definindo $\Delta_n^0 \equiv D_n^0 - D_{n-1}^0$, segue da relação de recorrência que

$$\begin{aligned} D_n^0 - D_{n-1}^0 &= (z - 2)D_{n-1}^0 + D_{n-1}^0 - D_{n-2}^0 \quad , \\ \Delta_n^0 &= (z - 2)D_{n-1}^0 + \Delta_{n-1}^0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} D_n^0 &= (z - 1)D_{n-1}^0 + D_{n-1}^0 - D_{n-2}^0 \quad , \\ D_n^0 &= (z - 1)D_{n-1}^0 + \Delta_{n-1}^0 \quad . \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

As Eqs. (A.8) e (A.9) podem ser escritas na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \Delta_n^0 \\ D_n^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_{n-1}^0 \\ D_{n-1}^0 \end{pmatrix} . \quad (\text{A.10})$$

A solução da recorrência (A.10) é

$$\begin{pmatrix} \Delta_n^0 \\ D_n^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} \Delta_0^0 \\ D_0^0 \end{pmatrix} .$$

Como $D_{-1}^0 = 0$ e $D_0^0 = 1$, temos $\begin{pmatrix} \Delta_0^0 \\ D_0^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, logo

$$\begin{pmatrix} \Delta_n^0 \\ D_n^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}^n \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad (\text{A.11})$$

A potência $\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}^n$ pode ser calculada via diagonalização da matriz $\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}$.

O autovalores da matriz $\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}$ são

$$\lambda_{\pm} = \frac{z}{2} \pm \left[\left(\frac{z}{2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} , \quad (\text{A.12})$$

com autovetores

$$\begin{pmatrix} \lambda_{\pm} + 1 - z \\ 1 \end{pmatrix} , \quad (\text{A.13})$$

respectivamente.

Neste ponto, fica claro o motivo de separarmos os casos $z = \pm 2$ dos demais: se $z \neq \pm 2$, temos $\lambda_+ \neq \lambda_-$, logo neste caso os autovetores são linearmente independentes.

A transformação de similaridade que mapeia a matriz $\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}$ na sua forma

diagonal se escreve

$$\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_- + 1 - z & \lambda_+ + 1 - z \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_- & 0 \\ 0 & \lambda_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_- + 1 - z & \lambda_+ + 1 - z \\ & 1 \end{pmatrix}^{-1}, \quad (\text{A.14})$$

logo a enésima potência da matriz $\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}$ é dada por

$$\begin{pmatrix} 1 & z-2 \\ 1 & z-1 \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} \lambda_- + 1 - z & \lambda_+ + 1 - z \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_-^n & 0 \\ 0 & \lambda_+^n \end{pmatrix} \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} 1 & -(\lambda_+ + 1 - z) \\ -1 & \lambda_- + 1 - z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.15})$$

Levando a expressão (A.15) na Eq. (A.11), obtemos

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Delta_n^0 \\ D_n^0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} \lambda_- + 1 - z & \lambda_+ + 1 - z \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_-^n & 0 \\ 0 & \lambda_+^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -(\lambda_+ + 1 - z) \\ -1 & \lambda_- + 1 - z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} \lambda_- + 1 - z & \lambda_+ + 1 - z \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_-^n & 0 \\ 0 & \lambda_+^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z - \lambda_+ \\ -(z - \lambda_-) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Da Eq. (A.12), obtemos

$$z - \lambda_{\pm} = \lambda_{\mp}, \quad (\text{A.17})$$

logo

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Delta_n^0 \\ D_n^0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} 1 - \lambda_+ & 1 - \lambda_- \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_-^n & 0 \\ 0 & \lambda_+^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_- \\ -\lambda_+ \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} 1 - \lambda_+ & 1 - \lambda_- \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_-^{n+1} \\ -\lambda_+^{n+1} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\lambda_- - \lambda_+} \begin{pmatrix} \lambda_-^{n+1} - \lambda_+^{n+1} - \lambda_+ \lambda_- \lambda_-^n + \lambda_- \lambda_+ \lambda_+^n \\ \lambda_-^{n+1} - \lambda_+^{n+1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Da Eq. (A.12), obtemos

$$\lambda_+ \lambda_- = \left(\frac{z}{2}\right)^2 - \left[\left(\frac{z}{2}\right)^2 - 1\right] = 1, \quad ,$$

logo

$$\lambda_- = \lambda_+^{-1} \quad . \quad (\text{A.19})$$

Das Eqs. (A.18) e (A.19), finalmente obtemos

$$D_n^0 = \frac{\lambda_+^{n+1} - \lambda_-^{n+1}}{\lambda_+ - \lambda_-} = \frac{\lambda_{\pm}^{n+1} - \lambda_{\pm}^{-(n+1)}}{\lambda_{\pm} - \lambda_{\pm}^{-1}} \quad . \quad (\text{A.20})$$

Se $\lambda_+ \in \mathbb{C} - (-\infty, 0] \times \{0\}$, definimos $\alpha = \log \lambda_+$, onde o ramo da função \log é escolhido de tal forma que $-\pi < \arg(\lambda_+) < \pi$, com corte em $\lambda_+ \in (-\infty, 0] \times \{0\}$. Para $\lambda_+ \in \mathbb{R}$ tal que $\lambda_+ < 0$, definimos $\alpha \equiv i\pi + \text{Log}|\lambda_+|$. Temos, portanto,

$$\begin{aligned} \alpha &= \text{Log}|\lambda_+| + i \arg(\lambda_+) \\ &\equiv \alpha_R + i\alpha_I \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

com

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_+ \in \mathbb{C} - (-\infty, 0] \\ -\pi < \arg(\lambda_+) < \pi \end{array} \right. \quad \text{ou} \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda_+ \in (-\infty, 0) \\ \arg(\lambda_+) = \pi \end{array} \right. \quad . \quad (\text{A.22})$$

Em qualquer caso, também podemos escrever

$$\lambda_+ = e^\alpha \quad . \quad (\text{A.23})$$

Das Eqs. (A.17), (A.19) e (A.23) obtemos

$$\begin{aligned} \lambda_+ + \lambda_- &= z \\ \Rightarrow \lambda_+ + \lambda_+^{-1} &= z \\ \Rightarrow e^\alpha + e^{-\alpha} &= z \quad , \end{aligned}$$

logo

$$z = 2 \cosh \alpha \quad . \quad (\text{A.24})$$

Das Eqs. (A.20) e (A.23), obtemos (em qualquer caso)

$$D_n^0 = \frac{\sinh [(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} \quad , \quad (\text{A.25})$$

com (cf. Eq. (A.12))

$$e^\alpha = \frac{z}{2} + \left[\left(\frac{z}{2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} , \quad (\text{A.26})$$

sendo α tal que

$$\begin{cases} -\pi < \alpha_I < \pi & , & \text{se } \lambda_+ \in \mathbb{C} - (-\infty, 0] \\ \alpha_I = \pi & , & \text{se } \lambda_+ \in (-\infty, 0) \end{cases} , \quad (\text{A.27})$$

onde $\alpha_I = \text{Im } \alpha$.

2º caso: $z = 2$

Neste caso, temos para $n = 1, 2, 3, \dots$

$$\begin{aligned} D_{-1}^0 &= 0 \quad , \\ D_0^0 &= 1 \quad , \\ D_n^0 &= 2D_{n-1}^0 - D_{n-2}^0 \quad . \end{aligned}$$

Segue da relação de recorrência que

$$\begin{aligned} D_n^0 - D_{n-1}^0 &= D_{n-1}^0 - D_{n-2}^0 & \forall n \\ \Rightarrow D_n^0 - D_{n-1}^0 &= D_0^0 - D_{-1}^0 = 1 & \forall n \quad . \end{aligned}$$

Desta última equação, segue que

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^n (D_k^0 - D_{k-1}^0) &= \sum_{k=0}^n 1 = n + 1 \\ \Rightarrow D_n^0 - D_{-1}^0 &= n + 1 \quad , \end{aligned}$$

logo

$$D_n^0 = n + 1 \quad . \quad (\text{A.28})$$

3º caso: $z = -2$

Neste caso, um pequeno artifício nos permitirá recair no caso anterior. Multiplicando a relação de recorrência por $(-1)^n$, obtemos

$$\begin{aligned} (-1)^n D_n^0 &= -2(-1)^n D_{n-1}^0 - (-1)^n D_{n-2}^0 \\ \Rightarrow (-1)^n D_n^0 &= 2(-1)^{n-1} D_{n-1}^0 - (-1)^{n-2} D_{n-2}^0 . \end{aligned}$$

Seja $\tilde{D}_n^0 = (-1)^n D_n^0$. Temos

$$\begin{aligned} D_{-1}^0 = 0 &\Rightarrow \tilde{D}_{-1}^0 = 0 , \\ D_0^0 = 1 &\Rightarrow \tilde{D}_0^0 = 1 . \end{aligned}$$

Na variável \tilde{D}_n^0 , a relação de recorrência se escreve

$$\tilde{D}_{-1}^0 = 0 , \tag{A.29}$$

$$\tilde{D}_0^0 = 1 , \tag{A.30}$$

$$\tilde{D}_n^0 = 2\tilde{D}_{n-1}^0 - \tilde{D}_{n-2}^0 , \tag{A.31}$$

i.e., voltamos ao caso anterior. Portanto, $\tilde{D}_n^0 = n + 1$, donde concluímos que

$$D_n^0 = (-1)^n (n + 1) . \tag{A.32}$$

Apêndice B

Cálculo do determinante $D_n^{(1)}$

Neste apêndice, será calculado o determinante tridiagonal $n \times n$

$$D_n^{(1)} \equiv \begin{vmatrix} z_1 & -1 & & & & \\ -1 & z_2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & z_{2,1} & -1 \\ & & & & -1 & z_{1,2} \end{vmatrix}_{n \times n}, \quad (\text{B.1})$$

onde

$$z_{1,2} = \begin{cases} z_1 & , \text{ se } n \text{ é ímpar} \\ z_2 & , \text{ se } n \text{ é par} \end{cases}, \quad z_{2,1} = \begin{cases} z_2 & , \text{ se } n \text{ é ímpar} \\ z_1 & , \text{ se } n \text{ é par} \end{cases}.$$

Expandindo o determinante em cofatores da primeira linha, obtemos

$$D_n^{(1)} = z_1 D_{n-1}^{(2)} + \begin{vmatrix} -1 & -1 & & & & \\ & z_1 & -1 & & & \\ & -1 & z_2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & -1 & z_{2,1} & -1 \\ & & & & & -1 & z_{1,2} \end{vmatrix}_{(n-1) \times (n-1)}, \quad (\text{B.2})$$

1º caso: $z_1, z_2 \neq 0$, $\sqrt{z_1 z_2} \neq 2$

Na forma matricial, o sistema de recorrências (B.6) se escreve

$$\begin{pmatrix} D_n^{(1)} \\ D_n^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & z_1 \\ z_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{n-1}^{(1)} \\ D_{n-1}^{(2)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} D_{n-2}^{(1)} \\ D_{n-2}^{(2)} \end{pmatrix} . \quad (\text{B.9})$$

Os autovalores da matriz $\begin{pmatrix} 0 & z_1 \\ z_2 & 0 \end{pmatrix}$ são

$$\pm \sqrt{z_1 z_2} ,$$

com autovetores

$$\begin{pmatrix} z_1 \\ \pm \sqrt{z_1 z_2} \end{pmatrix} ,$$

respectivamente. A raiz quadrada \sqrt{z} é definida de tal maneira que $\text{Re}(\sqrt{z}) \geq 0$ se $z \geq 0$ e $\text{Im}(\sqrt{z}) \geq 0$ se $z \leq 0$.

A matriz $\begin{pmatrix} 0 & z_1 \\ z_2 & 0 \end{pmatrix}$ pode ser diagonalizada através da transformação de similaridade

$$\begin{pmatrix} 0 & z_1 \\ z_2 & 0 \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} -\sqrt{z_1 z_2} & 0 \\ 0 & \sqrt{z_1 z_2} \end{pmatrix} W^{-1} , \quad (\text{B.10})$$

onde

$$W = \begin{pmatrix} z_1 & z_1 \\ -\sqrt{z_1 z_2} & \sqrt{z_1 z_2} \end{pmatrix} . \quad (\text{B.11})$$

Definindo $D_n \equiv \begin{pmatrix} D_n^{(1)} \\ D_n^{(2)} \end{pmatrix}$ e levando a expressão (B.10) na Eq. (B.9), obtemos

$$D_n = W \begin{pmatrix} -\sqrt{z_1 z_2} & 0 \\ 0 & \sqrt{z_1 z_2} \end{pmatrix} W^{-1} D_{n-1} - D_{n-2} , \quad (\text{B.12})$$

donde obtemos

$$W^{-1} D_n = \begin{pmatrix} -\sqrt{z_1 z_2} & 0 \\ 0 & \sqrt{z_1 z_2} \end{pmatrix} W^{-1} D_{n-1} - W^{-1} D_{n-2} , \quad (\text{B.13})$$

que é válido para $n = 3, 4, 5, \dots$

As condições iniciais da recorrência (B.13) são

$$\begin{aligned} D_1 &= \begin{pmatrix} D_1^{(1)} \\ D_1^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} , \\ D_2 &= \begin{pmatrix} D_2^{(1)} \\ D_2^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 z_2 - 1 \\ z_1 z_2 - 1 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Definindo

$$\begin{aligned} D_{-1} &= \begin{pmatrix} D_{-1}^{(1)} \\ D_{-1}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \\ D_0 &= \begin{pmatrix} D_0^{(1)} \\ D_0^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

e usando as condições iniciais (B.14), verifica-se que a relação de recorrência (B.13) pode ser estendida para $n = 1, 2$, com as novas condições iniciais dadas por (B.15).

A inversa da matriz W (Eq. (B.11)) é dada por

$$W^{-1} = \frac{1}{2z_1\sqrt{z_1z_2}} \begin{pmatrix} \sqrt{z_1z_2} & -z_1 \\ \sqrt{z_1z_2} & z_1 \end{pmatrix} . \quad (\text{B.16})$$

Das Eqs. (B.15) e (B.16), obtemos

$$\begin{aligned} W^{-1}D_{-1} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \\ W^{-1}D_0 &= \frac{1}{2z_1\sqrt{z_1z_2}} \begin{pmatrix} \sqrt{z_1z_2} - z_1 \\ \sqrt{z_1z_2} + z_1 \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

A Eq. (B.13) é uma relação recursiva para a seqüência de vetores $W^{-1}D_n$, com condições iniciais dadas pelas Eqs. (B.17). A Eq. (B.13) representa o sistema de equações

$$\begin{aligned} [W^{-1}D_n]^{(1)} &= -\sqrt{z_1z_2} [W^{-1}D_{n-1}]^{(1)} - [W^{-1}D_{n-2}]^{(1)} , \\ [W^{-1}D_n]^{(2)} &= \sqrt{z_1z_2} [W^{-1}D_{n-1}]^{(2)} - [W^{-1}D_{n-2}]^{(2)} . \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

As Eqs. desacopladas (B.18) são da mesma forma da Eq. (A.7), porém com as condições iniciais (B.17), logo as respectivas soluções são proporcionais (A.25), i.e.,

$$\begin{aligned} [W^{-1}D_n]^{(1)} &= (-1)^n \frac{\sqrt{z_1 z_2} - z_1}{2z_1 \sqrt{z_1 z_2}} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} , \\ [W^{-1}D_n]^{(2)} &= \frac{\sqrt{z_1 z_2} + z_1}{2z_1 \sqrt{z_1 z_2}} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} , \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

com e^α dado por (cf. Eq. (A.26))

$$e^\alpha = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} + \left[\left(\frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} . \quad (\text{B.20})$$

Portanto, escrevemos

$$W^{-1}D_n = \frac{1}{2z_1 \sqrt{z_1 z_2}} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} \begin{pmatrix} (-1)^n (\sqrt{z_1 z_2} - z_1) \\ \sqrt{z_1 z_2} + z_1 \end{pmatrix} .$$

Usando a Eq. (B.11), obtemos

$$D_n = \frac{1}{2z_1 \sqrt{z_1 z_2}} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} \begin{pmatrix} z_1 & z_1 \\ -\sqrt{z_1 z_2} & \sqrt{z_1 z_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (-1)^n (\sqrt{z_1 z_2} - z_1) \\ \sqrt{z_1 z_2} + z_1 \end{pmatrix} . \quad (\text{B.21})$$

A componente $D_n^{(2)}$ é dada por

$$D_n^{(2)} = \frac{1}{2z_1} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} \{ \sqrt{z_1 z_2} [1 + (-1)^{n+1}] + z_1 [1 + (-1)^n] \} .$$

Denotando $s_1 \equiv \text{sgn}(z_1)$, $s_2 \equiv \text{sgn}(z_2)$, escrevemos

$$\frac{\sqrt{z_1 z_2}}{z_1} = s_1 \sqrt{s_1 s_2} \frac{\sqrt{|z_1| |z_2|}}{|z_1|} = s_1 \sqrt{s_1 s_2} \sqrt{\frac{|z_2|}{|z_1|}} = s_1 \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} ,$$

logo

$$D_n^{(2)} = \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} \left[\text{sgn}(z_1) \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} \frac{1 + (-1)^{n+1}}{2} + \frac{1 + (-1)^n}{2} \right] . \quad (\text{B.22})$$

De modo análogo, obtemos

$$D_n^{(1)} = \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} \left[\operatorname{sgn}(z_2) \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \frac{1 + (-1)^{n+1}}{2} + \frac{1 + (-1)^n}{2} \right]. \quad (\text{B.23})$$

Finalmente, concluimos

$$D_n^{(1)} = \begin{cases} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} & , \quad \text{se } n \text{ é par} \\ \operatorname{sgn}(z_2) \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \frac{\sinh[(n+1)\alpha]}{\sinh \alpha} & , \quad \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases}, \quad (\text{B.24})$$

com $e^\alpha = \frac{z}{2} + \left[\left(\frac{z}{2} \right)^2 - 1 \right]^{1/2}$.

2º caso: $z_1 = 0$

$$\begin{cases} D_n^{(1)} = -D_{n-2}^{(1)} \\ D_1^{(1)} = z_1 = 0 \\ D_2^{(1)} = z_1 z_2 - 1 = -1 \end{cases}. \quad (\text{B.25})$$

Neste caso, a solução da recorrência é

$$D_n^{(1)} = \begin{cases} 0 & , \quad \text{se } n \text{ é ímpar} \\ (-1)^{n/2} & , \quad \text{se } n \text{ é par} \end{cases}. \quad (\text{B.26})$$

3º caso: $z_2 = 0$

Do caso anterior, deduzimos que se $z_2 = 0$, então

$$D_n^{(2)} = \begin{cases} 0 & , \quad \text{se } n \text{ é ímpar} \\ (-1)^{n/2} & , \quad \text{se } n \text{ é par} \end{cases}. \quad (\text{B.27})$$

Para n ímpar, temos

$$\begin{cases} D_n^{(1)} = (-1)^{\frac{n-1}{2}} z_1 - D_{n-2}^{(1)} \\ D_n^{(1)} = z_1 \end{cases}. \quad (\text{B.28})$$

Definindo

$$\tilde{D}_n^{(1)} \equiv (-1)^{\frac{n-1}{2}} D_n^{(1)} \quad , \quad (\text{B.29})$$

a relação de recorrência pode ser reescrita como

$$\tilde{D}_n^{(1)} - \tilde{D}_{n-2}^{(1)} = z_1 \quad . \quad (\text{B.30})$$

Desta última equação, obtemos

$$\sum_{\substack{k=1 \\ \{k \text{ ímpar}\}}}^n \left(\tilde{D}_k^{(1)} - \tilde{D}_{k-2}^{(1)} \right) = \frac{n+1}{2} z_1 \quad ,$$

que implica

$$\tilde{D}_n^{(1)} - \tilde{D}_1^{(1)} = \frac{n+1}{2} z_1 \quad .$$

Como $\tilde{D}_1^{(1)} = D_1^{(1)} = z_1$, obtemos

$$\tilde{D}_n^{(1)} = \frac{n+3}{2} z_1 \quad ,$$

logo

$$D_n^{(1)} = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n+3}{2} z_1 \quad (\text{B.31})$$

para n ímpar.

Para n par, temos

$$\begin{cases} D_n^{(1)} = -D_{n-2}^{(1)} \\ D_n^{(1)} = z_1 z_2 - 1 = -1 \end{cases} \quad , \quad (\text{B.32})$$

logo

$$D_n^{(1)} = (-1)^{n/2} \quad . \quad (\text{B.33})$$

Em resumo, para $z_2 = 0$ temos

$$D_n^{(1)} = \begin{cases} (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n+3}{2} z_1 & , \quad \text{se } n \text{ é ímpar} \\ (-1)^{n/2} & , \quad \text{se } n \text{ é par} \end{cases} \quad . \quad (\text{B.34})$$

4º caso: $\sqrt{z_1 z_2} = 2$

Das Eqs. (B.18) e do caso $z = 2$ discutido no Apêndice A (Eq. (A.28)), deduzimos

$$\begin{aligned} [W^{-1}D_n]^{(1)} &= \frac{2 - z_1}{4z_1}(-1)^n(n+1) \quad , \\ [W^{-1}D_n]^{(2)} &= \frac{2 + z_1}{4z_1}(n+1) \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Então escrevemos

$$W^{-1}D_n = \frac{n+1}{2z_1} \begin{pmatrix} (-1)^n & \\ & 1 \end{pmatrix} + \frac{n+1}{4} \begin{pmatrix} (-1)^{n+1} & \\ & 1 \end{pmatrix} \quad .$$

Usando a Eq. (B.11), obtemos

$$D_n = \frac{n+1}{2z_1} \begin{pmatrix} z_1 & z_1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (-1)^n & \\ & 1 \end{pmatrix} + \frac{n+1}{4} \begin{pmatrix} z_1 & z_1 \\ -2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (-1)^{n+1} & \\ & 1 \end{pmatrix} \quad ,$$

logo

$$\begin{aligned} D_n^{(1)} &= (n+1) \left[\frac{1 + (-1)^n}{2} + \frac{z_1}{2} \frac{1 + (-1)^{n+1}}{2} \right] \quad , \text{ i.e.,} \\ D_n^{(1)} &= \begin{cases} (n+1)\frac{z_1}{2} & , \quad \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n+1 & , \quad \text{se } n \text{ é par} \end{cases} \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Apêndice C

Invertibilidade de $Z^0(\omega)$ no semi-plano superior $\text{Im}(\omega) \geq 0$

Neste apêndice, serão demonstrados os lemas 2.3.3 e 2.3.4.

Prova do Lema 2.3.3

Mostraremos que $\det Z^0 \neq 0 \ \forall \ \omega$ real. Há três casos a considerar:

i) $z_1 z_2 < 0$

Usando a relação de recorrência (A.2) na Eq. (2.128), obtemos

$$\text{Re} [\det Z^0] = D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) - \gamma_L \gamma_R \omega^2 D_{N-2}^0(\sqrt{z_1 z_2}) \quad . \quad (\text{C.1})$$

Da Eq. (2.126), temos $\text{sgn} [D_N^0(\sqrt{z_1 z_2})] = -\text{sgn} [D_{N-2}^0(\sqrt{z_1 z_2})]$, logo

$$|\text{Re} [\det Z^0]| = |D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})| + \gamma_L \gamma_R \omega^2 |D_{N-2}^0(\sqrt{z_1 z_2})| \quad . \quad (\text{C.2})$$

Pela Eq. (2.126), temos $|D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2})| = \frac{\cosh[(N+1)\beta]}{\cosh \beta} \neq 0 \ \forall \ \omega$ real, logo $\text{Re} [\det Z^0] \neq 0 \ \forall \ \omega$ real, o que implica $\det Z^0 \neq 0 \ \forall \ \omega$ real se $z_1 z_2 < 0$.

ii) $z_1 z_2 = 0$

Se $z_1 = 0$, temos

$$D_{N-1}^{(1)} = 0 \quad , \quad D_{N-2}^{(1)} = (-1)^{\frac{N-2}{2}} \quad , \quad D_{N-1}^{(2)} = (-1)^{\frac{N-2}{2}} \frac{N+2}{2} z_2 \quad , \quad D_{N-2}^{(2)} = (-1)^{\frac{N-2}{2}} \quad ,$$

logo

$$\det Z^0 = (-1)^{\frac{N}{2}} (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) + i \gamma_L \omega (-1)^{\frac{N}{2}} \frac{N+2}{2} z_2 \quad . \quad (\text{C.3})$$

Se $z_2 = 0$, temos

$$D_{N-1}^{(1)} = -(-1)^{\frac{N}{2}} \frac{N+2}{2} z_1 \quad , \quad D_{N-2}^{(1)} = -(-1)^{\frac{N}{2}} \quad , \quad D_{N-1}^{(2)} = 0 \quad , \quad D_{N-2}^{(2)} = -(-1)^{\frac{N}{2}} \quad ,$$

logo

$$\det Z^0 = (-1)^{\frac{N}{2}} (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) + i \gamma_R \omega (-1)^{\frac{N}{2}} \frac{N+2}{2} z_1 \quad . \quad (\text{C.4})$$

Das Eqs. (C.3) e (C.4), deduzimos que se $z_1 z_2 = 0$, então $\det Z^0 \neq 0 \quad \forall \omega$ real.

iii) $0 < z_1 z_2 < 4$

Neste caso, temos

$$e^\alpha = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} + \left(\frac{z_1 z_2}{4} - 1 \right)^{1/2} = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} + i \left(1 - \frac{z_1 z_2}{4} \right)^{1/2} \quad ,$$

o que implica $|e^\alpha| = 1$. Portanto, neste caso α é imaginário puro e escrevemos $\alpha = i\theta$, com $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ dado por

$$\cos \theta = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} \quad . \quad (\text{C.5})$$

Para N qualquer, o determinante $D_N^0(\sqrt{z_1 z_2})$ é dado por (v. Apêndice A)

$$D_N^0(\sqrt{z_1 z_2}) = \frac{\sinh[i(N+1)\theta]}{\sinh(i\theta)} = \frac{\sin[(N+1)\theta]}{\sin \theta} \quad .$$

As partes real e imaginária de $\det Z^0$ são dadas por

$$\operatorname{Re} [\det Z^0] = \sqrt{z_1 z_2} \frac{\sin(N\theta)}{\sin \theta} - (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \frac{\sin[(N-1)\theta]}{\sin \theta} , \quad (\text{C.6})$$

$$\operatorname{Im} [\det Z^0] = -s \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) \omega \frac{\sin(N\theta)}{\sin \theta} , \quad (\text{C.7})$$

sendo $s \equiv s_1 = s_2$.

A fim de verificar que $\det Z^0 \neq 0 \ \forall \ \omega$ real, primeiro observamos que $z_1 z_2 < 4 \Rightarrow \omega \neq 0$, pois se fosse $\omega = 0$ teríamos $z_1 = 2 + m_1 \omega_0^2$ e $z_2 = 2 + m_2 \omega_0^2$ (v. Eq. (2.114)), o que implicaria $z_1 z_2 \geq 4$.

Suponhamos $\sin(N\theta) = 0$. Então neste caso

$$\operatorname{Re} [\det Z^0] = -(1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \frac{\sin[(N-1)\theta]}{\sin \theta} .$$

Observe-se que

$$\sin[(N-1)\theta] = \sin(N\theta) \cos \theta - \sin \theta \cos(N\theta) .$$

Como $\sin(N\theta) = 0$ temos $|\cos(N\theta)| = 1$, logo

$$|\sin[(N-1)\theta]| = \sin \theta > 0$$

(pois $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$), logo $\operatorname{Re} [\det Z^0] \neq 0$, o que implica $\det Z^0 \neq 0$.

Caso seja $\sin(N\theta) \neq 0$, temos $\operatorname{Im} [\det Z^0] \neq 0$ e, novamente, $\det Z^0 \neq 0$.

iv) $z_1 z_2 = 4$

Neste caso, temos $D_N^0(\sqrt{z_1 z_2}) = N + 1$, $D_{N-1}^0(\sqrt{z_1 z_2}) = N$ e $D_{N-2}^0(\sqrt{z_1 z_2}) = N - 1$, logo

$$\operatorname{Re} [\det Z^0] = (N + 1) - \gamma_L \gamma_R \omega^2 (N - 1) = (1 - \gamma_L \gamma_R \omega^2) N + (1 + \gamma_L \gamma_R \omega^2) \quad , \quad (\text{C.8})$$

$$\operatorname{Im} [\det Z^0] = -s \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) \omega N \quad . \quad (\text{C.9})$$

Se $\omega \neq 0$, então $\operatorname{Im} [\det Z^0] \neq 0 \Rightarrow \det Z^0 \neq 0$.

Se, por outro lado, $\omega = 0$, então $\operatorname{Re} [\det Z^0] = N + 1 \neq 0 \Rightarrow \det Z^0 \neq 0$.

v) $z_1 z_2 > 4$

Neste caso, temos

$$e^\alpha = \frac{\sqrt{z_1 z_2}}{2} + \left(\frac{z_1 z_2}{4} - 1 \right)^{1/2} > 1 + \left(\frac{z_1 z_2}{4} - 1 \right)^{1/2} > 1 \Rightarrow \alpha > 0 \quad .$$

As partes real e imaginária de $\det Z^0$ são dadas por

$$\operatorname{Re} [\det Z^0] = \frac{\sinh[(N + 1)\alpha]}{\sinh \alpha} - \gamma_L \gamma_R \omega^2 \frac{\sinh[(N - 1)\alpha]}{\sinh \alpha} \quad , \quad (\text{C.10})$$

$$\operatorname{Im} [\det Z^0] = -s \left(\gamma_L \sqrt{\frac{z_2}{z_1}} + \gamma_R \sqrt{\frac{z_1}{z_2}} \right) \omega \frac{\sinh(N\alpha)}{\sinh \alpha} \quad . \quad (\text{C.11})$$

Como $\alpha > 0$, $\omega \neq 0 \Rightarrow \operatorname{Im} [\det Z^0] = N + 1 \neq 0 \Rightarrow \det Z^0 \neq 0$.

Se $\omega = 0$, então $\operatorname{Re} [\det Z^0] = \frac{\sinh[(N + 1)\alpha]}{\sinh \alpha} > 0$ (pois $\alpha > 0$), logo $\det Z^0 \neq 0$.

□

Prova do Lema 2.3.4

Nas páginas seguintes, demonstraremos a invertibilidade de Z^0 para $\text{Im } \omega > 0$ seguindo as idéias sugeridas por Casher e Lebowitz [23]. Antes de demonstrarmos o resultado, enunciamos o seguinte lema:

Lema C.0.1. *Seja $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ uma transformação linear simétrica, positiva-definida e seja $\tilde{\Phi} : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$ a transformação linear definida por*

$$\tilde{\Phi}_{rs} \equiv \tilde{e}_r^* \tilde{\Phi} \tilde{e}_s = e_r^T \Phi e_s \equiv \Phi_{rs} \quad (r, s \in \{1, \dots, N\}) \quad ,$$

onde (e_1, \dots, e_N) é uma base ortonormal de \mathbb{R}^N e $(\tilde{e}_1, \dots, \tilde{e}_N)$ é uma base ortonormal de \mathbb{C}^N . Então se $\eta \neq 0$ é um vetor em \mathbb{C}^N , tem-se $\eta^* \tilde{\Phi} \eta > 0$.

Demonstração. Verifiquemos primeiro que $\eta^* \tilde{\Phi} \eta$ é real. Com efeito, seja

$$\eta = \sum_{r=1}^N (u_r + iv_r) \tilde{e}_r \quad .$$

Então

$$\begin{aligned} \text{Im}(\eta^* \tilde{\Phi} \eta) &= \text{Im} \left[\sum_{r,s=1}^N (u_r - iv_r) \tilde{\Phi}_{rs} (u_s + iv_s) \right] \\ &= \text{Im} \left[\sum_{r,s=1}^N (u_r - iv_r) \Phi_{rs} (u_s + iv_s) \right] \\ &= \sum_{r,s=1}^N u_r \Phi_{rs} v_s - \sum_{r,s=1}^N v_r \Phi_{rs} u_s \\ &= \sum_{r,s=1}^N u_r \Phi_{rs} v_s - \sum_{r,s=1}^N u_r \Phi_{sr} v_s \\ &= \sum_{r,s=1}^N u_r (\Phi_{rs} - \Phi_{sr}) v_s \quad . \end{aligned}$$

Como $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ é simétrica, temos $\Phi_{rs} = \Phi_{sr}$, logo $\text{Im}(\eta^* \tilde{\Phi} \eta) = 0$, i.e., $\eta^* \tilde{\Phi} \eta$ é real.

Mostraremos agora que $\eta^* \tilde{\Phi} \eta > 0$ se $\eta \neq 0$.

A verificação é imediata:

$$\begin{aligned}\eta^* \tilde{\Phi} \eta &= \operatorname{Re}(\eta^* \tilde{\Phi} \eta) = \sum_{r,s=1}^N u_r \Phi_{rs} u_s + \sum_{r,s=1}^N v_r \Phi_{rs} v_s \\ &= u^T \Phi u + v^T \Phi v \quad ,\end{aligned}$$

onde $u = \sum_{r=1}^N u_r e_r$ e $v = \sum_{r=1}^N v_r e_r$ são vetores em \mathbb{R}^N . Como, por hipótese, $\Phi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ é positiva-definida, então $u \neq 0 \Rightarrow u^T \Phi u > 0$ e $v \neq 0 \Rightarrow v^T \Phi v > 0$, logo $\eta \neq 0 \Rightarrow u \neq 0$ ou $v \neq 0$, logo $\eta^* \tilde{\Phi} \eta > 0$.

□

Prova da invertibilidade de Z^0 para $\operatorname{Im}(\omega) > 0$

A matriz Z^0 é invertível para $\operatorname{Im} \omega > 0$ se, e somente se, o sistema linear $Z^0 \eta = 0$ (η é um vetor em \mathbb{C}^N) admite apenas a solução trivial $\eta = 0$. Para verificar que $Z^0 \eta = 0 \Rightarrow \eta = 0$ sob a hipótese $\operatorname{Im} \omega > 0$, mostraremos que $\eta^* Z^0 \eta = 0 \Rightarrow \eta = 0$, onde η^* denota o conjugado hermitiano do vetor η em \mathbb{C}^N . Note-se que $Z^0 \eta = 0 \Rightarrow \eta^* Z^0 \eta = 0$.

A matriz Z^0 é dada pela Eq. (2.113),

$$Z^0 = -\omega^2 M_W - i\omega(\Lambda_L + \Lambda_R) + \Phi_W \quad ,$$

sendo (cf. Eq. (2.108))

$$\begin{aligned}[\Lambda_L]_{rs} &= \gamma_L \delta_{r1} \delta_{s1} \quad , \\ [\Lambda_R]_{rs} &= \gamma_R \delta_{rN} \delta_{sN} \quad .\end{aligned}$$

Então escrevemos

$$\eta^* Z^0 \eta = 0 \Rightarrow \eta^* M_W \eta \omega^2 + i\eta^* (\Lambda_L + \Lambda_R) \eta \omega - \eta^* \Phi_W \eta = 0 \quad .$$

Suponhamos $\eta \neq 0$. Como M_W é positiva-definida, escrevemos

$$\omega^2 + i \frac{\eta^* (\Lambda_L + \Lambda_R) \eta}{\eta^* M_W \eta} \omega - \frac{\eta^* \Phi_W \eta}{\eta^* M_W \eta} = 0 \quad . \quad (\text{C.12})$$

As raízes desta equação são

$$\omega^{(\pm)} = -i \frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \pm \left\{ \frac{\eta^* \Phi_W \eta}{\eta^* M_W \eta} - \left[\frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (\text{C.13})$$

Aa matrizes $\Lambda_{L,R}$ são positivas-definidas, pois $\eta^* \Lambda_{L,R} \eta = \gamma_{L,R} |e_1^* \eta|^2 \geq 0$.

Por hipótese, Φ_W é simétrica e positiva-definida em \mathbb{R}^N , logo pelo Lema C.0.1 temos $\eta^* \Phi_W \eta > 0$ se $\eta \neq 0 \in \mathbb{C}^N$.

Como o argumento da raiz quadrada na Eq. (C.13) é real, há dois casos a considerar:

$$\text{Se } \frac{\eta^* \Phi_W \eta}{\eta^* M_W \eta} \geq \left[\frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \right]^2, \text{ então}$$

$$\text{Im } \omega_{\pm} = -\frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \leq 0, \quad ,$$

logo neste caso a Eq. (C.12) não admite solução se $\text{Im } \omega > 0$.

$$\text{Se, por outro lado, } \frac{\eta^* \Phi_W \eta}{\eta^* M_W \eta} < \left[\frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \right]^2, \text{ então}$$

$$\text{Im } \omega_{\pm} = -\left\{ \frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \mp \left[\left(\frac{\eta^*(\Lambda_L + \Lambda_R)\eta}{2 \eta^* M_W \eta} \right)^2 - \frac{\eta^* \Phi_W \eta}{\eta^* M_W \eta} \right]^{1/2} \right\} \leq 0, \quad ,$$

logo também neste caso a Eq. (C.12) não admite solução tal que $\text{Im } \omega > 0$, o que completa a prova. \square

Apêndice D

Cálculo da corrente no limite clássico

Neste apêndice, será calculada a expressão exata da integral da corrente no limite clássico (altas temperaturas).

Seja

$$I \equiv \frac{(\zeta_{<} + \zeta_{>}) \pi J_d}{k_B(T_L - T_R) m_{<} m_{>} \zeta'^2} . \quad (\text{D.1})$$

Então a Eq. (2.175) se escreve

$$I = \int_0^{2/m_{>}} h(x; \zeta', \zeta_{<}, \zeta_{>}, 0) dx - \int_{2/m_{<}}^{2/m_{<}+2/m_{>}} h(x; \zeta', \zeta_{<}, \zeta_{>}, 0) dx , \quad (\text{D.2})$$

sendo

$$h(x; \zeta', \zeta_{<}, \zeta_{>}, 0) = \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4} [(2 - m_{<}x)(2 - m_{>}x) - 2]^2}}{[2(W - A) + m_{<} + m_{>} - m_{<}m_{>}x] [1 + \zeta'^2 m_{<}m_{>}x]} . \quad (\text{D.3})$$

Consideremos a mudança de variável $y = x - \left(\frac{1}{m_{<}} + \frac{1}{m_{>}}\right)$, que desloca a origem para o ponto médio entre os intervalos de integração (Fig. D.1). Na nova variável y ,

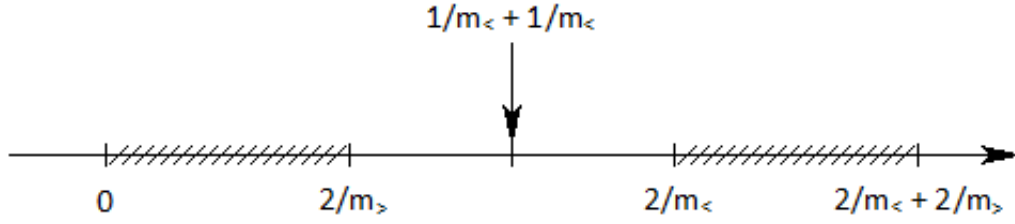


Figura D.1: Intervalos de integração.

a função $h(x; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0)$ se escreve

$$\begin{aligned}
 h(x; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0) &= h \left[y + \left(\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} \right); \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] \\
 &= \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4} \left\{ m_< m_> \left[y^2 - \left(\frac{1}{m_<} - \frac{1}{m_>} \right)^2 \right] - 2 \right\}^2}}{[2(W - A) - m_< m_> y] [1 + \zeta'^2 (m_< + m_>) + m_< m_> \zeta'^2 y]} .
 \end{aligned} \tag{D.4}$$

A mudança de variável transforma a integral (D.2) em

$$\begin{aligned}
 I &= \int_{-\frac{1}{m_<} - \frac{1}{m_>}}^{-\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}} h \left[y + \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} ; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] dy - \int_{\frac{1}{m_<} - \frac{1}{m_>}}^{\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}} h \left[y + \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} ; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] dy \\
 &= - \int_{\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}}^{\frac{1}{m_<} - \frac{1}{m_>}} h \left[-y + \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} ; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] dy - \int_{\frac{1}{m_<} - \frac{1}{m_>}}^{\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}} h \left[y + \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} ; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] dy ,
 \end{aligned}$$

i.e.,

$$I = \int_{\frac{1}{m_<} - \frac{1}{m_>}}^{\frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>}} \left\{ h \left[-y + \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} ; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] - h \left[y + \frac{1}{m_<} + \frac{1}{m_>} ; \zeta', \zeta_<, \zeta_>, 0 \right] \right\} dy . \tag{D.5}$$

Da Eq. (D.4), obtemos

$$\begin{aligned}
& h \left[-y + \frac{1}{m_{<}} + \frac{1}{m_{>}} ; \zeta', \zeta_{<}, \zeta_{>}, 0 \right] - h \left[y + \frac{1}{m_{<}} + \frac{1}{m_{>}} ; \zeta', \zeta_{<}, \zeta_{>}, 0 \right] = \\
& = \frac{\frac{2m_{<}}{m_{>}} \left[1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) - 2\zeta'^2(W - A) \right] y \sqrt{1 - \frac{1}{4}m_{<}^2 m_{>}^2 \left[y^2 - \left(\frac{1}{m_{<}^2} + \frac{1}{m_{>}^2} \right) \right]^2}}{\left[m_{<}^2 y^2 - \frac{4(W - A)^2}{m_{>}^2} \right] \left\{ \left[1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) \right]^2 - \zeta'^4 m_{<}^2 m_{>}^2 y^2 \right\}} .
\end{aligned} \tag{D.6}$$

Usando a nova mudança de variável $u = m_{<}y$ e definindo

$$r \equiv \frac{m_{<}}{m_{>}} , \tag{D.7}$$

a integral (D.5) se escreve

$$\begin{aligned}
I &= \frac{2}{m_{<}m_{>}} \left[1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) - 2\zeta'^2(W - A) \right] \times \\
& \times \int_{1-r}^{1+r} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4r^2} [u^2 - (1+r^2)]^2} u du}{\left[u^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2} \right] \left\{ \left[1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) \right]^2 - \zeta'^4 m_{>}^2 u^2 \right\}} .
\end{aligned} \tag{D.8}$$

Seja

$$\zeta'^2(m_{<} + m_{>}) \equiv \chi^{-1} . \tag{D.9}$$

A integral (D.8) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
I &= \frac{2}{m_{<}m_{>}} \left[1 + \chi^{-1} - 2\zeta'^2(W - A) \right] \int_{1-r}^{1+r} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4r^2} [u^2 - (1+r^2)]^2} u du}{\left[u^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2} \right] \left[(1 + \chi^{-1})^2 - \frac{\chi^{-2}}{(1+r)^2} u^2 \right]} \\
&= \frac{2\chi}{m_{<}m_{>}} \left[1 + \chi - 2\zeta'^2 \chi(W - A) \right] \int_{1-r}^{1+r} \frac{\sqrt{1 - \frac{1}{4r^2} [u^2 - (1+r^2)]^2} u du}{\left[u^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2} \right] \left[(1 + \chi)^2 - \frac{u^2}{(1+r)^2} \right]} .
\end{aligned}$$

Usando a mudança de variável $z = \frac{1}{2r} [u^2 - (1+r^2)]$, temos $dz = \frac{1}{r} u du$,

$u^2 = 2rz + (1 + r^2)$, e podemos escrever

$$\begin{aligned}
I &= \frac{2r \chi}{m_{<} m_{>}} \left[1 + \chi - 2\zeta'^2 \chi (W - A) \right] \times \\
&\times \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1 - z^2} \, dz}{\left[2rz + (1 + r^2) - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2} \right] \left[(1 + \chi)^2 - \frac{1 + r^2}{(1 + r)^2} - \frac{2r}{(1 + r)^2} z \right]} \\
&= \frac{2r (1 + r)^2 \chi \left[1 + \chi - 2\zeta'^2 \chi (W - A) \right]}{m_{<} m_{>} \left[1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2} \right]} \times \\
&\times \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1 - z^2} \, dz}{\left[1 + \frac{2r z}{1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2}} \right] \left[(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - (1 + r^2) - 2rz \right]} . \quad (D.10)
\end{aligned}$$

Sejam

$$a \equiv \frac{2r}{1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2}} , \quad (D.11)$$

$$b \equiv \frac{2r}{(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - (1 + r^2)} . \quad (D.12)$$

Observando que

$$(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - (1 + r^2) > (1 + r)^2 - (1 + r^2) = 2r ,$$

temos

$$0 < b < 1 . \quad (D.13)$$

Lembrando que W é uma média ponderada e A é a média aritmética das massas, vale a desigualdade

$$|W - A| < \frac{m_{>} - m_{<}}{2} = \frac{m_{>}}{2} (1 - r) ,$$

logo

$$\frac{4(W - A)^2}{m_{>}^2} < (1 - r)^2 .$$

Desta última desigualdade, deduzimos que

$$1 + r^2 - \frac{4(W - A)^2}{m_{>}^2} > 2r \quad ,$$

i.e.,

$$0 < a < 1 \quad . \quad (\text{D.14})$$

As definições (D.11) e (D.12) nos permitem reescrever a Eq. (D.10) como

$$I = \frac{ab(1+r)^2\chi [1 + \chi - 2\zeta'^2\chi(W - A)]}{2r m_{<}m_{>}} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-z^2}}{(1+az)(1-bz)} dz \quad . \quad (\text{D.15})$$

Seja

$$\mathcal{I} \equiv \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-z^2}}{(1+az)(1-bz)} dz \quad . \quad (\text{D.16})$$

Então temos

$$I = \frac{ab(1+r)^2\chi [1 + \chi - 2\zeta'^2\chi(W - A)]}{2r m_{<}m_{>}} \mathcal{I} \quad . \quad (\text{D.17})$$

Decompondo $\frac{1}{(1+az)(1-bz)}$ em frações parciais, obtemos

$$\frac{1}{(1+az)(1-bz)} = \frac{\left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1}}{1+az} + \frac{\frac{b}{a} \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1}}{1-bz} \quad .$$

Da Eq. (D.16), segue que

$$\begin{aligned} \mathcal{I} &= \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-z^2}}{1+az} dz + \frac{b}{a} \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-z^2}}{1-bz} dz \\ &= \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\cos^2 \theta}{1+a \sin \theta} d\theta + \frac{b}{a} \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\cos^2 \theta}{1-b \sin \theta} d\theta \quad . \end{aligned}$$

Definindo

$$H(x) \equiv \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\cos^2 \theta}{1 + x \sin \theta} d\theta \quad , \quad (\text{D.18})$$

podemos escrever

$$\mathcal{I} = \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1} H(a) + \frac{b}{a} \left(1 + \frac{b}{a}\right)^{-1} H(-b) \quad . \quad (\text{D.19})$$

Cálculo da integral $H(x)$

A integral (D.18) pode ser calculada a partir da substituição de Weierstrass $t = \tan(\theta/2)$. Temos

$$\sin \theta = \frac{2t}{1+t^2} \quad , \quad \cos \theta = \frac{1-t^2}{1+t^2} \quad , \quad d\theta = \frac{2dt}{1+t^2} \quad .$$

Na nova variável, a integral (D.18) se escreve

$$H(x) = \int_{-1}^1 \frac{2(t^4 - 2t^2 + 1)}{(t^2 + 2xt + 1)(1+t^2)^2} dt \quad . \quad (\text{D.20})$$

Decompondo o integrando em frações parciais, obtemos para $x \neq 0$

$$\frac{2(t^4 - 2t^2 + 1)}{(t^2 + 2xt + 1)(1+t^2)^2} = \frac{2(1-x^2)}{x^2} \frac{1}{t^2 + 2xt + 1} - \frac{1}{x} \frac{4t}{(t^2 + 1)^2} + \frac{2}{x^2} \frac{1}{t^2 + 1} \quad . \quad (\text{D.21})$$

Levando (D.21) na Eq. (D.20), obtemos

$$\begin{aligned} H(x) &= -\frac{2(1-x^2)}{x^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{t^2 + 2xt + 1} - \frac{2}{x} \int_{-1}^1 \frac{2tdt}{(t^2 + 1)^2} + \frac{2}{x^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{1+t^2} \\ &= -\frac{2}{x^2} (1-x^2) \int_{-1}^1 \frac{dt}{(1-x^2) + (t+x)^2} + \left[\frac{2}{x} \frac{1}{t^2 + 1} + \frac{2}{x^2} \tan^{-1} t \right]_{t=-1}^{t=1} \quad . \end{aligned}$$

Como precisamos calcular $H(x)$ apenas para $x = a$ e $x = -b$ (Eq. (D.19)) e como $0 < a < 1$ e $0 < b < 1$ (Eqs. (D.13) e (D.14)), temos $0 < |x| < 1$, logo

$$\begin{aligned}
H(x) &= -\frac{2}{x^2} \int_{-1}^1 \frac{dt}{1 + \left(\frac{t+x}{\sqrt{1-x^2}}\right)^2} + \left[\frac{2}{x} \frac{1}{t^2 + 1} + \frac{2}{x^2} \tan^{-1} t \right]_{t=-1}^{t=1} \\
&= \left[-\frac{2}{x^2} \sqrt{1-x^2} \tan^{-1} \left(\frac{t+x}{\sqrt{1-x^2}} \right) \right]_{t=-1}^{t=1} + \frac{\pi}{x^2} \\
&= -\frac{2}{x^2} \sqrt{1-x^2} \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{1+x}{1-x}} \right) - \frac{2}{x^2} \sqrt{1-x^2} \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{1-x}{1+x}} \right) + \frac{\pi}{x^2} .
\end{aligned}$$

Como $\tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{1+x}{1-x}} \right) = \frac{\pi}{2} - \tan^{-1} \left(\sqrt{\frac{1-x}{1+x}} \right)$, obtemos (para $0 < |x| < 1$)

$$H(x) = \frac{\pi}{x^2} \left(1 - \sqrt{1-x^2} \right) . \quad (\text{D.22})$$

Cálculo da corrente

Das Eqs. (D.19) e (D.22), obtemos

$$\mathcal{I} = \frac{\pi}{a^2} \left(1 + \frac{b}{a} \right)^{-1} \left(1 - \sqrt{1-a^2} \right) + \frac{\pi}{ab} \left(1 + \frac{b}{a} \right)^{-1} \left(1 - \sqrt{1-b^2} \right) .$$

As Eqs. (D.1) e (D.17) implicam

$$J_{cl} = \frac{k_B(T_L - T_R) \zeta'^2 ab(1+r)^2 \chi [1 + \chi - 2\zeta'^2 \chi(W - A)]}{2\pi r (\zeta_< + \zeta_>)} \mathcal{I} .$$

Das duas últimas equações, obtemos

$$\begin{aligned}
J_{cl} &= \frac{k_B(T_L - T_R) \zeta'^2 (1+r)^2 [1 + \chi^{-1} - 2\zeta'^2(W - A)]}{2r \chi^{-2} (\zeta_< + \zeta_>)} \left[1 - \frac{\sqrt{1-a^2}}{1 + \frac{a}{b}} - \frac{a}{1 + \frac{a}{b}} \sqrt{\frac{1}{b^2} - 1} \right] \\
&= \frac{k_B(T_L - T_R) [1 + \zeta'^2(m_< + m_>) - 2\zeta'^2(W - A)]}{2\zeta'^2 (\zeta_< + \zeta_>) m_< m_>} \left[1 - \frac{\sqrt{1-a^2}}{1 + \frac{a}{b}} - \frac{a}{1 + \frac{a}{b}} \sqrt{\frac{1}{b^2} - 1} \right] .
\end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

Das Eqs. (D.11) e (D.12), deduzimos que

$$1 + \frac{a}{b} = \frac{(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2}}{1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2}} . \quad (\text{D.24})$$

Da Eq. (D.11), segue que

$$\begin{aligned} \sqrt{1 - a^2} &= \sqrt{1 - 4r^2 \left[1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right]^{-2}} \\ &= \frac{\sqrt{\left[r^2 - 2r + 1 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right] \left[r^2 + 2r + 1 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right]}}{1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2}} \\ &= \frac{\sqrt{\left[(1-r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right] \left[(1+r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right]}}{1 + r^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2}} . \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

Das Eqs. (D.24) e (D.25), segue que

$$\frac{\sqrt{1 - a^2}}{1 + \frac{a}{b}} = \frac{\sqrt{\left[(1-r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right] \left[(1+r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2} \right]}}{(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2}} .$$

Usando a Eq. (D.9) e lembrando que $r = \frac{m_<}{m_>}$ (Eq. (D.7)), obtemos

$$\frac{\sqrt{1 - a^2}}{1 + \frac{a}{b}} = \frac{\zeta'^4 \sqrt{[(m_> - m_<)^2 - 4(W-A)^2] [(m_> + m_<)^2 - 4(W-A)^2]}}{[1 + \zeta'^2(m_< + m_>)]^2 - 4\zeta'^4(W-A)^2} . \quad (\text{D.26})$$

Das Eqs. (D.11) e (D.24), obtemos

$$\frac{a}{1 + \frac{a}{b}} = \frac{2r}{(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_>^2}} . \quad (\text{D.27})$$

Da Eq. (D.12), segue que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{b^2} - 1 &= \frac{1}{4r^2} [(1 + \chi)^2 (1 + r^2 + 2r) - (1 + r^2)]^2 - 1 \\
&= \frac{1}{4r^2} \{ (1 + r^2) [(1 + \chi)^2 - 1] + 2r (1 + \chi)^2 \}^2 - 1 \\
&= \frac{1}{4r^2} [(1 + r^2)\chi (2 + \chi) + 2r\chi (2 + \chi) + 2r]^2 - 1 \\
&= \frac{1}{4r^2} [(r + 1)^2\chi (2 + \chi) + 2r]^2 - 1 \\
&= \frac{1}{4r^2} (r + 1)^2\chi (2 + \chi) [4r + (r + 1)^2\chi (2 + \chi)] \quad .
\end{aligned}$$

Lembrando que $r = \frac{m_{<}}{m_{>}}$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\frac{1}{b^2} - 1 &= \frac{1}{4r^2} \frac{(m_{<} + m_{>})^2}{m_{>}^2} \chi (2 + \chi) \left[\frac{4m_{<}m_{>}}{m_{>}^2} + \frac{(m_{<} + m_{>})^2}{m_{>}^2} \chi (2 + \chi) \right] \\
&= \frac{1}{4m_{<}^2 m_{>}^2} (m_{<} + m_{>})^2 \chi (2 + \chi) [4m_{<}m_{>} + (m_{<} + m_{>})^2 \chi (2 + \chi)] \quad .
\end{aligned}$$

Usando a Eq. (D.9), obtemos

$$\frac{1}{b^2} - 1 = \frac{m_{<} + m_{>}}{4 \zeta'^4 m_{<}^2 m_{>}^2} (2 + \chi) [4m_{<}m_{>}\zeta'^2 + (m_{<} + m_{>}) (2 + \chi)] \quad ,$$

logo

$$\begin{aligned}
\sqrt{\frac{1}{b^2} - 1} &= \frac{1}{2m_{<}m_{>}\zeta'^2} \sqrt{(m_{<} + m_{>}) (2 + \chi) [4m_{<}m_{>}\zeta'^2 + (m_{<} + m_{>}) (2 + \chi)]} \\
&= \frac{1}{2m_{<}m_{>}\zeta'^4} \sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})] [4m_{<}m_{>}\zeta'^4 + 1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})]} \\
&= \frac{1}{2r m_{>}^2 \zeta'^4} \sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})] [4m_{<}m_{>}\zeta'^4 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>}) + 1]} \quad ,
\end{aligned}$$

portanto

$$\sqrt{\frac{1}{b^2} - 1} = \frac{1}{2r m_{>}^2 \zeta'^4} \sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})] (1 + 2\zeta'^2 m_{<}) (1 + 2\zeta'^2 m_{>})} \quad . \quad (D.28)$$

Das Eqs. (D.27) e (D.28), segue que

$$\frac{a}{1 + \frac{a}{b}} \sqrt{\frac{1}{b^2} - 1} = \frac{\sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})] (1 + 2\zeta'^2 m_{<}) (1 + 2\zeta'^2 m_{>})}}{m_{>}^2 \zeta'^4 \left[(1 + \chi)^2 (1 + r)^2 - \frac{4(W-A)^2}{m_{>}^2} \right]} .$$

Usando a Eq. (D.9) e lembrando que $r = \frac{m_{\leq}}{m_{>}}$ (Eq. (D.7)), obtemos

$$\frac{a}{1 + \frac{a}{b}} \sqrt{\frac{1}{b^2} - 1} = \frac{\sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})] (1 + 2\zeta'^2 m_{<}) (1 + 2\zeta'^2 m_{>})}}{[1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>})]^2 - 4\zeta'^4(W - A)^2} . \quad (\text{D.29})$$

Levando as expressões (D.26) e (D.29) na Eq. (D.23), obtemos finalmente

$$J_{cl} = \frac{k_B(T_L - T_R)}{2m_{<}m_{>}\zeta'^2(\zeta_{<} + \zeta_{>})} \left\{ 1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) - 2\zeta'^2(W - A) - \right. \\ \left. - \frac{\zeta'^4 \sqrt{[(m_{>} - m_{<})^2 - 4(W - A)^2] [(m_{>} + m_{<})^2 - 4(W - A)^2]}}{1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) + 2\zeta'^2(W - A)} - \right. \\ \left. - \frac{\sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_{<} + m_{>})] (1 + 2\zeta'^2 m_{<}) (1 + 2\zeta'^2 m_{>})}}{1 + \zeta'^2(m_{<} + m_{>}) + 2\zeta'^2(W - A)} \right\} ,$$

i.e.,

$$J_{cl} = \frac{k_B(T_L - T_R)}{2m_1 m_2 \zeta'^2(\zeta_L + \zeta_R)} \left\{ 1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) - 2\zeta'^2(W - A) - \right. \\ \left. - \frac{\zeta'^4 \sqrt{[(m_1 - m_2)^2 - 4(W - A)^2] [(m_1 + m_2)^2 - 4(W - A)^2]}}{1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) + 2\zeta'^2(W - A)} - \right. \\ \left. - \frac{\sqrt{[1 + 2\zeta'^2(m_1 + m_2)] (1 + 2\zeta'^2 m_1) (1 + 2\zeta'^2 m_2)}}{1 + \zeta'^2(m_1 + m_2) + 2\zeta'^2(W - A)} \right\} , \quad (\text{D.30})$$

onde lembramos (cf. Eqs. (2.181), (2.176), (2.178) e (2.179)) que

$$\begin{aligned}\zeta' &= \sqrt{\frac{\zeta_L \zeta_R}{1 + \zeta_L \zeta_R m_1 m_2 \omega_0^2}} \quad , \\ W &= \frac{\zeta_L m_1 + \zeta_R m_2}{\zeta_L + \zeta_R} \quad , \\ A &= \frac{m_1 + m_2}{2} \quad .\end{aligned}$$

Apêndice E

Cálculo de $e^{-\tau\mathcal{A}}$

Neste apêndice, mostraremos os passos para o cálculo da exponencial $e^{-\tau\mathcal{A}}$. Primeiramente, será necessário calcularmos as potências da matriz $\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ \mathcal{M} & \Gamma \end{pmatrix}$.

Como todos os blocos $N \times N$ da matriz \mathcal{A} são diagonais e invertíveis, podemos tratá-los como números. Desta forma, podemos provisoriamente tratar a matriz \mathcal{A} como uma matriz 2×2 , a fim de obter uma “decomposição espectral” para a mesma.

Os “autovalores” da matriz \mathcal{A} são

$$\alpha_{\pm} = \frac{\Gamma}{2} \pm \rho \quad , \quad (\text{E.1})$$

sendo ρ a matriz diagonal

$$\rho = \left[\left(\frac{\Gamma}{2} \right)^2 - \mathcal{M} \right]^{1/2} \quad . \quad (\text{E.2})$$

Os “autovetores” de α_{\pm} são, respectivamente,

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mp} \\ -\mathcal{M} \end{pmatrix} \quad .$$

A matriz \mathcal{A} pode ser “diagonalizada” através da transformação de similaridade

$$\mathcal{A} = V \begin{pmatrix} \alpha_{-} & 0 \\ 0 & \alpha_{+} \end{pmatrix} V^{-1} \quad , \quad (\text{E.3})$$

onde

$$V = \begin{pmatrix} \alpha_+ & \alpha_- \\ -\mathcal{M} & -\mathcal{M} \end{pmatrix} . \quad (\text{E.4})$$

A inversa da matriz V é dada por

$$V^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\rho^{-1} & \frac{1}{2}\alpha_- (\mathcal{M}\rho)^{-1} \\ -\frac{1}{2}\rho^{-1} & -\frac{1}{2}\alpha_+ (\mathcal{M}\rho)^{-1} \end{pmatrix} . \quad (\text{E.5})$$

Da Eq. E.3, obtemos a n -ésima potência da matriz \mathcal{A} ,

$$\mathcal{A}^n = V \begin{pmatrix} \alpha_-^n & 0 \\ 0 & \alpha_+^n \end{pmatrix} V^{-1} . \quad (\text{E.6})$$

Observando que $\alpha_+\alpha_- = (\Gamma/2)^2 - \rho^2 = \mathcal{M}$ e usando as Eqs. (E.4)-(E.6), encontramos

$$\mathcal{A}^n = \begin{pmatrix} \alpha_-^n \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ & \alpha_-^n \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\alpha_-^n \frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -\alpha_-^n \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \alpha_+^n \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- & \alpha_+^n \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\alpha_+^n \frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -\alpha_+^n \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ \end{pmatrix} .$$

Desta última equação, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{(-\tau\mathcal{A})^n}{n!} &= \begin{pmatrix} \frac{(-\tau\alpha_-)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ & \frac{(-\tau\alpha_-)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{(-\tau\alpha_-)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -\frac{(-\tau\alpha_-)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- \end{pmatrix} - \\ &\quad - \begin{pmatrix} \frac{(-\tau\alpha_+)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- & \frac{(-\tau\alpha_+)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{(-\tau\alpha_+)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -\frac{(-\tau\alpha_+)^n}{n!} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Somando ambos os lados desta equação de $n = 0$ até ∞ , obtemos

$$e^{-\tau\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} e^{-\tau\alpha_-} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ & e^{-\tau\alpha_-} \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -e^{-\tau\alpha_-} \frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -e^{-\tau\alpha_-} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} e^{-\tau\alpha_+} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- & e^{-\tau\alpha_+} \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -e^{-\tau\alpha_+} \frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -e^{-\tau\alpha_+} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ \end{pmatrix} ,$$

ou seja,

$$e^{-\tau\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} e^{-\tau\alpha_-} & 0 \\ 0 & e^{-\tau\alpha_-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ & \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -\frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- \end{pmatrix} - \\ - \begin{pmatrix} e^{-\tau\alpha_+} & 0 \\ 0 & e^{-\tau\alpha_+} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_- & \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{1}{2}\rho^{-1}\mathcal{M} & -\frac{1}{2}\rho^{-1}\alpha_+ \end{pmatrix} .$$

Substituindo as expressões dos autovalores α_{\pm} (Eq. (E.1)), finalmente obtemos

$$e^{-\tau\mathcal{A}} = \begin{pmatrix} e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}-\rho)} & 0 \\ 0 & e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}-\rho)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} + \frac{1}{2}I & \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{1}{2}\mathcal{M}\rho^{-1} & -\frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} + \frac{1}{2}I \end{pmatrix} - \\ - \begin{pmatrix} e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}+\rho)} & 0 \\ 0 & e^{-\tau(\frac{\Gamma}{2}+\rho)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} - \frac{1}{2}I & \frac{1}{2}\rho^{-1} \\ -\frac{1}{2}\mathcal{M}\rho^{-1} & -\frac{1}{4}\Gamma\rho^{-1} - \frac{1}{2}I \end{pmatrix} . \quad (\text{E.7})$$

Referências Bibliográficas

- [1] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, e L. Rey-Bellet. Fourier law: A Challenge to Theorists. *Mathematical Physics 2000*, 2001.
- [2] S. Lepri, R. Livi, e A. Politi. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Phys. Rep.* **377**, 1 (2003).
- [3] A. Dhar. Heat transport in low-dimensional systems. *Adv. Phys.* **57**, 457 (2008).
- [4] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, e E. Lieb. Properties of a Harmonic Crystal in a Stationary Nonequilibrium State. *J. Math. Phys.* **8**, 1073 (1967).
- [5] J. Bricmont e A. Kupiainen. Fourier's Law from Closure Equations. *Phys. Rev. Lett.* **98**, 214301 (2007).
- [6] T. Prosen e D. K. Campbell. Momentum Conservation Implies Anomalous Energy Transport in 1D Classical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2857 (2000).
- [7] C. Giardinà, R. Livi, A. Politi, e M. Vassalli. Finite Thermal Conductivity in 1D Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2144 (2000).
- [8] O. Narayan e S. Ramaswamy. Anomalous Heat Conduction in One-Dimensional Momentum-Conserving Systems. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 200601 (2002).
- [9] G. Basile, C. Bernardin, e S. Olla. Momentum Conserving Model with Anomalous Thermal Conductivity in Low Dimensional Systems. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 204303 (2006).
- [10] M. Bolsterli, M. Rich, e W. M. Visscher. Simulation of Nonharmonic Interactions in a Crystal by Self-Consistent Reservoirs. *Phys. Rev. A* **1**, 1086 (1970).

- [11] F. Bonetto, J. L. Lebowitz e J. Lukkarinen. Fourier's Law for a Harmonic Crystal with Self-Consistent Stochastic Reservoirs. *J. Stat. Phys.* **116**, 783 (2004).
- [12] W. M. Visscher e M. Rich. Stationary nonequilibrium properties of a quantum-mechanical lattice with self-consistent reservoirs. *Phys. Rev. A* **12**, 675 (1975).
- [13] M. Terraneo, M. Peyrard, e G. Casati. Controlling the Energy Flow in Nonlinear Lattices: A Model for a Thermal Rectifier. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 094302 (2002).
- [14] B. Li, L. Wang e G. Casati. Thermal Diode: Rectification of Heat Flux. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 184301 (2004).
- [15] B. Hu, L. Yang e Y. Zhang. Asymmetric Heat Conduction in Nonlinear Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 124302 (2006).
- [16] C. W. Chang, D. Okawa, A. Majumdar e A. Zettl. Solid-State Thermal Rectifier. *Science* **314**, 1121 (2006).
- [17] A. Dhar e J. L. Lebowitz. Effect of Phonon-Phonon Interactions on Localization. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 134301 (2008).
- [18] B. Li, G. Casati, J. Wang, e T. Prosen. Fourier Law in the Alternate-Mass Hard-Core Potential Chain. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 254301 (2004).
- [19] A. Dhar. Heat Conduction in a One-Dimensional Gas of Elastically Colliding Particles of Unequal Masses. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3554 (2001).
- [20] A. Dhar e D. Roy. Heat Transport in Harmonic Lattices. *J. Stat. Phys.* **125**, 805 (2006).
- [21] D. Roy e A. Dhar. Heat transport in ordered harmonic lattices. *J. Stat. Phys.* **131**, 535 (2008).
- [22] A. Dhar e B. S. Shastry. Quantum transport using the Ford-Kac-Mazur formalism. *Phys. Rev. B* **67**, 195405 (2003).
- [23] A. Casher e J. L. Lebowitz. Heat Flow in Regular and Disordered Harmonic Chains. *J. Math. Phys.* **12**, 1701 (1971).

- [24] G. W. Ford, M. Kac, e P. Mazur. Statistical Mechanics of Assemblies of Coupled Oscillators *J. Math. Phys.* **6**, 504 (1965).
- [25] U. Zürcher e P. Talkner. Quantum Mechanical Harmonic Chain Attached to Heat Baths I: Equilibrium Properties. *Phys. Rev. A* **42**, 3267 (1990); U. Zürcher e P. Talkner. Quantum Mechanical Harmonic Chain Attached to Heat Baths II: Nonequilibrium Properties. *Phys. Rev. A* **42**, 3278 (1990).
- [26] B. Øksendal. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications*. Springer, 6a edição, 2003.
- [27] G. Parisi. *Statistical Field Theory*. Addison-Wesley, 1988. Cap. 19, pp. 325-337.
- [28] E. Pereira, R. B. Solha. Some properties of the thermal conductivity of chains of oscillators. *Phys. Rev. E* **81**, 062101 (2010).
- [29] E. Pereira, L. M. Santana, e R. Ávila. Heat-flow properties of systems with alternate masses or alternate on-site potentials. *Phys. Rev. E* **84**, 011116 (2011).
- [30] A. Francisco Neto, H. C. F. Lemos, e E. Pereira. Heat conduction in quantum harmonic chains with alternate masses and self-consistent thermal reservoirs. *Phys. Rev. E* **76**, 031116 (2007).
- [31] F. Barros, H. C. F. Lemos, e E. Pereira. Changing the heat conductivity: an analytical study. *Phys. Rev. E* **74**, 052102 (2006).
- [32] E. Pereira e R. Falcão. Nonequilibrium statistical mechanics of anharmonic crystals with self-consistent stochastic reservoirs. *Phys. Rev. E* **70**, 046105 (2004).
- [33] E. Pereira e H. C. F. Lemos. Symmetry properties of heat conduction in inhomogeneous materials. *Phys. Rev. E* **78**, 031108 (2008).
- [34] Emmanuel Pereira. Graded anharmonic crystals as genuine thermal diodes: Analytical description of rectification and negative differential thermal resistance. *Phys. Rev. E* **82**, 040101(R) (2010).
- [35] H. C. F. Lemos. *Estudo analítico da condutividade térmica em modelos microscópicos hamiltonianos fora do equilíbrio*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2008.

- [36] R. B. Solha. *Condução de calor em cadeias de osciladores harmônicos com massas alternadas*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.