Operatore stazionario di non equilibrio

Teoria della risposta lineare

Teoria inventata per studiare la risposta di un sistema all'equilibrio t d ad una perturbazione esterna. In generale, sia $\hat{A}$ "grande" e $\hat{B}$ "piccolo"

Se $[\hat{A},\hat{B}]=0$ $\quad e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} \simeq e^{\hat{A}}\left(I + \hat{B} + \frac{\hat{B}^2}{2} + \quad \right)$

Se $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ invece

$$\boxed{e^{\hat{A}+\hat{B}} = \left[I + \int_0^1 dz\, e^{z(\hat{A}+\hat{B})}\hat{B}\, e^{-z\hat{A}} \right] e^{\hat{A}}}$$

Identità di Kubo sempre vera

La formula può essere sviluppata per iterazione e conterrà potenze crescenti di $\hat{B}$

Fermandoci all'ordine più basso in $\hat{B}$

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} \cong \left[I + \int_0^1 dz\, e^{z\hat{A}}\hat{B}\, e^{-z\hat{A}} \right] e^{\hat{A}} = e^{\hat{A}} + \int_0^1 dz\, e^{z\hat{A}}\hat{B} e^{-z\hat{A}} \quad e^{\hat{A}}$$

Chiaramente è applicabile ad un operatore densità in cui si può distinguere un termine principale e uno secondario

$$\hat{\rho} = \frac{e^{\hat{A}+\hat{B}}}{Z} \qquad Z = tr(e^{\hat{A}+\hat{B}})$$

$$tr(e^{\hat{A}+\hat{B}}) \cong (\text{al } 1^\circ \text{ ordine in } \hat{B}) = tr(e^{\hat{A}}) + \int_0^1 dz\, tr(e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}}e^{\hat{A}}) =$$

$$tr(e^{\hat{A}}) + tr(\hat{B}e^{\hat{A}})$$

La si sarebbe potuta ricavare anche sviluppando $e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{[\hat{A},\hat{B}]/2}$

$$\hat{\rho} = \frac{e^{\hat{A}+\hat{B}}}{tr(e^{\hat{A}+\hat{B}})} \simeq \frac{e^{\hat{A}+\hat{B}}}{tr(e^{\hat{A}})+tr(e^{\hat{A}}\hat{B})} = \frac{e^{\hat{A}+\hat{B}}}{Z_A + Z_A\langle\hat{B}\rangle_A} \simeq \frac{e^{\hat{A}+\hat{B}}}{Z_A}(1-\langle\hat{B}\rangle_A)$$

se $\langle\hat{B}\rangle \ll 1$

Mettendo tutto insieme

$$\boxed{\hat{\rho} \simeq (1-\langle\hat{B}\rangle_A)\left[\hat{\rho}_A + \int_0^1 dz\, e^{z\hat{A}}\hat{B}e^{-z\hat{A}}\hat{\rho}_A\right]}$$

$$\hat{\rho}_A = \frac{e^{\hat{A}}}{tr\, e^{\hat{A}}} = \frac{e^{\hat{A}}}{Z_A}$$

Operatore stazionario di non-equilibrio

$\hat{\rho}_{LE}$ non è indipendente dal "tempo" $\qquad \hat{\rho}_{LE} = \dfrac{e^{-\int_{\Sigma_\tau} d\Sigma_\mu \hat{T}^{\mu\nu}\beta_\nu - \zeta \hat{j}^\mu}}{Z}$

$$\partial_\mu \hat{\rho}_{LE} = \partial_\mu \tau \frac{d\hat{\rho}_{LE}}{d\tau} = \frac{1}{N} n_\mu \frac{d\hat{\rho}_{LE}}{d\tau} = \frac{n_\mu}{N} \lim_{\Delta\tau \to 0} \frac{\hat{\rho}_{LE}(\tau+\Delta\tau) - \hat{\rho}_{LE}(\tau)}{\Delta\tau}$$

$$\hat{\rho}_{LE}(\tau+\Delta\tau) = \frac{\exp\left[\hat{A}(\tau) + \frac{d\hat{A}}{d\tau}\Delta\tau\right]}{\operatorname{tr}\left(e^{\hat{A}(\tau) + d\hat{A}/d\tau \, \Delta\tau}\right)} \qquad \hat{A} = -\int_{\Sigma(\tau)} d\Sigma_\mu \hat{T}^{\mu\nu}\beta_\nu - \zeta \hat{j}^\mu$$

Si può usare l'identità di Kubo

$$\hat{\rho}_{LE}(\tau+\Delta\tau) \cong \left(1 - \left\langle \frac{d\hat{A}}{d\tau} \right\rangle_{LE} \Delta\tau\right)\hat{\rho}(\tau) + \int_0^1 dz\, e^{z\hat{A}}\left(\frac{d\hat{A}}{d\tau}\right)\Delta\tau\, e^{-z\hat{A}}\, \hat{\rho}_{LE}(\tau)$$

$$\Rightarrow \frac{d\hat{\rho}_{LE}}{d\tau} = -\left\langle \frac{d\hat{A}}{d\tau}\right\rangle_{LE} \hat{\rho}_{LE}(\tau) + \int_0^1 dz\, e^{z\hat{A}}\left(\frac{d\hat{A}}{d\tau}\right) e^{-z\hat{A}}\, \hat{\rho}_{LE}(\tau)$$

$$\frac{d\hat{A}}{d\tau} = -\int d\Sigma \, n\cdot\xi \left(\hat{T}^{\mu\nu} \partial_\mu \beta_\nu - \hat{j}^\mu \partial_\mu \zeta \right) + \text{termini di bordo} \qquad \xi \equiv \frac{\partial x^\mu}{\partial \tau}$$

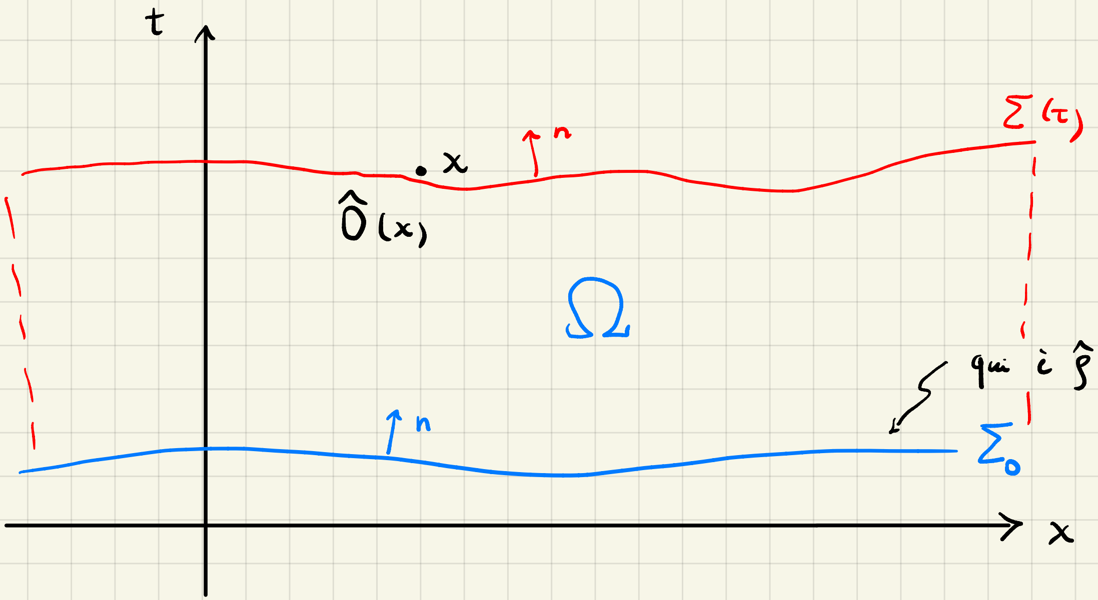
Per avere un operatore indipendente da τ occorre inserire quello "iniziale". Nella rappresentazione di Heisenberg, $\hat{\rho}$ è fisso ed è determinato dalla condizione iniziale del problema quantistico.

Es: diffusione di particelle $\hat{\rho}$ = stato di due particelle asintoticamente libere con p dati

In un problema di materia all'equilibrio locale, lo stato che la rappresenta è

$$\boxed{\hat{\rho} = \frac{\exp\left[- \int_{\Sigma_0} d\Sigma_\mu \, \hat{T}^{\mu\nu} \beta_\nu - \zeta \hat{j}^\mu \right]}{Z}}$$

per una certa ipersuperficie Σ_0 assegnata (ipersuperficie di Cauchy)



Si può dunque cercare di valutare

$$O(x) = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{O}(x)\right)$$

il che non è semplice dato che $\hat{\rho}$ è definito da un integrale su Σ_0 distante da x.

Teorema di Gauss :

$$\int_{\Sigma_0} d\Sigma_\mu\left(\hat{T}^{\mu\nu}\beta_\nu - \zeta\,\hat{j}^\mu\right) = \int_{\Sigma_\tau} d\Sigma_\mu\left(\hat{T}^{\mu\nu}\beta_\nu - \zeta\,\hat{j}^\mu\right) - \int d\Omega\ \hat{T}^{\mu\nu}\partial_\mu\beta_\nu - \hat{j}^\mu\partial_\mu\zeta$$

$$\Rightarrow\quad \boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{Z}\exp\Big[\underbrace{-\int_{\Sigma_\tau} d\Sigma_\mu\left(\hat{T}^{\mu\nu}\beta_\nu - \zeta\,\hat{j}^\mu\right)}_{\text{termine grande } \hat{A}} + \underbrace{\int d\Omega\left(\hat{T}^{\mu\nu}\partial_\mu\beta_\nu - \partial_\mu\zeta\,\hat{j}^\mu\right)}_{\text{termine piccolo } \hat{B}}\Big]}$$

La suddivisione in grande e piccolo dipende dalla dinamica del sistema.
Se ci si mantiene "vicini" all' equilibrio termodinamico locale, allora grande è il primo termine e piccolo il secondo. Deve essere controllato a posteriori.

CALCOLO DI VALORI MEDI

Usando la teoria della risposta lineare, si nota che

$$\hat{\rho} \cong \left(1 - \langle \hat{B} \rangle_{LE}\right) \hat{\rho}_{LE}(\tau) + \int_0^1 dz \, e^{z\hat{A}} \, \hat{B} \, e^{-z\hat{A}} \, \hat{\rho}_{LE}(\tau)$$

cioè $\hat{\rho}$ è approx. da $\hat{\rho}_{LE}$ se $\hat{B} \ll \hat{A}$

$$\hat{A} = -\int d\Sigma_\mu \hat{T}^{\mu\nu} \beta_\nu - \zeta \hat{j}^\mu$$

$$\hat{B} = \int d\Omega \left(\hat{T}^{\mu\nu} \partial_\mu \beta_\nu - \hat{j}^\mu \partial_\mu \zeta\right)$$

Dunque:

$$\langle \hat{O}(x) \rangle \cong \langle \hat{O}(x) \rangle_{LE} \left(1 - \langle \hat{B} \rangle_{LE}\right) + \int_0^1 dz \, \langle \hat{O}(x) e^{z\hat{A}} \, \hat{B} \, e^{-z\hat{A}} \rangle_{LE}$$

Vero!

Dunque

$$\langle \hat{O}(x)\rangle - \langle \hat{O}(x)\rangle_{LE} = \int d\Omega \int_0^1 dz \left\langle \hat{O}(x)\, e^{z\hat{A}}\left(\hat{T}^{\mu\nu}\partial_\mu \beta_\nu - \partial_\mu \zeta\, \hat{j}^\mu\right) e^{-z\hat{A}} \right\rangle_{LE} - \langle \hat{O}(x)\rangle_{LE} \langle \hat{B}\rangle_{LE}$$

Nel caso particolare che $\hat{O}(x) = \hat{T}^{\mu\nu}(x)$ si ha che

$$n_\mu(x)\left(\langle \hat{T}^{\mu\nu}(x)\rangle - \langle \hat{T}^{\mu\nu}(x)\rangle_{LE}\right) = 0 \longrightarrow \text{equazione vincolare che ci fornisce } \beta^\nu(x)_{(n)}$$

Inoltre, dall' equazione di produzione dell' entropia:

$$\partial_\mu S^\mu = \left(\langle \hat{T}^{\mu\nu}(x)\rangle - \langle \hat{T}^{\mu\nu}(x)\rangle_{LE}\right)\partial_\mu \beta_\nu + \dots$$

perciò il termine $\hat{B}$ ci dà le correzioni <u>dissipative</u> a $T^{\mu\nu}$

$$T^{\mu\nu}(x) = T^{\mu\nu}_{LE}(x) + \delta T^{\mu\nu}_{diss.}(x)$$

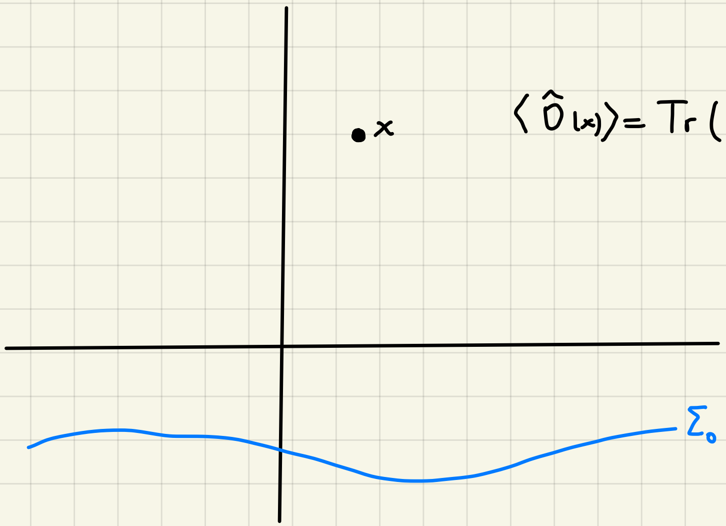
$$T^{\mu\nu} = T^{\mu\nu}_{LE}[n,\beta,\zeta] + \delta T^{\mu\nu}_{diss.}[\partial\beta,\partial\zeta, n]$$

Questa suddivisione si applica a qualsiasi operatore $\hat{O}(x)$, scriveremo sempre

$$\langle \hat{O}(x) \rangle = \langle \hat{O}(x) \rangle_{LE} + \delta O(x)_{diss.}$$

Semplicemente ponendo $\delta O_{diss.} \equiv \langle \hat{O}(x) \rangle - \langle \hat{O}(x) \rangle_{LE}$ ed è chiaro che $\delta O_{diss.} = 0$ se $\hat{B} = 0$

<u>NOTA</u> Il valore $\langle \hat{O}(x) \rangle$ dipende da x e Σ_0, ma non può dipendere da Σ_τ.



$$\langle \hat{O}(x) \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_{LE\,\Sigma_0} \hat{O}(x) \right)$$

La separazione tra un valore di equilibrio locale in x e un valore "dissipativo" dipende dalla scelta di Σ_τ passante per x, che è – a parte casi specifici – arbitraria.

Dunque la separazione nei due termini ha un certo grado di "incertezza", anche se la loro somma è obiettiva

$$O(x) = O(x)_{LE} + \delta O_{diss.}(x)$$

OSSERVAZIONE

La trattazione originale di Kubo (che si trova a p. 150 e seguenti nel suo libro Statistical Physics II "Non equilibrium statistical mechanics") riguarda un sistema all'equilibrio in cui viene accesa una perturbazione $\hat{V}$ dell'Hamiltoniana originale. Nella trattazione di Kubo si usa la rappresentazione di Schrödinger

$$i\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = [\hat{H}+\hat{V},\hat{\rho}_s] \quad \Rightarrow \quad \hat{\rho}_s(t) = \underbrace{e^{-i\hat{H}t}\,\hat{\rho}_s(0)\,e^{-i\hat{H}t}}_{\hat{\rho}_1(t)} - \underbrace{\int_0^t d\tau\; e^{-i(t-\tau)\hat{H}}\, i[\hat{V},\hat{\rho}_s]\, e^{i(t-\tau)\hat{H}}}_{\hat{\rho}_2(t)}$$

Infatti

$$\frac{d\hat{\rho}_s}{dt} = -i[\hat{H},\hat{\rho}_1] - i[\hat{H},\hat{\rho}_2] - i[\hat{V},\hat{\rho}_s] = -i[\hat{H},\hat{\rho}_s] \qquad \hat{\rho}_s(-\infty) = \frac{e^{-\hat{H}/T}}{Z}$$

Nel nostro caso non abbiamo una perturbazione esterna e il sistema NON è all'equilibrio globale inizialmente.