7.1 Modellsystem: harmonischer Oszillator

$$\boxed{\begin{aligned} x(\omega) &= \chi(\omega)\, F(\omega) \\ \text{mit } \chi(\omega) &= \frac{1}{m(\omega_0^2-\omega^2-2i\omega\gamma)} \\ &= \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \end{aligned}} \quad (7.2)$$

... dynamische Suszeptibilität
Antwortfunktion

NB: $[Fx]$ = Energie

- Greensche Funktion:

$$\left.\begin{aligned} \text{bel. Kraft: } F(t) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} F(\omega)\, e^{-i\omega t} \\ \text{Auslenkung: } x(t) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} x(\omega)\, e^{-i\omega t} \end{aligned}\right\} \text{Fouriertrafo (FT)}$$

$$(7.2) \xrightarrow[\text{der FT}]{\text{Faltungssatz}} \boxed{x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t')\, F(t')\, dt'} \quad (7.3)$$

$$\text{mit } \chi(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \chi(\omega)\, e^{-i\omega\tau}$$

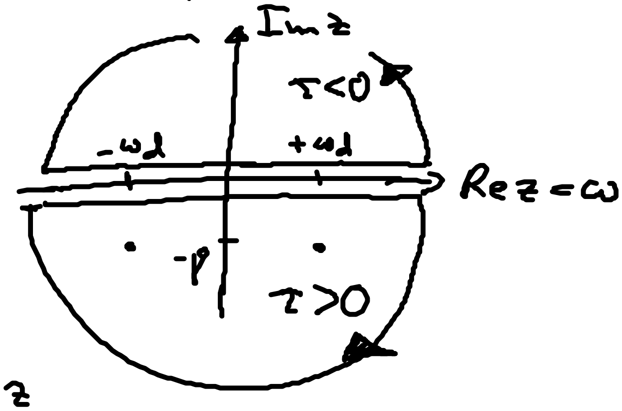
... Greensche Funktion von (7.1)

Bem: (i) $\chi(\tau)$ ist Lsg. von (7.1) für $F(t') = \delta(t')$

(ii) Kausalität: $\chi(\tau) = 0$ für $\tau < 0$!

- Bestimmung von $\chi(\tau)$: Integration im Komplexen

$$\boxed{\begin{aligned}\chi(\omega) &= \frac{1}{-m(\omega-\omega_+)(\omega-\omega_-)} \\ \text{mit } \omega_\pm &= -i\gamma \pm \omega_d \\ \omega_d &= \sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\end{aligned}} \quad (7.4)$$



$$\longrightarrow \chi(\tau) = \oint \frac{dz}{2\pi}\chi(z)e^{-iz\tau} - \underbrace{\int_{\frown} \dots dz}_{=0}$$

$$= 2\pi i \sum \mathrm{Res}\, \chi(z)$$

$$\longrightarrow \quad \begin{aligned}\tau<0&: \quad 0 \\ \tau>0&: \frac{i}{2m\omega_d} e^{-\gamma\tau}\left[e^{-i\omega_d\tau} - e^{i\omega_d\tau}\right]\end{aligned}$$

$$\longrightarrow \boxed{\chi(\tau) = \Theta(\tau)\frac{1}{m\omega_d}e^{-\gamma\tau}\sin\omega_d\tau} \quad (7.5)$$

Stufen-Fkt. $\Theta(\tau) = \begin{cases} 0, & \tau<0 \\ 1, & \tau>0\end{cases}$

- Energiedissipation: Sei $F(t) = \mathrm{Re}\left[\underbrace{F(\omega)}_{\in\mathbb{R}}e^{-i\omega t}\right]$

$$\longrightarrow x(t) = \mathrm{Re}\left[\chi(\omega)F(\omega)e^{-i\omega t}\right]$$

mittlere verrichtete Leistung von $F(t)$ am Oszillator in Periode $T=\frac{2\pi}{\omega}$

$$\bar{N} = \frac{1}{T}\int_0^T F(t)\,\dot{x}(t)\,dt$$

$$= \frac{1}{T}\int_0^T F(\omega)\cos\omega t\; Re\left[-i\omega\chi(\omega)F(\omega)(\cos\omega t - i\sin\omega t)\right]dt$$

$$= \frac{1}{T}\int_0^T F^2(\omega)\cos\omega t\left[\chi'(\omega)(-\omega)\sin\omega t + \omega\chi''(\omega)\cos\omega t\right]dt$$

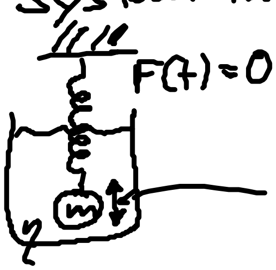
$$= F^2(\omega)\,\omega\,\chi''(\omega)\,\underbrace{\frac{1}{T}\int_0^T \cos^2(\underbrace{\omega t}_{x})\,dt}_{\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2 x\,dx = \frac{1}{2}}$$

$$\longrightarrow \boxed{\bar{N} = \frac{\omega}{2}F^2(\omega)\,\chi''(\omega)} \quad (7.6)$$

... die vom Oszillator ins Wärmebad dissipierte Energie! $\sim \chi''(\omega) = \mathrm{Im}\,\chi(\omega)$

- statistischen Mechanik: zwei Situationen

(1) System im thermisch GG:

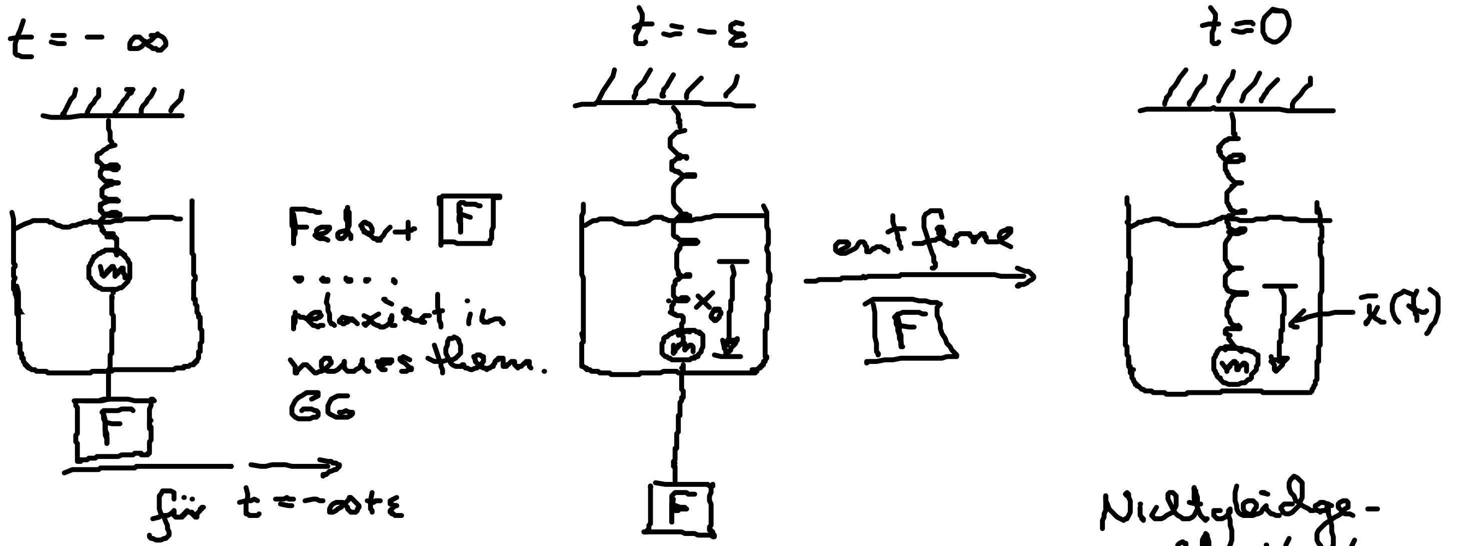


Hamiltonian: $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$

Zitterbewegung im Wärmebad um $\langle x\rangle = 0$:

$$C(t) = \langle x(0)\,x(t)\rangle$$

(2) Relaxation ins thermische GG:



Hamiltonian (Oszillator + Last)

$$H = H_0 \underbrace{- F x_0}_{\text{Last verliert an pot. Energie}}$$

Nichtgleichgewichtssituation: $\bar{x}(t)$ relaxiert ins therm. GG [s. Situation (1)]

7.2 Fluktuations-Dissipationstheorem I: Onsagersche Regressionshypothese

• Modellsystem: charakterisiert durch

(1) dynamische Suszeptibilität:

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta\bar{x}(\omega) &= \chi(\omega)\, F(\omega) \\ \Delta\bar{x}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t')\, F(t')\, dt' \\ \text{mit } \Delta\bar{x}(t) &= \bar{x}(t) - \langle x \rangle_0 \end{aligned}} \qquad (7.7)$$

(Mittelwert von x im therm. GG)

... allgemeinste lineare Relation zwischen generalisierter Kraft $F(t)$ und generalisierter Wegvariable $\Delta\bar{x}(t)$

<u>Bem:</u> 1: $\chi(t) = 0,\ t < 0$ ... Kausalität!

$\underline{2}$: $[Fx]$ = Energie

$\underline{3}$: $\boxed{\bar{N} = \frac{\omega}{2} F^2(\omega)\chi''(\omega)}$ (7.8)

... die von System in ein Wärmebad dissipierte Energie [Herleitung: wie für Gl. (7.6)]

(2) Hamiltonian $H_0(x)$

... Energie von Mikrozuständen mit Auslenkung x

(3) für konstante, von außen wirkende Kraft:

Störhamiltonian: $\boxed{\Delta H = -Fx}$ (7.9)

- Betrachte Relaxation ins thermische GG [vgl. Kap. 7.1]

(1) Präparation des Nicht-GG:

$t = -\infty$: lege konstante Kraft F an

$\longrightarrow$ $t = -\varepsilon$: konstante mittlere Auslenkung:

$\Delta\bar{x} = \bar{x}(0) - \langle x \rangle$

thermische Fluktuationen von $x(0)$ um $\bar{x}(0)$

(2) Nicht-GG-Dynamik:

$t = 0$: $F = 0 \longrightarrow$ Relaxation von $\bar{x}(0) \longrightarrow \langle x \rangle$

- Lösung:

(1) (7.7) $\longrightarrow$ $\Delta\bar{x}(t) = F\int_{-\infty}^{0} \chi(t-t')dt'$ (7.10)

(2) Onsagers Regressionshypothese

- Herleitung von (2):

(i) Anfangswert $\bar{x}(0)$:

$$\bar{x}(0) = \frac{\sum e^{-\beta(H_0+\Delta H)} x(0)}{\sum e^{-\beta(H_0+\Delta H)}}$$

(ii) zeitlicher Verlauf von $\bar{x}(t)$:

$$\bar{x}(t) = \frac{\sum e^{-\beta(H_0+\Delta H)}\, x(t)}{\sum e^{-\beta(H_0+\Delta H)}}$$

zeitliche Verlauf von $x(t)$ aufgrund mikroskopischer Dynamik mit Anfangswert $x(0)$

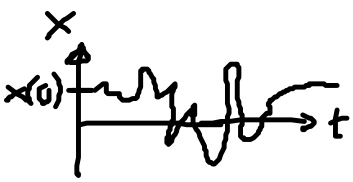
Wahrscheinlichkeit, mit der die Bahn $x(t)$ mit Anfangswert $x(0)$ vorkommt!

$$\xrightarrow{\Delta H \ll H_0} \quad \bar{x}(t) = \frac{\sum e^{-\beta H_0}(1-\beta \overset{-Fx(0)}{\Delta H}+\dots)\,x(t)}{\underbrace{\sum e^{-\beta H_0}(1-\beta\Delta H)}_{\sum e^{-\beta H_0}\left(1-\underbrace{\frac{\sum \beta \overset{-Fx}{\Delta H}\, e^{-\beta H_0}}{\sum e^{-\beta H_0}}}_{-\beta F\langle x\rangle}\right)}}$$

$$\left[\frac{1}{1+x}\approx 1-x\right] \approx \frac{1}{\sum e^{-\beta H_0}}\left[\sum e^{-\beta H_0}(1+\beta F x(0)\dots)\,x(t)\right]\left[1-\beta F\langle x\rangle\dots\right]$$

Führe ein:

$$\boxed{\langle x(0)\,x(t)\rangle = \frac{\sum e^{-\beta H_0}\, x(0)\,x(t)}{\sum e^{-\beta H_0}}} \quad (7.11)$$



... zeitliche Autokorrelationsfunktion

$$\longrightarrow \bar{x}(t) = \langle x\rangle + \beta F\left[\langle x(0)\,x(t)\rangle - \langle x\rangle^2\right] + O((\beta F)^2)$$

Führe ein:

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta x(t) &= x(t) - \langle x\rangle \\ C(t) &= \langle \Delta x(0)\,\Delta x(t)\rangle \\ &= \langle x(0)\,x(t)\rangle - \langle x\rangle^2 \end{aligned}} \quad (7.12)$$

NB: (1) $C(t\to\infty) = 0$

... Verlust von Korrelationen zwischen $\Delta x(0)$ und $\Delta x(t)$

(2) $C(t) = C(-t)$ (klar!)

(7.12) $\longrightarrow$ $$\boxed{\Delta \bar{x}(t) = C(t)\,\beta F + O((\beta F)^2)} \quad (7.13)$$

... Onsagers Regressionshypothese:
Eine Nicht-GG-Störung $\Delta \bar{x}(t)$ relaxiert wie die zeitliche Korrelation von $\Delta x(t)$ im therm. GG