

7.1 Modellsystem: harmonischer Oszillator

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

... dynamische Suszeptibilität
Antwortfunktion

NB: $[F \times] = \text{Energie}$

• Greensche Funktion:

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

(7.2) Faltungssatz
der FT

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t') F(t') dt' \quad (7.3)$$

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

... Greensche Funktion von (7.1)

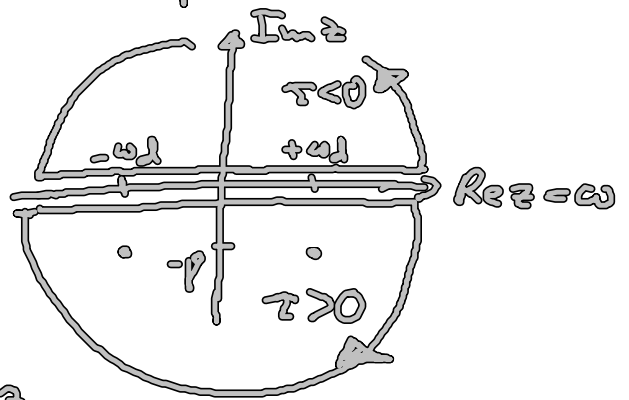
Bem: (i) $\chi(\tau)$ ist Lsg. von (7.1) für $F(t') = \delta(t')$

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

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

$$\chi(\omega) = \frac{1}{-m(\omega - \omega_+) (\omega - \omega_-)} \quad (7.4)$$

mit $\omega_{\pm} = -i\gamma \pm \omega_d$
 $\omega_d = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$



$$\begin{aligned} \rightarrow \chi(\tau) &= \oint \frac{dz}{2\pi} \chi(z) e^{-iz\tau} - \underbrace{\int \dots dz}_{=0} \\ &= 2\pi i \sum \text{Res} \chi(z) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$= F^2(\omega) \omega \chi''(\omega) \frac{1}{T} \int_0^T \underbrace{\cos^2(\omega t)}_x dt$$

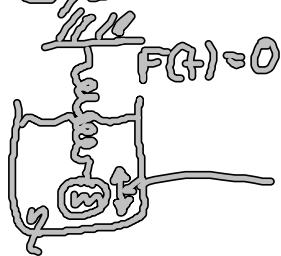
$$\underbrace{\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2 x dx = \frac{1}{2}}$$

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

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

• statistische Mechanik: zwei Situationen

(1) System im thermischen GG:

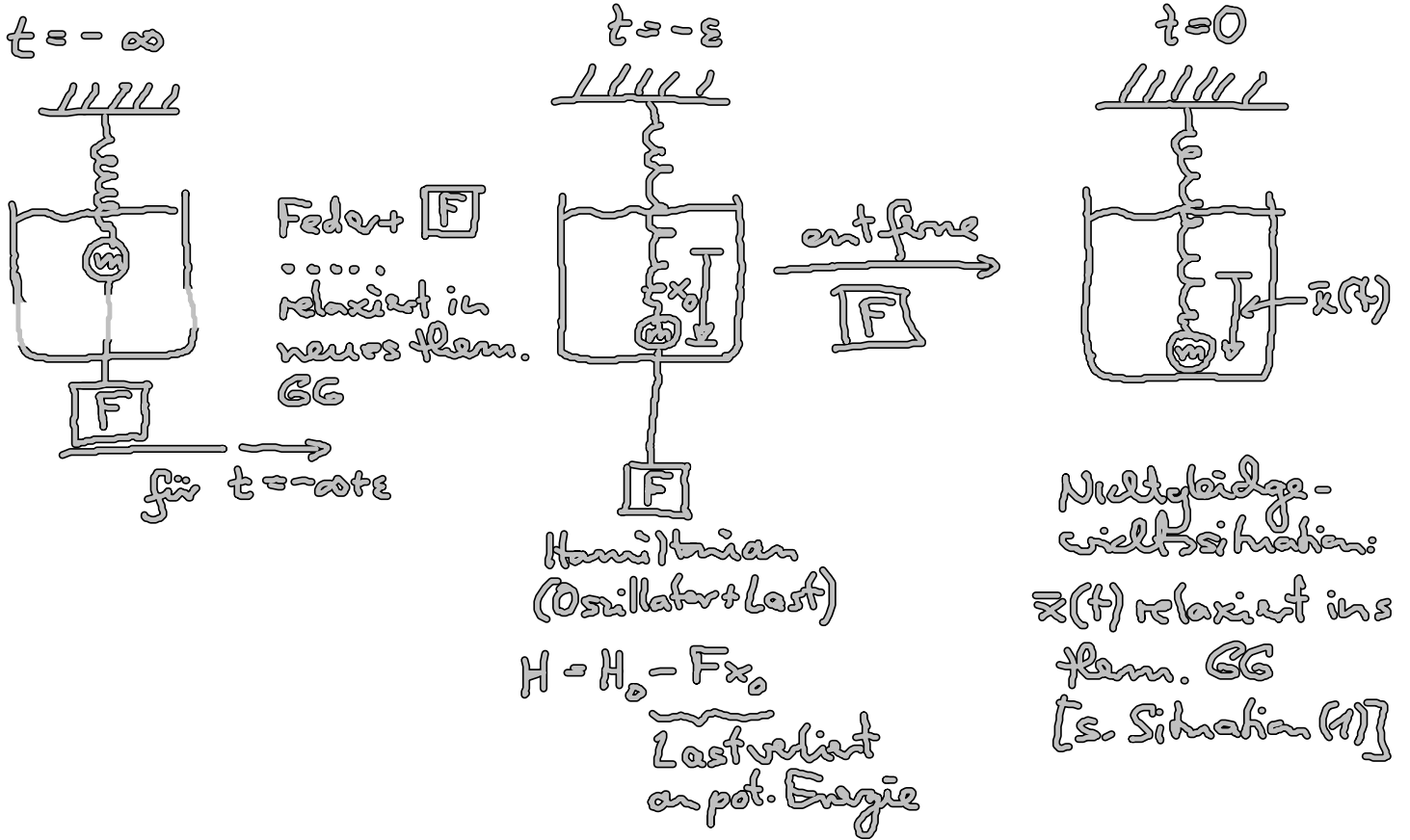


Hamiltonian: $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$

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

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

(2) Relaxation ins thermische GG:



7.2 Fluktuation-Dissipationstheorem I: Onsager'sche Regressionshypothese

- Modellsystem: charakterisiert durch
 (1) dynamische Suszeptibilität:

$$\Delta \bar{x}(\omega) = \chi(\omega) F(\omega) \quad (7.7)$$

$$\Delta \bar{x}(t) = \int_{-\infty}^t \chi(t-t') F(t') dt'$$

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

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

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

2: $\langle Fx \rangle = \text{Energie}$

3: $\bar{N} = \frac{\omega}{2} F^2 \chi''(\omega)$ (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: $\Delta H = -Fx$ (7.9)

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

(1) Präparation des Nicht-GG:

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

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

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

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

(2) Nicht-GG-Dynamik:

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

• Lösung:

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

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

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

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

$\Delta H \ll H_0$

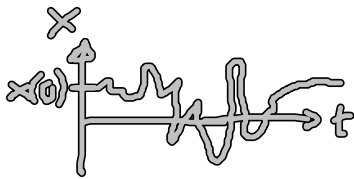
$$\bar{x}(t) = \frac{\sum e^{-\beta H_0} (1 - \beta \Delta H + \dots) x(t)}{\sum e^{-\beta H_0} (1 - \beta \Delta H)}$$

$$\sum e^{-\beta H_0} \left(1 - \frac{\sum \beta \Delta H e^{-\beta H_0}}{\sum e^{-\beta H_0}} \right)$$

$$\left[\frac{1}{1+x} \approx 1 - x \right]_1 \approx \frac{1}{\sum e^{-\beta H_0}} \left[\sum e^{-\beta H_0} (1 + \beta F x(0) \dots) x(t) \right] [1 - \beta F \langle x \rangle \dots]$$

Führe ein:

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



... zeitliche Autokorrelationsfunktion

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

Führe ein:

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

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

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

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

(7.12) →

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

... Onsagers Regressionshypothese:
Eine Nicht-GG-Strömung $\Delta \bar{x}(t)$ relaxiert
wie die zeitliche Korrelationen $\Delta x(t)$ im
them. GG