

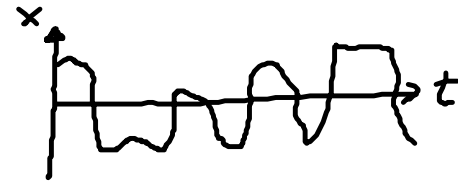
7. Theorie der linearen Antwort & Fluktuationen - Dissipationstheorem

- Lit: 1. David Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics
- 2. Hansen & McDonald
- 3. Original lit.: R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap. 12, 570 (1957)
- Motivation:

Dynamik eines Systems
nahe am therm. GG
Antwort \sim einwirkende
Kraft
 $x = \chi F$



Eigenschaft des Systems
im thermischen GG
 $\langle x(0)x(t) \rangle$
... Zeitkorrelations-
funktion



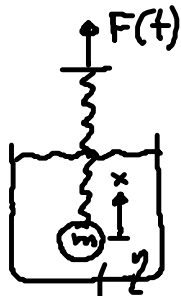
$\langle \dots \rangle$ über viele Realisierungen
von $x(t)$ im thermischen
GG

NB: Ergodenhypothese

$$\langle x(0)x(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T x(t')x(t'+t) dt'$$

- vereinfachte Version der
Ableitung der Theorie der L. A.

7.1 Modellsystem: harmonischer Oszillator



viskose Flüssigkeit
(Wärmebad)

Newtonsche Grundgleichung:

$$m\ddot{x} + \alpha\dot{x} + m\omega_0^2 x = F(t) \quad (7.1)$$

$\alpha = 6\pi\eta a \dots$ Reibkoeffizient
 $a \dots$ Radius Kugel

$\omega_0 \dots$ Eigenfrequenz

• Behälter im Komplexen: $x \in \mathbb{C}$

• Lösung von (7.1) für harmonische Kraft:

$$\left. \begin{array}{l} F(t) = F(\omega) e^{-i\omega t} \\ \text{Lsgs. Ansatz } x(t) = x(\omega) e^{-i\omega t} \end{array} \right\} \rightarrow (7.1) \quad \text{mit } \frac{\alpha}{m} = 2\gamma$$

$$\rightarrow m(-\omega^2 - 2\gamma i\omega + \omega_0^2) x(\omega) = F(\omega)$$

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

\dots dynamische Suszeptibilität
Antwortfunktion

NB: $[Fx] = \text{Energie}$

• Grenzfunktion:

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

(7.2) $\xrightarrow{\text{Faltungssatz}} \text{de FT}$

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

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

\dots Grenzfunktion von (7.1)

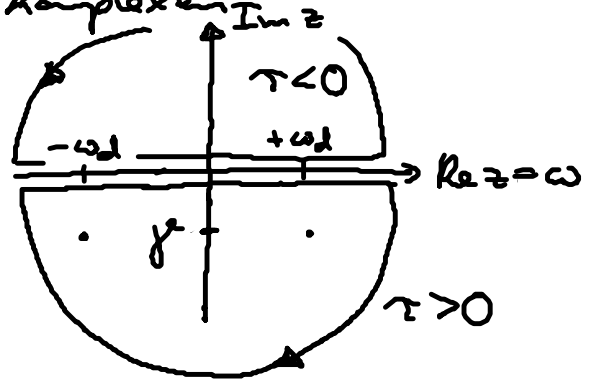
Bem. (i) $\chi(\tau)$ ist Lsg. von (7.1) für $F(t) = \delta(t)$

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



$$\rightarrow \chi(\tau) = \oint \frac{dz}{2\pi} \chi(z) e^{-iz\tau} = \int \dots dz$$

$$= 2\pi i \sum \text{Res } \chi(z) e^{-iz\tau}$$

Caution bei $\tau > 0$
im mathem. negativen
Sinn

$\rightarrow \tau < 0$:

$$\tau > 0: \frac{i}{2m\omega_d} e^{-\gamma\tau} [e^{-i\omega_d\tau} - e^{i\omega_d\tau}]$$

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

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

Energie dissipation: Sei $F(t) = \text{Re} [\underbrace{F(\omega)}_{\in \mathbb{R}} e^{-i\omega t}]$

$$\rightarrow x(t) = \text{Re} [\chi(\omega) F(\omega) e^{-i\omega t}]$$

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

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

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

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

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

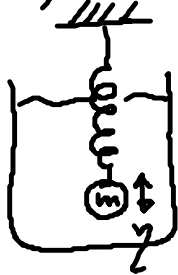
$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^2 x \, dx = \frac{1}{2}$$

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

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

• statistische Mechanik: zwei Situationen

(1) System im therm. GG:



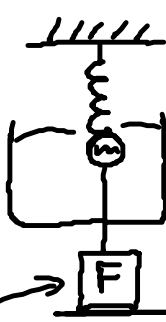
$F(t) = 0$ Hamiltonian: $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$

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

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

(2) Relaxation ins therm. GG:

$t = -\infty$

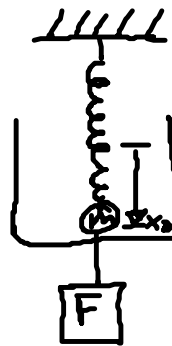


Feder + F
relaxiert ins
neue therm.
GG.

für $t = -\infty + \epsilon$

Last
mit Ge-
wichts-
kraft F

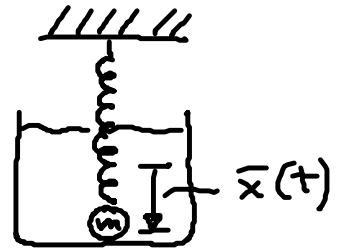
$t = -\epsilon$



Hamiltonian:
(Oszillator + Last)
 $H = H_0 - Fx_0$
Last verliert
an pot. Energie)

entferne
 F

$t = 0$



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

7.2 Fluktions-Dissipationstheorem I:

Onsagers Regressionshypothese

• Modellsystem: charakterisiert durch

(1) dynam Suszeptibilität:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{x}(\omega) &= \chi(\omega) F(\omega) \\ \Delta \bar{x}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t') F(t') dt' \end{aligned} \quad (7.7)$$

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

↑ Mittelwert von x im therm. GG.

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

1 $\chi(t) = 0, t < 0$... Kausalität

2 $[Fx] = \text{Energie}$

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

... die vom System in ein Wärmebad dissipierte Energie [Herleitung: wie in Gl. (9.6)]

(2) Hamiltonian $H_0(x)$

... Energie von Mikrozuständen mit Ausbleib 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 Ausbleib:

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

↑ therm. Flukt. von x um $\bar{x}(0)$ mittlere Ausbleib ohne Last

(2) Nicht-GG-dynamik:

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

• Lösung: $f =$ Nicht-GG-dynamik bei $t > 0$

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

oder (2) Onsagers Nygrenishypothese