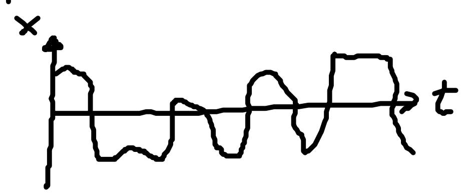
7. Theorie der Linearen Antwort & Fluktuations-Dissipationstheorem

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

• Motivation:

Dynamik eines Systems nahe am therm. GG Antwort ~ einwirkende Kraft $x = \chi F$	$\longleftrightarrow$	Eigenschaften des Systems im thermischen GG $\langle x(0)\,x(t)\rangle$ .... Zeitkorrelationsfunktion



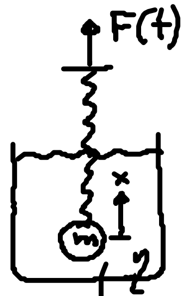
$\langle \dots \rangle$ über viele Realisierungen von $x(t)$ im thermischen GG

NB: Ergodenhypothese

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

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

7.1 Modellsystem: harmonischer Oszillator

• 

viskose Flüssigkeit
(Wärmebad)

Newtonsche Grundgleichung:

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

$\alpha = 6\pi\eta a$ ... Reibungskoeffizient

a ... Radius Kugel

ω_0 ... Eigenfrequenz

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

• Lösung von (7.1) für harmonische Kraft:

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

$$\longrightarrow \quad m\left(-\omega^2 - 2\gamma i\omega + \omega_0^2\right) x(\omega) = F(\omega)$$

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

... dynamische Suszeptibilität

Antwortfunktion

<u>NB:</u> $[Fx] =$ Energie

• Greensche Funktion:

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

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

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

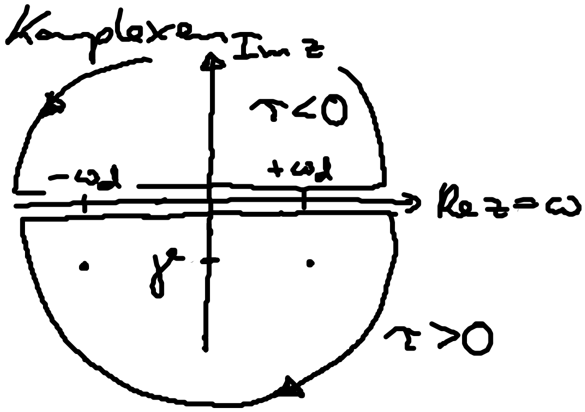
... Greensche Funktion von (7.1)

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

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



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

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

Contour bei $\tau>0$ im mathem. negative Sinn

$\longrightarrow \tau<0$:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

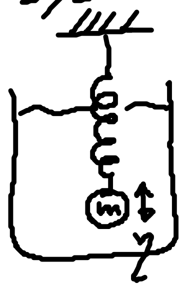
$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2 x\,dx = \frac{1}{2}$$

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

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

- statistische Mechanik: zwei Situationen

(1) System im therm. GG:



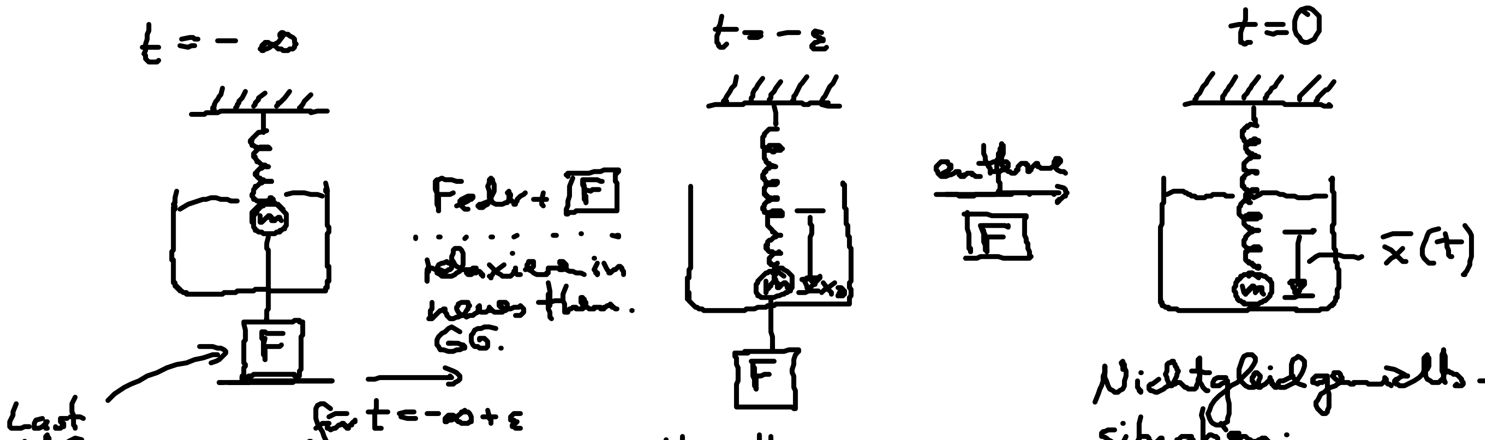
$F(t) = 0$

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:



Hamiltonian: (Oszillator + Last)

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

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

7.2 Fluktuations-Dissipationstheorem I: Onsagers Regressionshypothese

- Modellsystem: charakterisiert durch

(1) dynam. Suszeptibilität:

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

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. $[Fx] =$ Energie
3. $$\boxed{\bar{N} = \frac{\omega}{2}F^2(\omega)\chi''(\omega)} \quad (7.8)$$

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

(2) Hamiltonian $H_0(x)$

... Energie von Mikrozuständen mit Auslenkung x

(3) für konstante, von außen wirkende Kraft:

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

- 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:

$$\Delta\bar{x} = \bar{x}(0) - \underbrace{\langle x\rangle}_{\text{mittlere Auslenkung ohne Last}}$$

therm. Flukt. von x um $\bar{x}(0)$

(2) Nicht- GG-dynamik:

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

• Lösung: $\hat{=}$ Nicht-GG-dynamik bei $t>0$

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

oder (2) Onsagers Regressionshypothese