

7. Theorie der linearen Antwort & Fluktuation-Dissipationstheorem

7.1 Modellsystem: harmonischer Oszillator

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

... dynamische Suszeptibilität
Antwortfunktion

• Grenzfkt:

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

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

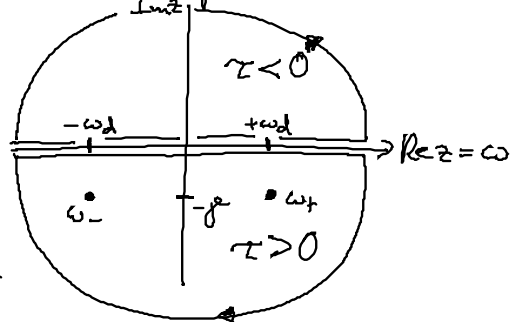
... Grenzfkt. von (7.1)

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi(\omega) = \frac{1}{-m(\omega - \omega_+) (\omega - \omega_-)} \\ \text{mit } \omega_{\pm} = -i\gamma \pm \omega_d \\ \omega_d = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \end{array} \right. \quad (7.4)$$



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

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

$$\rightarrow \boxed{\chi(\tau) = \Theta(\tau) \frac{1}{m\omega_0} e^{-\gamma\tau} \sin\omega_0\tau} \quad (7.5)$$

Stufe-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 $T = \frac{2\pi}{\omega}$

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

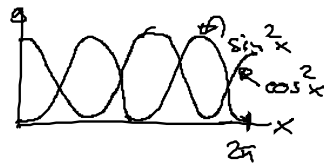
$$= \frac{1}{T} \int_0^T F(\omega) \cos\omega t \text{Re}[-i\omega \chi(\omega) F(\omega) (\cos\omega t - i \sin\omega t)] dt$$

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

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

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

$$\int_0^{2\pi} (\cos^2 x + \sin^2 x) dx = 2\pi$$

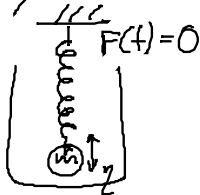


$$\rightarrow \boxed{\bar{N} = \frac{\omega}{2} F^2(\omega) \chi''(\omega)} \quad (7.6)$$

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

• statistische Mechanik: zwei Situationen

(1) System im thermischen GG:

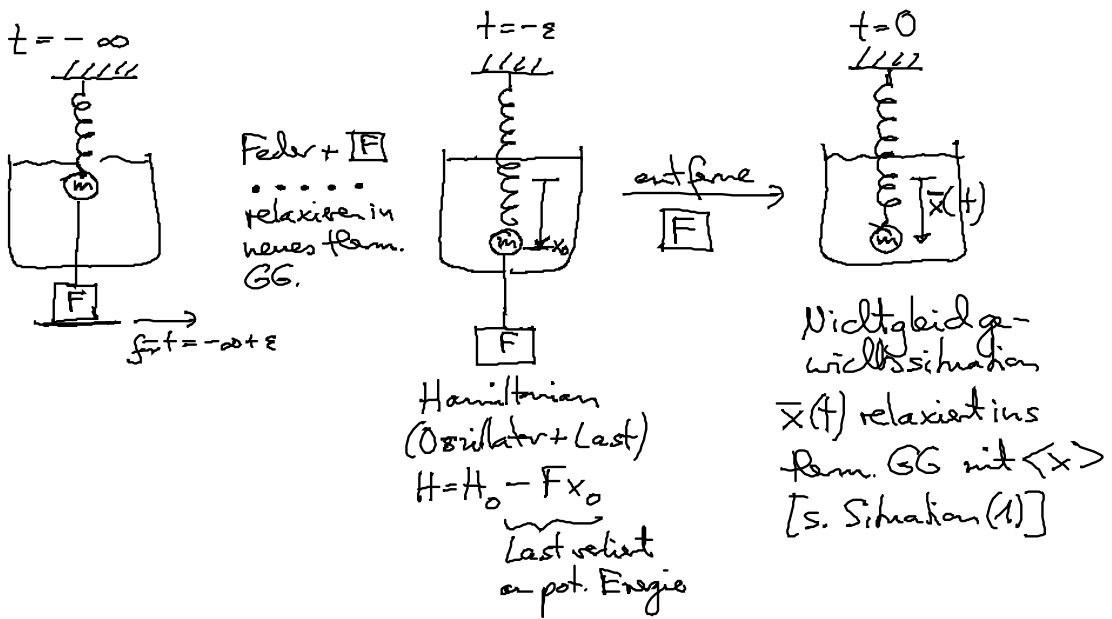


$$\text{Hamiltonian: } H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

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

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

(2) Relaxation ins ferromische GG:



7.2 Fluktuation-Dissipation Theorem I: Onsagers Regressionshypothese

• Modell system: charakterisiert durch
(1) dynam. Suszeptibilität

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

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

Mittelwert von x
im fem GG
[ohne $F(t)$]

... 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 von System in ein Wärmebad
dissipierte Energie [Herleitung: wie für Gl. (7.9)]

(2) Hamiltonian $H_0(x)$

... Energie von Mikrozuständen mit Auslenkung x

(3) für konstante, von außen wirkende Kraft:

Störhamiltonian: $\Delta H = -Fx$ (7.3)

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

(1) Präparation des Nicht-GG:

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

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

$$\Delta \bar{x} = \bar{x}(0) - \underbrace{\langle x \rangle}_{x_0(\text{s.o.})}$$

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

(2) Nicht-GG-Dynamik

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

• Lösung: für Nicht-GG-Dynamik bei $t > 0$:

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

oder (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 Bahn $x(t)$ mit Anfangswert $x(0)$ vorkommt! $H_0(x(0)) + \Delta H(x(0))$

zeitlicher Verlauf von $x(t)$ aufgrund mikroskop. Dynamik