7. Theorie der linearen Antwort & Fluktuations-Dissipationstheorem

7.1 Modellsystem: harmonischer Oszillator

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

... dynamische Suszeptibilität
Antwortfunktion

• Greensche Fkt:

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

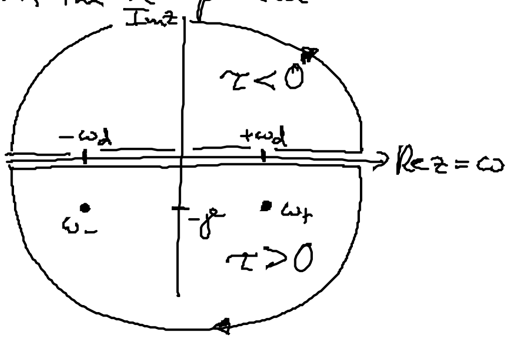
$$\text{mit} \quad \chi(\tau) = \int \frac{d\omega}{2\pi}\, \chi(\omega)\, e^{-i\omega\tau}$$

... Greensche Fkt. 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

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



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

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

$$\longrightarrow \begin{array}{ll} \tau < 0: & 0 \\ \tau > 0: & \dfrac{i}{2m\omega_d}\, e^{-\gamma\tau} \left[e^{-i\omega_d \tau} - e^{i\omega_d \tau} \right] \end{array}$$

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

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

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

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

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

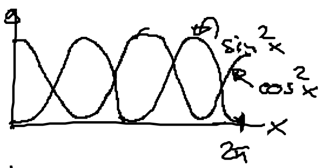
$$\overline{N} = \frac{1}{T}\int_0^T F(t)\,\dot{x}(t)\,dt$$

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

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

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

$$\left[\int_0^{2\pi} \underbrace{(\cos^2 x + \sin^2 x)}_{1}\, dx = 2\pi\right]$$

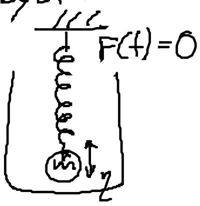


$$\longrightarrow \quad \boxed{\overline{N} = \frac{\omega}{2}\, F^2(\omega)\,\chi''(\omega)} \quad (7.6)$$

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

- statistische Mechanik: zwei Situationen

(1) System im thermischen GG:

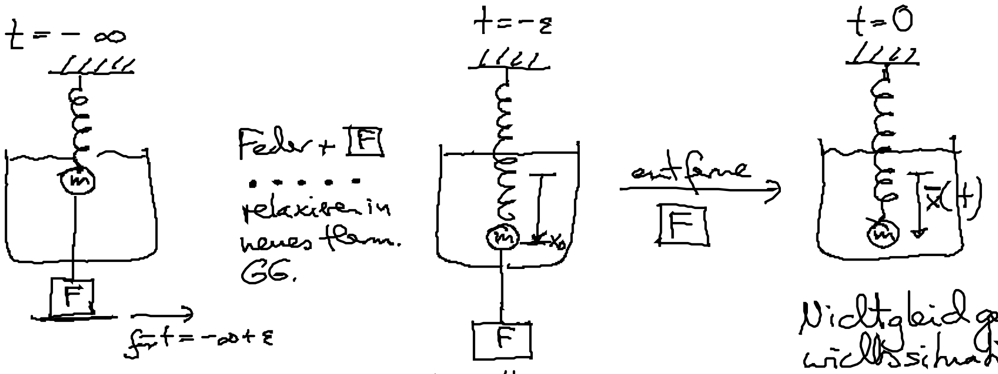


Hamiltonian: $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$

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

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

(2) Relaxation ins thermische GG:



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 [ohne F(t)]

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

1. $\chi(t) = 0,\ t<0$ ... Kausalität!
2. $[Fx] =$ Energie
3. $\boxed{\bar{N} = \frac{\omega}{2} F^2(\omega)\, \chi''(\omega)}$ (7.8)

... die vom 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

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

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

therm. Fluktuat. 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: für Nicht-GG-Dynamik bei $t>0$:

(1) (7.7) $\longrightarrow$ $\Delta\bar{x}(t) = F\int_{-\infty}^{0}\chi(t-t')\,dt'$ (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 Anfangsbedingung $x(0)$ vorkommt! $H_0(x(0)) + \Delta H(x(0))$

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