

Wkt: Lineare Antwort:

$$B = \chi V \quad \text{Störung}$$

Antwort

Was ist  $\chi$ ?

Formal:

betrachte System mit Hamiltonian:

$$H = H_0 + H'(\epsilon)$$

ungestörtes System      Störung

$$\text{mit } H'(\epsilon) = - \int d\mathbf{r} A(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}, \epsilon)$$

Kopplungsvariablen

Räumlich homogene Störung:

$$H'(\epsilon) = -A V(\epsilon) \quad \text{mit } V(\epsilon) = V_0 e^{-i\omega t}$$

$\omega=0$  konstant       $(= V_0 e^{-i(\omega+i\epsilon t)})$   $\epsilon \rightarrow 0$

Fluxus groß  
lim  $V(\epsilon) = 0$   
 $t \rightarrow \infty$

Wir sind interessiert an der mittleren Antwort

$\Rightarrow$  bestimme diesen Mittelwert über ein Phasenraumvolumen  $\mathcal{G}(\Gamma, t)$ ,  $\Gamma = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$

$$\text{Liouville-Gl: } \frac{\partial \mathcal{G}(\Gamma, t)}{\partial t} = -i\mathcal{L} \mathcal{G}(\Gamma, t)$$

mit  $\mathcal{L} = i\{H, \dots\}$   
Poisson-Klammer

Folgerung für Observablen:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} = i\mathcal{L}A, \quad A(t) = e^{i\mathcal{L}t} A(0)$$

formale Lösung:  
A ist meist explizit zeitabhängig  
( $A = A(\Gamma)$ )

Anwendung der Liouville-Gl. auf das System unter Störung:

$$\frac{\partial \rho(\Gamma, t)}{\partial t} = -i \mathcal{L} \rho(\Gamma, t) = \{H_0 + H', \rho(\Gamma, t)\}$$
$$= \{H_0, \rho(\Gamma, t)\} + \{H', \rho\} \quad \text{keine Aussage}$$

$$\textcircled{*} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -i \mathcal{L}_0 \rho(\Gamma, t) - \{A, \rho\} \quad \forall t$$

Liouville-Operator  
des ungestörten Systems  
 $\mathcal{L}_0 = i\{H_0, \dots\}$

Gesucht:

Lösung für  $\rho(\Gamma, t)$  unter der Randbedingung, dass  
 $\rho(\Gamma, t \rightarrow -\infty) = \rho_0(\Gamma)$  Thermorandwert im  
"weit zurück" in der Vergangenheit Gleichgewicht ( $V=0$ )

Ansatz:

$$\rho(\Gamma, t) = \rho_0(\Gamma) + \Delta \rho(\Gamma, t)$$

Motivation: Nehme an, dass  $\rho$  Boltzmann-Form hat

$$\rho \sim e^{-\beta H} = e^{-\beta(H_0 + H')}$$

$$H' \text{ klein} \xrightarrow{\text{Taylor-Entw.}} \rho(\Gamma, t) = e^{-\beta H_0} (1 - \beta H' + O(H'^2))$$
$$= \rho_0(\Gamma) - \underbrace{\beta e^{-\beta H_0} H' + \dots}_{\Delta \rho(\Gamma, t)}$$

Ansatz

Einsetzen in  $\textcircled{*}$ :

$$\frac{\partial \rho(\Gamma, t)}{\partial t} = \frac{\partial \Delta \rho(\Gamma, t)}{\partial t} \quad \left( \text{da } \frac{\partial \rho_0}{\partial t} = 0 \right)$$

$$= -i\hat{\rho}_0 (\rho_0(\tau) + \Delta\rho(\tau, t))$$

$$- \underbrace{\{A, \rho_0\}}_{\text{linear in der Störung}} V(t) - \{A, \Delta\rho\} V(t)$$

Bemerkungen:

- $\hat{\rho}_0 \rho_0(\tau) = 0$ , da  $\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = -i\hat{\rho}_0 \rho_0 = 0$  / Liouville
- $\{A, \Delta\rho\} V$  ist mindestens quadratisch in der Störung  $\rightarrow$  wird vernachlässigt!  
(da  $\Delta\rho$  mindestens linear in der Störung)

Die Vernachlässigung dieses Terms bildet die Kern-Approximation der Linear-Answer-Theorie

es bleibt:

$$\Rightarrow \frac{\partial \Delta\rho(\tau, t)}{\partial t} = -i\hat{\rho}_0 \Delta\rho(\tau, t) - \{A, \rho_0\} V(t)$$

Formale Lösung:

$$\Delta\rho(\tau, t) = - \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(t-t')\hat{\rho}_0} \{A, \rho_0\} V(t')$$

"check:"

$$= -e^{-i\hat{\rho}_0 t} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\hat{\rho}_0 t'} \{A, \rho_0\} V(t')$$

• für  $t \rightarrow -\infty$  geht  $\Delta\rho(\tau, t) \rightarrow 0$

Konsistenz mit unserer Voraussetzung,  
 dass  $\rho(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \rho_0(\tau)$

Produktregel

$$\begin{aligned} \cdot \frac{\partial \Delta S}{\partial t} &\stackrel{\downarrow}{=} -(-i\omega_0) e^{-i\omega_0 t} \int dt' \dots \\ &= -e^{-i\omega_0 t} \frac{d}{dt} e^{iA(t)} \{A, \rho_0\} V(t) \\ &= -i\omega_0 \Delta S(\tau, t) - \{A, \rho_0\} V(t) \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Betrachte nun den Fall, dass Gleichgewichtssystem  
 kanonisch ist, d.h.  $\rho_0(\tau) \sim e^{-\beta H_0}$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \{A, \rho_0\} &= \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial \rho_0}{\partial q_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial \rho_0}{\partial p_i} \right) \\ &= -\beta \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H_0}{\partial q_i} - \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial H_0}{\partial p_i} \right) \rho_0(\tau) \\ &= -\beta (i\omega_0 A) \rho_0(\tau) \\ &= -\beta \frac{dA}{dt} \rho_0(\tau) \\ &= -\beta \dot{A} \rho_0(\tau) \end{aligned}$$

da  $\rho_0 = e^{-\beta H_0}$   
 und  $A(t) = e^{i\omega_0 t} A(0)$   
 $\frac{dA}{dt} = i\omega_0 A(t)$

Einsetzen in die formale Lösung für  $\Delta g$

$$\Rightarrow \Delta g(\tau, t) = - \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(t-t')\omega_0} \left( -\hat{A} V(t') \right) g_0(\tau')$$

$$\Delta g(\tau, t) = \beta \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(t-t')\omega_0} \hat{A} V(t') g_0(\tau')$$

Da Propagator  $e^{-i(t-t')\omega_0}$  und  $g_0(\tau')$  beziehen sich beide auf das System im Gleichgewicht!

Der ganze Ausdruck ist linear in  $V$

Betrachte nun die <sup>mittlere</sup> Antwort des Systems auf die Störung

(Annahme  $B(\tau, t) = B(t)$ )

es gilt  $\langle B(t) \rangle = \int dt' B(\tau, t) g(\tau, t')$

Thermodynamische des  
Vollsystems  
mit  $H = H_0 + H'$

Ansatz für  $S = S_0 + \Delta S$

$$= \underbrace{\int d\Gamma B(\Gamma, t) S_0(\Gamma)}_{\text{setze dies zu Null}} + \underbrace{\int d\Gamma B(\Gamma, t) \Delta S(\Gamma)}_{=: \langle \Delta B(t) \rangle}$$

(physikal.: z.B. Paramagnet in Abwesenheit eines Magnetfeldes hat keine mittlere Magnetisierung!)

Einsetzen des Ergebnisses zu  $\Delta S$

$$\Rightarrow \langle \Delta B(t) \rangle = \int d\Gamma B(\Gamma, t) \beta \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(t-t')\epsilon_0} \dot{A}(t') S_0$$

$$= \beta \int_{-\infty}^t dt' V(t') \int d\Gamma S_0(\Gamma) B(\Gamma, t) e^{-i(t-t')\epsilon_0} \dot{A}$$

hier ohne Beweis

$$= \beta \int_{-\infty}^t dt' V(t') \int d\Gamma S_0(\Gamma) \dot{A} e^{-i(t-t')\epsilon_0} B(\Gamma, t)$$

Störung

alle Größen sind im Gleichgewicht berechnbar!  
(es könnte man  $S_0, e^{i\epsilon_0 t}$  auf!)

umschreiben:

$$\langle \Delta B(t) \rangle = \beta \int_{-\infty}^t dt' \Phi_{BA}(t-t') V(t') \quad (*)$$

„Lineare Antwort“ !! wobei  $\Phi_{BA}(t-t') = \int_{t_0}^{t-t'} dt' \rho_0(t') \dot{A} e^{i(t-t')\omega_0} B(t)$

Zeitabhängige Korrelationsfunktion des Systems im Gleichgewicht !!

$$= \langle B(t) \dot{A}(t') \rangle$$

$$= - \langle \dot{B}(t) A(t') \rangle$$

(näheres dazu separat)

Interpretation von (\*)

- Die Änderung der Observable  $B$  zur Zeit  $t$  ist linear in den Störungen  $V(t')$  zu allen früheren Zeiten  $t'$  (solange  $\Phi_{BA} \neq 0$ )

$\hat{=}$  Überlagerung von Effekten aus der Vergangenheit

(nicht aus der Zukunft  $\Rightarrow$  Kausalität)

- Falls speziell:  $V(t') = V \delta(t'-0)$

$$\rightarrow \langle \delta B(t) \rangle = \beta \Phi_{BA}(t) V$$

Antwort ist proportional zu Korrelationsfunktion an sich!

Exkurs:

Definition von Zeitkorrelationsfunktionen

- Es seien  $A$  und  $B$  zwei Observablen, die von  $\Gamma$  und  $t$  abhängen

- Zeitentwicklung:  $A(t) = e^{i\mathcal{L}t} A(0)$ ,  $B(t) = e^{i\mathcal{L}t} B(0)$

( $\mathcal{L}$  ist hier allgemein) ausdrücke die Abh. von  $\Gamma$ !

Definition der Zeitkorrelationsfunktion:

$$\phi_{AB}(t, t') := \langle A(t) B^*(t') \rangle$$

Diese kann auf 2 Arten berechnet werden:

a) als Zeitmittel:

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

b) als Streumittel:

$$\begin{aligned} \langle A(t) B^*(t') \rangle &= \langle e^{i\mathcal{L}t} A(0) e^{-i\mathcal{L}t'} B^*(0) \rangle \\ &= \int d\Gamma g(\Gamma) B^*(0) e^{i\mathcal{L}(t-t')} A(0) \end{aligned}$$



In ergodischen Systemen ergeben a) und b) dasselbe Ergebnis!!

## Weitere Folgerung für Systeme im Gleichgewicht

(Beispiel: Geschwindigkeits - Autokorrelationsfunktion)

$$\Phi_W(t, t') = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle v_i(t) v_i(t') \rangle$$

Im Gleichgewicht  
zeit

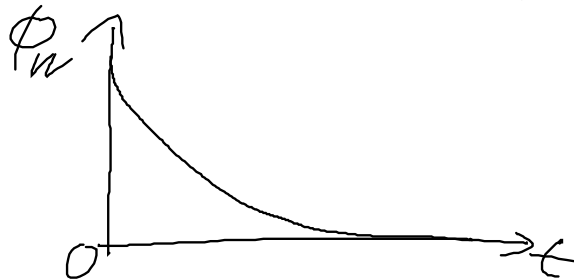
generell:  $\Phi_{AB}(t, t')$  hängt nur von der Zeitdifferenz  
ab (Zeittranslationsinvarianz)

häufig wählt man  $t' = 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \Phi_{AB}(t) &= \langle A(t) B^*(t=0) \rangle \\ &= \langle A(t) B^* \rangle \end{aligned}$$

(z.B. Geschwindigkeits - Autokorrelationsfunktion)

$$\Phi_W(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle v_i(t) v_i(0) \rangle$$



Weitere Folgerung

$$\frac{d}{ds} \phi_{AB}(t) = \frac{d}{ds} \langle A(t+s) B^*(s) \rangle$$

Produktregel

$$= \langle \dot{A}(t+s) B^*(s) \rangle$$

$$+ \langle A(t+s) \dot{B}^*(s) \rangle$$

$$= 0$$

( $\phi_{AB}(t)$  hängt nicht von  $A$  &  $B$  Bezugspunkt ab!!)

$$\Rightarrow \langle \dot{A}(t+s) B^*(s) \rangle = - \langle A(t+s) \dot{B}^*(s) \rangle$$

$$s=0 \Rightarrow \langle \dot{A}(t) B^* \rangle = - \langle A(t) \dot{B}^* \rangle$$