Wh: Lineare Antwort für räuml. homogene Systeme $\qquad H = H^0 - AV(t)$

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

mittlere Antwort
(Änderung gegenüber dem Wert im Gleichgewicht

Zeitkorrelationsfunktion im Gleichgewicht

$$\Phi_{BA}(t-t') = \int d\Gamma \, \rho_0(\Gamma) \, \dot{A} \, e^{i(t-t')\mathcal{L}_0} B(t)$$

$$= \langle B(t) \dot{A}(t') \rangle \quad \text{im Gleichgewicht}$$

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

Stationarität
(es kommt nur auf die Differenz $t-t'$ an!

Exkurs zur Zeitkorrelationsfunktion

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

Definition über Zeit und Scharmittel: siehe letzte VL

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

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

$$\overset{!}{=} 0 \quad \text{wegen Stationarität}$$

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

Falls speziell $B = A$ (und damit $C_{AA}(t)$ „Autokorrelationsfunktion")

aus ⊛ $\Rightarrow$ Für $C_{AA}(t)$ ist die erste zeitliche Ableitung Null!

Man kann zeigen:
Die zweite Zeit-Ableitung von $C_{AA}(t)$ ist ungleich Null!

$\rightarrow$ Autokorrelationsfunktionen $C_{AA}(t)$ sind gerade Funktionen in der Zeit
(Taylorentwicklung um $t=0$ enthält nur gerade Potenzen in t!)

Transformierte von Zeitkorrelationsfunktionen (Teil II des Exkurses)

betrachte den Fall räuml. Homogenität, nur Zeitabhängigkeit

Fouriertransformierte:

$$C_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \, C_{AB}(t) e^{i\omega t}$$

mit ω (reelle) Frequenz

Laplacetransformierte

$$\tilde{C}_{AB}(z) = \int_{0}^{\infty} dt \, C_{AB}(t) e^{izt} \quad , z \in \mathbb{C}$$

Für beschränkte $C_{AB}(t)$, also insbes. $C_{AB}(t) \to 0$ für $t \to \infty$ ist $\tilde{C}_{AB}(z)$ analytisch in der oberen Halbebene

Man kann immer annehmen, dass die Raum-Zeit-Fluktuationen $C_{AB}(t)$ für große Zeiten zerfallen
$\rightarrow$ Beschränktheit

(Streng genommen: $C_{AB}(t) \xrightarrow[t\to\infty]{} \langle A(t)\rangle\langle B^*(0)\rangle$)

Verbindung zw. den Transformierten:

$$\tilde{C}_{AB}(z) = \int_0^\infty dt \, \Big(\underbrace{\int d\omega \, C_{AB}(\omega) e^{-i\omega t}}_{C_{AB}(t)}\Big) e^{izt} \qquad \boxed{z = \omega' + i\eta \text{ mit } \eta > 0}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_0^\infty dt \, e^{i(z-\omega)t} C_{AB}(\omega)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, C_{AB}(\omega) \underbrace{\int_0^\infty dt \, e^{i(z-\omega)t}}_{\underbrace{\frac{1}{i(z-\omega)} e^{i(z-\omega)t}\Big|_0^\infty}_{= \frac{-i}{z-\omega}\Big(\underbrace{e^{i(z-\omega)t}\Big|_\infty}_{0 \text{ für } \eta>0} - 1\Big)}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\underset{\text{Laplace}}{\tilde{C}_{AB}(z)} = i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \frac{\overset{\text{Fourier}}{C_{AB}(\omega)}}{z-\omega}} \quad \text{„Hilbert-Transformierte"}$$

betrachte speziell Autokorrelationsfunktion $(B=A)$

$\Rightarrow C_{AA}(t)$ ist gerade in t (und reell)

$$\Rightarrow C_{AA}(\omega) \overset{\text{benutze Def. der Fouriertrafo.}}{=} \frac{1}{2\pi} 2 \int_0^\infty dt\, C_{AA}(t) \underbrace{\left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}\right)}_{\sim \cos \omega t}$$

also ist auch $C_{AA}(\omega)$ gerade in ω und reell

Folgerung für die Laplacetransformierte

$$\tilde{C}_{AA}(z) = i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{z-\omega'}$$

Sei nun $z = \omega + i\varepsilon$

$$\Rightarrow \tilde{C}_{AA}(\omega + i\varepsilon) = i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{\omega - \omega' + i\varepsilon} \quad (*)$$

Wende auf (*) folgende Regel an: (aus der Funktionentheorie)

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{x \pm i\varepsilon} = P\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\delta(x)\pi$$

Hauptwert:

$$P\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\varepsilon \to 0}\left(\int_a^{b-\varepsilon} f(x)\,dx + \int_{a+\varepsilon}^{b} f(x)\,dx\right)$$

$$\Rightarrow \lim_{\varepsilon \to 0} \tilde{C}_{AA}(\omega + i\varepsilon)$$

$$= iP\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{\omega - \omega'} + \pi \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' C_{AA}(\omega')\,\delta(\omega - \omega')$$

reell!

$$= \underbrace{iP\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{\omega - \omega'}}_{\text{Imaginärteil}} + \underbrace{\pi C_{AA}(\omega)}_{\text{Realteil}}$$

$$\boxed{\lim_{\varepsilon \to 0} \mathrm{Re}\, \tilde{C}_{AA}(\omega + i\varepsilon) = \pi C_{AA}(\omega)}$$

wird später gebraucht !!

Bemerkung:

Wir sehen aus der Rechnung auch:

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \operatorname{Im} \tilde{C}_{AA}(\omega+i\varepsilon) = P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{\omega-\omega'}$$

$$= \frac{1}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\lim_{\varepsilon\to 0} \operatorname{Re} \tilde{C}_{AA}(\omega')}{(\omega-\omega')}$$

Imaginär- und Realteil sind miteinander verknüpft $\longrightarrow$ Kramers-Kronig-Relation

(Bsp. aus der Elektrodynamik:
dielektrische Suszeptibilität im Lorentzmodell)

mikroskopisch

Ende Exkurs

Zurück zur Lineare-Antwort-Theorie:

bekannte Grundgleichung für räuml. inhomogenes System

$$\langle \Delta B(\underline{r},t)\rangle = \beta \int_{-\infty}^{t} dt' \int d\underline{r}' \, \Phi_{BA}(\underline{r}-\underline{r}', t-t') \, V(\underline{r}',t')$$

Annahmen:
- Zeittranslationsinvarianz ("klar im Gleichgewicht!")
- Räuml. Translationsinvarianz

Fouriertransf. bzgl. des Ortes:

$$\langle \Delta B_{\underline{k}}(t) \rangle = \beta \int_{-\infty}^{\infty} dt' \, \phi_{BA}(\underline{k}, t-t') \, V_{\underline{k}}(t')$$

Entkoppl. bzgl. $\underline{k}$

$$\phi_{BA}(\underline{k}, t-t') = -\frac{1}{V} \langle \dot{B}_{\underline{k}}(t) A_{-\underline{k}} \rangle$$

Folgerung im Frequenzraum

Ansatz für die Störung (monochromatisch)

$$V_{\underline{k}}(t) = V_{\underline{k}} \, e^{-i(\omega + i\varepsilon)t}$$

$\varepsilon > 0$

$\Leftrightarrow \lim_{t \to -\infty} V_{\underline{k}}(t) = 0$

Einsetzen:

$$\langle \Delta B_{\underline{k}}(t) \rangle = \beta \int_{-\infty}^{t} dt' \, \phi_{BA}(\underline{k}, t-t') \, V_{\underline{k}} \, e^{-i(\omega + i\varepsilon)t'}$$

$$= \beta \, V_{\underline{k}} \, e^{-i(\omega + i\varepsilon)t} \int_{-\infty}^{t} \phi_{BA}(\underline{k}, t-t') \, e^{-i(\omega + i\varepsilon)(t'-t)} \, dt'$$

Variablensubstitution

$$\tau = t - t'$$

$$\Rightarrow d\tau = -dt'$$

Grenzen: $t' = -\infty \Rightarrow \tau \to +\infty$

$t' = t \Rightarrow \tau = 0$

$$\Rightarrow \langle \Delta B_{\underline{k}}(t) \rangle = \beta V_{\underline{k}} e^{-i(\omega+i\varepsilon)t} \int_0^\infty d\tau \, \phi_{BA}(\underline{k},\tau) e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau}$$

Betrachte nun den Limes $\varepsilon \to 0$:

$$\langle \Delta B_{\underline{k}}(t) \rangle = \beta V_{\underline{k}} e^{-i\omega t} \lim_{\varepsilon \to 0} \int_0^\infty d\tau \, \phi_{BA} \, e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau}$$

$$\boxed{\langle \Delta B_{\underline{k}}(t) \rangle \overset{!}{=} \beta \chi_{BA}(\underline{k},\omega) V_{\underline{k}} e^{-i\omega t}} \quad (*)$$

$$\text{mit } \chi_{BA}(\underline{k},\omega) = \lim_{\varepsilon \to 0} \int_0^\infty d\tau \, \phi_{BA}(\underline{k},\tau) e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau}$$

dynamische Suszeptibilität

Weitere Berechnung der dyn. Suszeptibilität: Integriere $(*)$

$$\chi_{BA}(\underline{k},\omega) = \lim_{\varepsilon \to 0} \left(-\frac{1}{V}\right) \int_0^\infty d\tau \, \underbrace{\langle \dot{B}_{\underline{k}}(\tau) A_{-\underline{k}}(0) \rangle}_{F'} \underbrace{e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau}}_{G}$$

partiell integrieren $\quad (\varepsilon > 0\,!)$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0} \left(-\frac{1}{V}\right) \left[\langle B_{\underline{k}}(\tau) A_{-\underline{k}}(0) \rangle e^{i(\omega + i\varepsilon)\tau} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty d\tau \langle B_{\underline{k}}(\tau) A_{-\underline{k}}(0) \rangle \cdot i(\omega + i\varepsilon) e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau} \right]$$

$$= \lim_{\varepsilon \to 0} \left(\frac{1}{V}\right) \left[\langle B_{\underline{k}}(0) A_{-\underline{k}}(0) \rangle + i(\omega + i\varepsilon) \int_0^\infty d\tau \langle B_{\underline{k}}(\tau) A_{-\underline{k}}(0) \rangle e^{i(\omega+i\varepsilon)\tau} \right]$$

$$\chi_{BA}(\underline{k}, \omega) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{V} \Big[C_{BA}(\underline{k}, t=0)$$

Fouriertransformierte von $C_{BA}(\underline{r}, t)$ bei $t=0$

$$+ i(\omega + i\varepsilon) \underbrace{\tilde{C}_{BA}(\underline{k}, \omega + i\varepsilon)}_{} \Big]$$

Laplace-Transformierte zur komplexen Frequenz $z = \omega + i\varepsilon$

Betrachte speziell den Fall $B = A$

$$\boxed{\chi_{AA}(\underline{k}, \omega) = \frac{1}{V} \left(C_{AA}(\underline{k}, t=0) + \lim_{\varepsilon \to 0} (i\omega - \varepsilon)\, \tilde{C}_{AA}(\underline{k}, \omega + i\varepsilon) \right)}$$

(*)

Statischer Grenzfall

Betrachte den Realteil der dyn. Suszeptibilität

$$\mathrm{Re}\,\chi_{AA}(\underline{k},\omega) = \chi'_{AA}(\underline{k},\omega)$$
$$= \frac{1}{V}\Big[C_{AA}(\underline{k}, t=0)$$
$$- \omega \lim_{\varepsilon \to 0} \mathrm{Im}\,\tilde{C}_{AA}(\underline{k}, \omega + i\varepsilon)\Big]$$

Setze $\omega \to 0$

$$\Rightarrow \chi'_{AA}(\underline{k}, 0) = \frac{1}{V} C_{AA}(\underline{k}, t=0)$$
$$= \frac{1}{V} \langle A_{\underline{k}} A_{-\underline{k}} \rangle$$

Die <u>statische Suszeptibilität</u> entspricht also den Fluktuation von A bei $t=0$ im Gleichgewicht!

insgesamt: (im stat. Grenzfall)

$$\boxed{\langle \Delta A_{\underline{k}} \rangle = \frac{\beta}{V} \langle A_{\underline{k}} A_{-\underline{k}} \rangle V_{\underline{k}}}$$

Dynamischer Fall

aus (**) betrachte Imaginärteil

$$\mathrm{Im}\,\chi_{AA}(\underline{k},\omega) = \chi''_{AA}(\omega)$$

Laplace-Transformierte

$$= \frac{\omega}{V} \lim_{\varepsilon \to 0} \mathrm{Re}\, \hat{C}_{AA}(\underline{k}, \omega + i\varepsilon)$$

$$= \frac{\omega}{V} \underbrace{C_{AA}(\underline{k},\omega)}_{} \pi$$

siehe Exkurs

Fouriertransformierte von $C_{AA}(\underline{r},t)$ bzgl. ω (und $\underline{k}$)!

Zusammenfassend

$$\boxed{C_{AA}(\underline{k},\omega) = \frac{V}{\pi}\frac{1}{\omega}\chi''_{AA}(\underline{k},\omega)}$$

Fouriertransformierte von $\langle A(\underline{r},t)\, A(\underline{r}=0, t=0)\rangle$ raumzeitl. Fluktuationen der Größe $A(\underline{r},t)$

Imaginärteil der dyn. Suszeptibilität (Response-Funktion)

Beachte:
Die Größe $\omega \cdot \chi''_{AA}(\underline{k},\omega)$ entspricht der vom externen Feld absorbierten Energie, die dissipiert wird!

Daher der Name:
Fluktuations-Dissipationstheorem