7. Theorie der linearen Antwort

7.1 harmonischer Oszillator

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

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

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

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

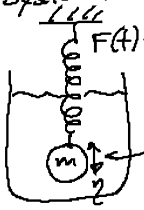
$$\begin{aligned} \overline{N} &= \frac{1}{T}\int_0^T F(t)\,\dot{x}(t)\,dt \\ &= \frac{1}{T}\int_0^T F(\omega)\cos\omega t \;\; \mathrm{Re}\left[-i\omega\,\chi(\omega)F(\omega)\,(\cos\omega t - i\sin\omega t)\right] dt \\ &= \frac{1}{T}\int_0^T F^2(\omega)\cos\omega t\left[\chi'(\omega)(-\omega)\sin\omega t + \omega\,\chi''(\omega)\cos\omega t\right] dt \\ &= F^2(\omega)\,\omega\,\chi''(\omega)\;\underbrace{\frac{1}{T}\int_0^T \cos^2 \underbrace{\omega t}_{x}\, dt}_{=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2 x\, dx \,=\, \frac{1}{2}} \end{aligned}$$

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

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

- statistischen Mechanik: zwei Situation

(1) System im thermischen GG:

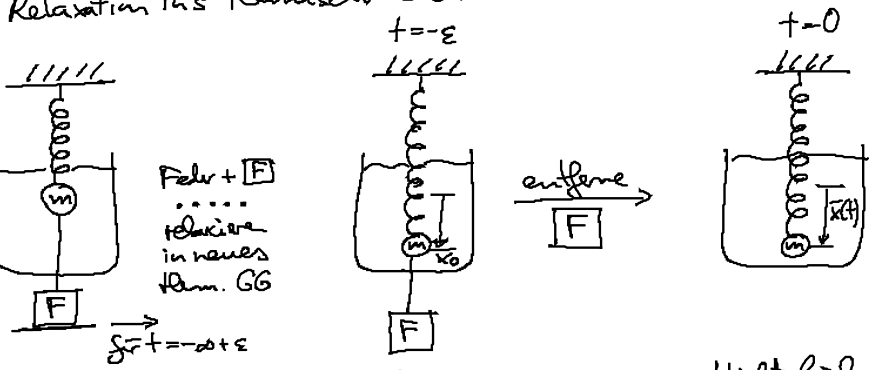


Hamiltonian: $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2$

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) dynamische Suszeptibilität

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

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

mit $\Delta \bar{x}(t) = \bar{x}(t) - \underbrace{\langle x \rangle}_{\text{Mittelwert von } x \text{ im therm. GG [ohne } F(t)]}$

Bem.:

1 $\chi(t) = 0, \quad t < 0$ ... 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 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

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

$$\Delta \bar{x} = \underbrace{\bar{x}(0)}_{x_0} - \underbrace{\langle x \rangle}_{\text{therm. GG. ohne F}}$$

weil therm. Fluktuationen 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) $\longrightarrow \quad \Delta \bar{x}(t) = F \int_{-\infty}^{0} \chi(t-t')\,dt'$ (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 $\bar{x}(t)$:

$$\bar{x}(t) = \frac{\sum e^{-\beta(H_0+\Delta H)}\, x(t)}{\sum e^{-\beta(H_0+\Delta H)}}$$

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

Wahrscheinlichkeit mit der Bahn $x(t)$ mit Anfangswert $x(0)$ verknüpft!

$H_0(x(0)) + \Delta H(x(0))$

$$\xrightarrow{\Delta H \ll H_0} \quad \bar{x}(t) = \frac{\sum e^{-\beta H_0}(1 - \beta \overset{-Fx(0)}{\Delta H} + \ldots)\, x(t)}{\underbrace{\sum e^{-\beta H_0}(1-\beta\Delta H)}}$$

Nenner: $\sum e^{-\beta H_0} \left(1 - \underbrace{\frac{\sum \beta \overset{-Fx}{\Delta H} e^{-\beta H_0}}{\sum e^{-\beta H_0}}}_{-\beta F \langle x \rangle}\right)$

$\frac{1}{1-x} \approx 1 + x \qquad \approx \frac{1}{\sum e^{-\beta H_0}} \left[\sum e^{-\beta H_0}(1 + \beta F x(0) \ldots)\, x(t)\right] \left[1 - \beta F \langle x \rangle \ldots\right]$

Zwischenschritt: Führe ein:

$$\boxed{\langle x(0)\, x(t)\rangle = \frac{\sum e^{-\beta H_0}\, x(0)\, x(t)}{\sum e^{-\beta H_0}}} \qquad (7.11)$$

... zeitliche Autokorrelationsfunktion

also: $$\bar{x}(t) = \langle x\rangle + \beta F\left[\langle x(0)x(t)\rangle - \langle x\rangle^2\right] + O\left((\beta F)^2\right) \qquad (*)$$

Führe ein:

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta x(t) &= x(t) - \langle x\rangle \\ C(t) &= \langle \Delta x(0)\, \Delta x(t)\rangle \\ &= \langle x(0)\, x(t)\rangle - \langle x\rangle^2 \end{aligned}} \qquad (7.12)$$

$$\langle (x(0) - \langle x\rangle)(x(t) - \langle x\rangle)\rangle$$

NB: (1) $C(t\to\infty) = 0$

... Verlust von Korrelationen zwischen $\Delta x(0)$ und $\Delta x(t)$

(2) $C(t) = C(-t)$ $\quad (= \langle \Delta x(-t)\, \Delta x(0)\rangle)$

$$(*) \xrightarrow{(7.12)} \boxed{\Delta \bar{x}(t) = C(t)\, \beta F + O\left((\beta F)^2\right)} \qquad (7.13)$$

... Onsagers Regressionshypothese:
Eine Nicht-GG-Störung $\Delta\bar{x}(t)$ relaxiert wie die zeitliche Korrelationen von $\Delta x(t)$ im therm. GG