Wh: Lineare Antwort:

$$B = \chi V$$ — Störung

Antwort

Was ist χ?

Formal:

betrachte System mit Hamiltonian: $H = H_0 + H'(t)$

H_0: ungestörtes System, $H'(t)$: Störung

mit $H'(t) = -\int d\underline{r}\, A(\underline{r})\, V(\underline{r},t)$

A: konjugierte Variable

Räumlich homogene Störung:

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

$\underline{k}=0$ Komponente

$$\left(= V_0 e^{-i(\omega + i\varepsilon)t}\right), \quad \varepsilon > 0$$

Damit gilt $\lim_{t\to-\infty} V(t) = 0$

Wir sind interessiert an der mittleren Antwort

$\Rightarrow$ bestimme diesen Mittelwert über eine Phasenraumdichte

$\varrho(\Gamma,t)$, $\Gamma = (\{q^N\},\{p^N\})$

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

mit $\mathcal{L} = i\{H, ..\}$

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 Lsg.

A ist nicht explizit zeitabhängig $(A = A(\Gamma))$

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

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

$$= \{H_0, \rho(\Gamma,t)\} + \{H', \rho\}$$

keine Observable

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

Liouville-Operator des ungestörten Systems

$\mathcal{L}_0 = i\{H_0, ..\}$

Gesucht:

Lösung für $\rho(\Gamma,t)$ unter der Randbedingung, dass

$\rho(\Gamma, t \to -\infty) = \rho_0(\Gamma)$ Phasenraumdichte im Gleichgewicht ($V=0$)

"weit zurück in der Vergangenheit"

Ansatz: $$\boxed{\rho(\Gamma,t) = \rho_0(\Gamma) + \Delta\rho(\Gamma,t)}$$

Motivation: Nehme an, dass ρ Boltzmann-Form hat

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

$$H' \text{ klein} \xrightarrow[\text{Taylor Entw.}]{} \rho(\Gamma,t) = e^{-\beta H_0}\left(1-\beta H' + O(H'^2)\right)$$

$$= \rho_0(\Gamma) \underbrace{- \beta e^{-\beta H_0} H' + \dots}_{+\Delta\rho(\Gamma,t)}$$

Ansatz

Einsetzen in (*):

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

$$= -i\mathcal{L}_0 \left(\rho_0(\Gamma) + \Delta\rho(\Gamma,t)\right)$$

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

Bemerkungen:

Liouville

- $\mathcal{L}_0 \rho_0(\Gamma) = 0$, da $\frac{\partial \rho_0}{\partial t} = -i\mathcal{L}_0\rho_0 = 0$

- $\{A,\Delta\rho\}V$ ist mindestens quadratisch in der Störung $\longrightarrow$ wird vernachlässigt!
  (da $\Delta\rho$ mindestens linear in der Störung)

Die Vernachlässigung dieses Terms bildet die Kern-Approximation der Lineare-Antwort-Theorie

es bleibt:

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

Formale Lösung:

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

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

"check":

- für $t\to-\infty$ geht $\Delta\rho(\Gamma,t)\to 0$

Konsistent mit unserer Voraussetzung, dass $\rho(\Gamma,t) \xrightarrow[t\to-\infty]{} \rho_0(\Gamma)$

$$\bullet\ \frac{\partial \Delta\rho}{\partial t} \overset{\text{Produktregel}}{=} -(-i\mathcal{L}_0)\, e^{-i\mathcal{L}_0 t}\int_{-\infty}^{t} dt' \dots$$

$$- e^{-i\mathcal{L}_0 t}\, e^{+i\mathcal{L}_0 t}\,\{A,\rho_0\}\,V(t)$$

$$= -i\mathcal{L}_0\,\Delta\rho(\Gamma,t) - \{A,\rho_0\}\,V(t) \qquad \text{q.e.d.}$$

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

$$\Rightarrow \{A,\rho_0\} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial \underline{q}_i}\frac{\partial \rho_0}{\partial \underline{p}_i} - \frac{\partial A}{\partial \underline{p}_i}\frac{\partial \rho_0}{\partial \underline{q}_i}\right)$$

$$= -\beta \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial \underline{q}_i}\frac{\partial H_0}{\partial \underline{p}_i} - \frac{\partial A}{\partial \underline{p}_i}\frac{\partial H_0}{\partial \underline{q}_i}\right)\rho_0(\Gamma)$$

$$= -\beta\,(i\mathcal{L}_0 A)\,\rho_0(\Gamma)$$

$$= -\beta\,\frac{dA}{dt}\,\rho_0(\Gamma)$$

$$= -\beta\,\dot{A}\,\rho_0(\Gamma)$$

da $\mathcal{L}_0 = i\{H_0, ..\}$ und $A(t) = e^{i\mathcal{L}_0 t} A(0)$, $\frac{dA}{dt} = i\mathcal{L}_0 A(t)$

Einsetzen in die formale Lösung für $\Delta\rho$

$$\Longrightarrow \Delta\rho(\Gamma,t) = -\int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{-i(t-t')\mathcal{L}_0} \left(-\beta \dot{A} V(t')\right) \rho_0(\Gamma)$$

$$\Delta\rho(\Gamma,t) = \beta \int_{-\infty}^{t} dt' \, e^{-i(t-t')\mathcal{L}_0} \dot{A} V(t') \rho_0(\Gamma).$$

Der Propagator $e^{-i(t-t')\mathcal{L}_0}$ und $\rho_0(\Gamma)$ beziehen sich beide auf das System im Gleichgewicht!

Der ganze Ausdruck ist linear in V

Betrachte nun die mittlere Antwort des Systems auf die Störung

(Annahme $B(r,t) = B(t)$)

Phasenraumdichte des vollen Systems mit $H = H_0 + H'$

es gilt $$\langle B(t) \rangle = \int d\Gamma \, B(\Gamma,t) \rho(\Gamma,t)$$

Ansatz für $\rho = \rho_0 + \Delta\rho$

$$= \underbrace{\int d\Gamma\, B(\Gamma,t)\, \rho_0(\Gamma)}_{\text{setze dies zu Null}} + \underbrace{\int d\Gamma\, B(\Gamma,t)\, \Delta\rho(\Gamma,t)}_{=: \langle \Delta B(t) \rangle}$$

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

Einsetzen des Ergebnisses zu $\Delta\rho$

$$\Rightarrow \langle \Delta B(t) \rangle = \int d\Gamma\, B(\Gamma,t)\, \beta \int_{-\infty}^{t} dt'\, e^{-i(t-t')\mathcal{L}_0}\, \dot{A}\, V(t')\, \rho_0$$

$$= \beta \int_{-\infty}^{t} dt'\, V(t') \int d\Gamma\, \rho_0(\Gamma)\, B(\Gamma,t)\, e^{-i(t-t')\mathcal{L}_0}\, \dot{A}$$

hier ohne Beweis

$$= \beta \int_{-\infty}^{t} dt'\, \underbrace{V(t')}_{\text{Störung}}\, \underbrace{\int d\Gamma\, \rho_0(\Gamma)\, \dot{A}\, e^{i(t-t')\mathcal{L}_0}\, B(\Gamma,t)}$$

alle Größen sind im Gleichgewicht berechenbar!! (es tauchen nur ρ_0, $e^{i\mathcal{L}_0 t}$ auf!)

umschreiben:

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

„Lineare Antwort"! wobei $\Phi_{BA}(t-t') = \int d\Gamma\, \varrho_0(\Gamma)\, \dot{A}\, e^{iL(t-t')} B(t)$

$= \langle B(t)\, \dot{A}(t') \rangle_0$

$= - \langle \dot{B}(t)\, A(t') \rangle_0$

„Zeitabhängige Korrelationsfunktion des Systems im Gleichgewicht!"

(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 $\Leftrightarrow$ Kausalität)

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

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

  Antwort ist proportional zur Korrelationsfunktion an sich!

Exkurs:

Definition von Zeitkorrelationsfunktionen

- Es seien A und B zwei Observablen, die von Γ 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) unterdrücke die Abh. von Γ!

Definition der Zeitkorrelationsfunktion:

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

Diese kann auf 2 Arten berechnet werden:

a) als Zeitmittel:

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

b) als Scharmittel:

$$\langle A(t) B^*(t') \rangle = \langle e^{i\mathcal{L}t} A(0) e^{-i\mathcal{L}t'} B^*(0) \rangle$$

$$= \int d\Gamma\, \rho(\Gamma)\, B^*(0)\, e^{i\mathcal{L}(t-t')} A(0)$$

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

Weitere Folgerungen für Systeme im Gleichgewicht

(Beispiel: Geschwindigkeits-"Autokorrelationsfunktion"

$$\Phi_{vv}(t,t') = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \langle \underline{v}_i(t)\,\underline{v}_i(t')\rangle \Big)$$

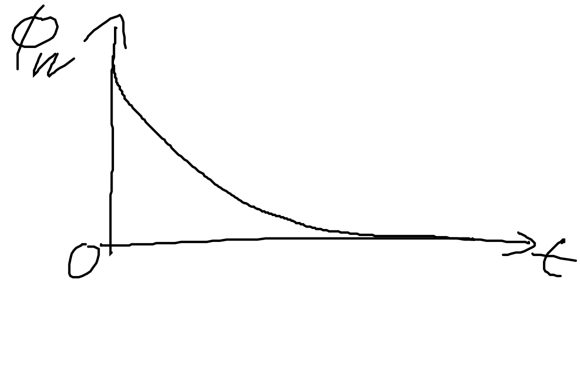
Im Gleichgewicht gilt generell: $\Phi_{AB}(t,t')$ hängt nur von der Zeitdifferenz ab (Zeittranslationsinvarianz)

häufig wählt man $t'=0$

$$\Rightarrow \Phi_{AB}(t) = \langle A(t)\,B^*(t=0)\rangle$$
$$= \langle A(t)\,B^*\rangle$$

(z.B. Geschwindigkeits-Autokorr.-funktion

$$\Phi_{vv}(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \langle \underline{v}_i(t)\,\underline{v}_i(0)\rangle$$



Weitere Folgerung

$$\frac{d}{ds}\Phi_{AB}(t) = \frac{d}{ds}\overbrace{\langle A(t+s)B^*(s)\rangle}^{\langle A(t)B^*(0)\rangle}$$

Produktregel

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

$$\stackrel{!}{=} 0$$

($\Phi_{AB}(t)$ hängt nicht vom ~~Auf~~ Bezugspunkt ab!!)

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

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