Wh.:

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

$$\Leftrightarrow \langle \Delta \tilde{B}_{\underline{k}}(t)\rangle = \beta \int_{-\infty}^{t} dt'\, \tilde{\Phi}_{BA}(\underline{k}, t-t')\, \hat{V}_{\underline{k}}(t')$$

mit $\tilde{\Phi}_{BA}(\underline{k},t) = -\frac{1}{V} \langle \dot{B}_{\underline{k}}(t)\, A_{-\underline{k}} \rangle$

Mittelwert bei $V=0$

monochromatische Störung:

$$V_{\underline{k}}(t) = V_{\underline{k}}\, e^{-i(\omega + i\varepsilon)t}, \quad \varepsilon \to 0$$

$$\langle \Delta \tilde{B}_{\underline{k}}(t)\rangle = \beta\, \chi_{BA}(\underline{k},\omega)\, V_{\underline{k}}\, e^{-i\omega t}$$

dyn. Suszeptibilität: Fouriertrafo. von $\tilde{\Phi}_{BA}$

$$\chi_{BA} = \chi'_{BA} + i\, \chi''_{BA}$$

Speziell: $B=A$

a) Statischer Grenzfall: $\left(\mathrm{Re}\, \chi_{AA}(\underline{k},\omega) = \chi'_{AA} = \frac{1}{V} \underbrace{C_{AA}(\underline{k},0)}_{\langle A_{\underline{k}} A_{-\underline{k}}\rangle} \right.$

$$\langle \Delta \hat{A}_{\underline{k}} \rangle = \beta/_V \langle A_{\underline{k}}\, A_{-\underline{k}} \rangle V_{\underline{k}}$$

b) Dynamischer Fall:

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

Fouriertransformierte der Funktion $\langle A(\underline{r},t)\, A(\underline{r}',0)\rangle$

Imaginärteil der dyn. Suszeptibilität

$\boxed{\text{Fluktuations-Dissipationstheorem}}$ ~ dissipierten Energie

(FDT)

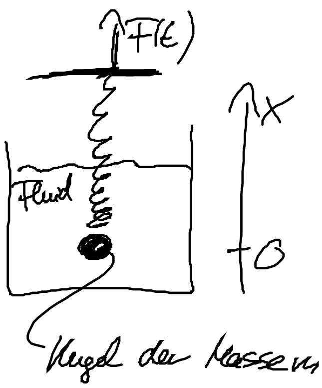
Bemerkungen:

- Der Vorfaktor $\frac{1}{\pi}$ kommt durch die Fouriertransf. bzgl. ω sowie unsere Definition der Fouriertransf. bzgl. der Zeit
- FDT ist Ausdruck des therm. Gleichgewichts!

IV.2. Modellsystem harmonischer Oszillator

Bewegungsgl. in 1 Dimension:

$$m\ddot{x} + m\omega_0^2 x + \underbrace{\alpha\dot{x}}_{\text{„Dämpfungsterm"}} = \underbrace{F(t)}_{\text{treibende Kraft}}$$



mit $\alpha = 6\pi\eta R$ — Kugelradius

η: Viskosität des umgebenden Fluids

α: Reibungskoeffizient

ω_0: Eigenfrequenz des Oszillators

Vorstellung: Kugel der Masse m schwingt in einer viskosen Flüssigkeit um eine Ruhelage ($x=0$)

Andere Interpretation des quadrat. Potentials:

– Teilchen in der optischen „Falle"
(„optical tweezer")

Beachte auch:

Eine ähnl. Bewegungsgl. taucht z.B. auf im Kontext des Lorentz-Modells für dielektrische frequenzabh. Polarisierbarkeit

(schwingende Ladungen in einem Atom, der Term $\alpha\dot{x}$ reflektiert Einfluss der Umgebung)

Betrachte speziell harmonische Kraft:

$$F(t) = F(\omega)\, e^{-i\omega t}$$

Einsetzen, Lösungsansatz: $x(t) = x(\omega)\, e^{-i\omega t}$

Auslenkung um die Ruhelage

$$\Rightarrow \dot{x} = -i\omega\, x(t)\,, \quad \ddot{x} = -\omega^2 x(t)$$

$$\Rightarrow m\left(-\omega^2 - \frac{\alpha}{m} i\omega + \omega_0^2\right) x(\omega)\, e^{-i\omega t} = F(\omega)\, e^{-i\omega t}$$

Soll $\forall t$ gelten, Faktor $e^{-i\omega t}$ kann gekürzt werden

Umschreiben im Sinne einer Linear-Response-Gl.

$$\underbrace{x(\omega)}_{\text{Antwort}} = \underbrace{\chi(\omega)}_{\substack{\text{dyn.}\\ \text{Suszeptibilität}\\ \text{des Oszillators}}} \underbrace{F(\omega)}_{\text{Störung}}$$

wobei $\chi(\omega) = \dfrac{1}{m\left(\omega_0^2 - \omega^2 - \frac{\alpha}{m} i\omega\right)}$

Beachte: $\chi(\omega)$ enthält hier bereits den Faktor β, den wir in der allg. Relation gesehen hatten!

$$= \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$$

Aus dem allg. Formalismus für die Linear-Response-Theorie wissen wir bereits: $\chi(\omega)$ ist die Fourier-Transformierte der Zeitabhängigen Antwortfunktion $\chi(t-t')$

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

mit $\chi(\underbrace{t-t'}_{\tau}) = 0$, $t' > t$ Kausalität

und $\chi(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \, e^{-i\omega\tau} \chi(\omega)$

Beachte auch:

$\chi(t-t')$ kann auch als Green'sche Funktion der Diff.gl. für $x(t)$ (also unserer Bewegungsgl.) aufgefasst werden!

Speziell für den Fall $F(t') = \delta(t')$ gilt offensichtlich $x(t) = \chi(t)$, d.h. in diesem Fall liefert $\chi(t)$ direkt die Lösung!! Im allg. Fall liefert $\chi(t-t')$ die Lösung als Faltungsintegral

Berechnung der Fouriertransf. von $\chi(\omega)$ für den harmonischen Oszillator:

$$\chi(\omega) = \frac{1}{m(\omega_0^2 - \omega^2 - \frac{\alpha}{m} i\omega)}$$

$$= -\frac{1}{m} \frac{1}{(\omega - \Omega_-)} \frac{1}{(\omega + \Omega_+)}$$

mit $\Omega_\pm = \Omega \pm i\frac{\gamma}{2}$

$\Omega = \sqrt{\omega_0^2 - \frac{\gamma^2}{4}}$

$\gamma = \alpha/m > 0$

Funktion hat Singularitäten bei $\omega_1 = \Omega_- = \Omega - i\frac{\gamma}{2}$

$$\omega_2 = -\Omega_+ = -\Omega - i\frac{\gamma}{2}$$

$\Rightarrow$ Beide Pole liegen in der unteren Halbebene!

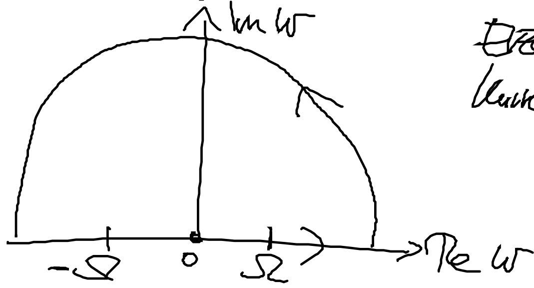
(Konsistent mit unserer allg. Diskussion von Responsefunktionen) $\rightarrow$ Exkurs

Zu berechnen:

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

durch Integration im Komplexen!

a) $t < 0$



Erzeuge geschlossene Kurve

- Beitrag auf dem oberen Halbkreis verschwindet,
da $e^{-i(i\varepsilon)t} = e^{\varepsilon t} \longrightarrow 0$

$(\varepsilon > 0)$ für $t<0,\ \varepsilon \to \infty$

- Keine Pole in der oberen Halbebene $\chi(z)e^{-izt}$

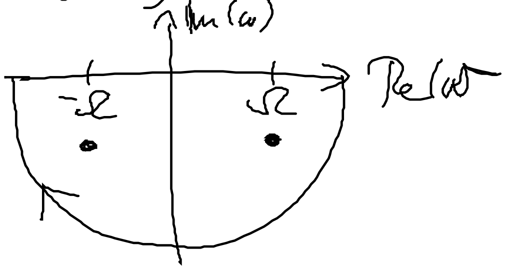
$$\Rightarrow \oint dz\, f(z) = 0$$

komplexe Frequenz

Cauchy'scher Integralsatz

b) $t>0$

Damit der Beitrag des Randes verschwindet,
setze Integration in der unteren Halbebene fort



Behandlung der beiden Pole erster Ordnung durch
Residuensatz $\chi(z)e^{-izt}$

da Kurve im mathemat. negativen Sinne durchlaufen wird!

$$\frac{1}{2\pi i} \oint dz\, f(z) = (-1) \sum \mathrm{Res}\, f$$

mit $\mathrm{Res}_{z_0} f = \lim\limits_{z \to z_0} (z - z_0) f(z)$

man erhält:

$$x(t) = \left(\frac{1}{m\Omega} e^{-\frac{\gamma}{2}t} \sin \Omega t \right) \theta(t)$$

Stufenfunktion
$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$

Energiedissipation

Ausgangspunkt:
Arbeit, die aufgewendet werden muß, um das Teilchen im Kraftfeld zu bewegen

$dW = F dx$ (Arbeit = Kraft mal Weg)

Leistung: $F\dot{x}$ (Energie pro Zeit)

Betrachte die mittlere verrichtete Leistung während einer Periode $T = \frac{2\pi}{\omega_0}$ für einen Oszillator in Anwesenheit der Kraft $F(t) = F(\omega_0) \cos \omega_0 t$ reell, monochromatisch

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

Setze ein: $F(t)$

und $x(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \; x(\omega) e^{-i\omega t}$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty} d\omega \; \chi(\omega) \underbrace{F(\omega)}_{\pi F(\omega_0)\left(\delta(\omega+\omega_0)+\delta(\omega-\omega_0)\right)} e^{-i\omega t}$$

$$= \frac{F(\omega_0)}{2} \left(\chi(\omega_0) e^{i\omega_0 t} + \chi(-\omega_0) e^{-i\omega_0 t} \right)$$

benutze: $\chi(\omega_0) = \chi'(\omega_0) + i\chi''(\omega_0)$

es gilt: $\chi'(-\omega_0) = \chi'(\omega_0)$ Realteil ist gerade in ω

$\chi''(-\omega) = -\chi''(\omega_0)$

da $\chi(t)$ reell!

$$\Rightarrow x(t) = \frac{F(\omega_0)}{2} \left[\chi' e^{i\omega_0 t} + i\chi'' e^{i\omega_0 t} + \chi' e^{-i\omega_0 t} - i\chi'' e^{-i\omega_0 t} \right]$$

$$= \frac{F(\omega_0)}{2} \left(2\chi'(\omega_0) \cos\omega_0 t + 2\chi''(\omega_0) \sin\omega_0 t \right)$$

$$\Rightarrow \dot{x}(t) = -\omega_0 F(\omega_0) \chi'(\omega_0) \sin\omega_0 t + \omega_0 \; '' \; \chi''(\omega_0) \cos\omega_0 t$$

$\Rightarrow$ Leistung:

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

$$= \frac{1}{T}\int_0^T dt\ \omega_0 F^2(\omega_0)\left[\chi'(\omega_0)\cos\omega_0 t\,\sin\omega_0 t\,(-1) + \chi''(\omega_0)\cos^2\omega_0 t\right]$$

benutze:

$$\int_0^T dt\,\sin\omega_0 t\,\cos\omega_0 t = 0$$

$$\int_0^T dt\,\cos^2\omega_0 t = \underset{x=\omega_0 t}{=} \frac{1}{\omega_0}\int_0^{2\pi} dx\,\cos^2 x = \frac{\pi}{\omega_0}$$

Ergebnis für die (zeitgemittelte) Leistung:

$$\boxed{\bar{N} = \frac{\omega_0}{2} F^2(\omega_0)\,\chi''(\omega_0)}$$

Imaginärteil der dyn. Suszeptibilität

Weitere Interpretation:

Das ist die vom Oszillator in das umgebende Fluid dissipierte Energie pro Zeiteinheit!

Zurück zur Lineare-Antwort-Gl. für den Oszillator

$$\underset{\text{Auslenkung}}{x(\omega)} = \chi(\omega)\,F(\omega)$$

Die obige Rechnung hat gezeigt, daß $\chi''(\omega) \sim$ Dissipation

Bezug zu Fluktuation?

Aus dem allg. Formalismus wissen wir

$$\langle \Delta B \rangle = \beta \int_{-\infty}^{t} dt' \; \underbrace{\Phi_{BA}(t-t')}_{-\langle \dot{B}(t) A(t') \rangle} \; \overset{\text{Störung}}{V(t')} \qquad (*)$$

zur Störung konjugierte Observable

$(H' = -A \cdot V)$

Beim Oszillator:

- Störung $\hat{=}$ treibenden Kraft des Oszillators $F(t')$ $\qquad V \to F$
- Antwort $\hat{=}$ Auslenkung $\qquad B \to x$

$A \to x$

denn: Der Störungsterm im Hamiltonian hat hier die Form $H' = -Fx$

Die allg. Relation (*) angewandt auf unseren Fall lautet:

$$\langle \Delta x(t) \rangle = \beta \int_{-\infty}^{t} dt' \, \Phi_{\dot{x}x}(t-t') F(t')$$

$$\text{mit } \Phi_{\dot{x}x} = -\langle \dot{x}(t) x(0) \rangle$$

(Dies impliziert im Vergleich mit der Oszillatorgl.

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

$$\Rightarrow \chi(t-t') = -\beta \langle \dot{x}(t) x(0) \rangle$$

Mittelwert über die therm. Fluktuation, die durch die umgebende Flüss. hervorgerufen werden!

<u>Aussehen</u> (aus dem Formalismus)

$$\boxed{C_{xx}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\chi''_{xx}(\omega)}{\omega}}$$

$$\text{mit } \chi''_{xx}(\omega) = \beta^{-1} \chi(\omega) = k_B T \, \chi(\omega)$$

Fouriertransf. der Funktion $\langle x(t) x(0) \rangle$

Fluktuations-Dissipations-theorem für den harmonischen Oszillator