

Wkt. Lineare Antwort für  
räuml. homogenen Systeme

$$H = H^0 - A V(\epsilon)$$

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

mittlere Antwort  
(Änderung gegenüber dem Wert im Gleichgewicht)

Zeitkorrelationsfunktion im Gleichgewicht

$$\begin{aligned} \Phi_{BA}(\epsilon - \epsilon') &= \int dt' g_0(t') \dot{A} e^{i(\epsilon - \epsilon') g_0 B(t')} \\ &= \langle B(\epsilon) \dot{A}(\epsilon') \rangle \text{ im Gleichgewicht} \\ &= - \langle \dot{B}(\epsilon) A(\epsilon') \rangle \end{aligned}$$

Stationarität  
(es kommt nur auf die Differenz  $\epsilon - \epsilon'$  an!)

Erweis zum Zeitkorrelationsfunktion

$$\text{Def.: } C_{AB}(\epsilon, \epsilon') := \langle A(\epsilon) B^*(\epsilon') \rangle$$

Definition über Zeit und Schmitttel: siehe letzte VL

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} C_{AB}(\epsilon) &= \frac{d}{ds} \langle A(\epsilon+s) B^*(s) \rangle \\ &= \langle \dot{A}(\epsilon+s) B^*(s) \rangle + \langle A(\epsilon+s) \dot{B}^*(s) \rangle \\ &\stackrel{!}{=} 0 \text{ wegen Stationarität} \end{aligned}$$

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

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

aus  $\otimes$  Für  $C_{AA}(t)$  ist die erste zeitliche Ableitung Null!  
 Man kann zeigen:  
 Die zweite zeitl. Ableitung von  $C_{AA}(t)$  ist ungleich Null!

→ 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  $\omega$  (reelle) Frequenz

Laplace transformiert

$$\tilde{C}_{AB}(z) = \int_0^{\infty} dt C_{AB}(t) e^{izt}, \quad z \in \mathbb{C}$$

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

Man kann immer annehmen, dass die Raumzeitl.  
 Funktionen  $C_{AB}(t)$  für große Zeiten zerfallen  
 → Beschränktheit

$$\left( \text{Strenggenau: } C_{AB}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \langle A(t) \rangle \langle B^*(0) \rangle \right)$$

Verbindung zw. den Transformierten.

$$\tilde{C}_{AB}(z) = \int_0^{\infty} dt \left( \int_{-\infty}^{\infty} dw C_{AB}(w) e^{-iwt} \right) e^{izt} \quad \left[ \begin{array}{l} z = \omega' + i\eta \\ \text{mit } \eta > 0 \end{array} \right]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dw \int_0^{\infty} dt e^{i(z-w)t} C_{AB}(w)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dw C_{AB}(w) \int_0^{\infty} dt e^{i(z-w)t}$$

$$\underbrace{\int_0^{\infty} dt e^{i(z-w)t}}_{\frac{1}{i(z-w)} e^{i(z-w)t} \Big|_0^{\infty}}$$

$$= \frac{-i}{z-w} \left( e^{i(z-w)t} \Big|_0^{\infty} - 1 \right)$$

0 für  $\eta > 0$

$$\Rightarrow \tilde{C}_{AB}(z) = i \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{C_{AB}(w)}{z-w}$$

"Hilbert-Transformierte"

betrachte gerade Autokorrelationsfunktion ( $B=A$ )

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

$$\Rightarrow C_{AA}(\omega) \stackrel{\substack{\text{benutze Def.} \\ \text{der Fouriertransf.}}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt C_{AA}(t) \underbrace{(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})}_{\sim \cos \omega t}$$

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

Folgerung für die Laplace-Transformierte

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

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  
Funktionslehre)

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

Haupttheorem

$$\mathcal{P} \int_a^b f(x) dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \int_a^{b-\epsilon} f(x) dx + \int_{a+\epsilon}^b f(x) dx \right)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tilde{C}_{AA}(\omega + i\epsilon) &= i \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{\omega - \omega'} + \pi \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' C_{AA}(\omega') \delta(\omega - \omega') \\ &= \underbrace{i \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{C_{AA}(\omega')}{\omega - \omega'}}_{\text{Imaginärteil}} + \underbrace{\pi C_{AA}(\omega)}_{\text{Realteil}} \end{aligned}$$

null!

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Re} \tilde{C}_{AA}(\omega + i\epsilon) = \pi C_{AA}(\omega)$$

Wird später gebraucht !!

Bemerkung:

Wir sehen aus der Rechnung auch:

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

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

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

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

$\uparrow$  mikroskopisch

Ende Exkurs

Zurück zum Lineare-Antwort-Theorem:

bekannte Grundgleichung für reink. lineares System

$$\langle \delta B(\underline{r}, t) \rangle = \int_{-\infty}^t dt' \int_{\mathcal{V}_{BA}} d\underline{r}' \Phi(\underline{r} - \underline{r}', t - t') V(\underline{r}', t')$$

Annahmen:

- Zeittranslationsinvarianz ("klein im Gleichgewicht!")
- Raumtranslationsinvarianz

Fouriertransf. bezgl. des Orts =

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

Entkoppel. bezgl.  $\underline{k}$

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

Folgerung im Frequenzraum

Ansatz für die Störung (monochromatisch)

$$V_{\underline{k}}(t) = V_{\underline{k}} e^{-i(\omega + i\epsilon)t} \quad \left| \begin{array}{l} \epsilon > 0 \\ \Leftrightarrow \lim_{t \rightarrow -\infty} V_{\underline{k}}(t) = 0 \end{array} \right.$$

Einsetzen:

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

Variablensubstitution

$$\tilde{t} = t - t'$$

$$\Rightarrow d\tilde{t} = -dt'$$

Grenzen:  $t' = -\infty \Rightarrow \tau \rightarrow +\infty$   
 $t' = t \Rightarrow \tau = 0$

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

Betrachte nun den Limes  $\epsilon \rightarrow 0$ :

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

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

mit  $\chi_{BA}(\underline{k}, \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^{\infty} d\tau \phi_{BA}(\underline{k}, \tau) e^{i(\omega+i\epsilon)\tau}$   
 dynamische Suszeptibilität

Weitere Berechnung der dyn. Suszeptibilität: Integration (\*)

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

partiell integrieren ( $\epsilon \rightarrow 0!$ )

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{V}\right) \left[ \langle \underline{B}_{\underline{k}}(\underline{z}) \underline{A}_{-\underline{k}}(0) \rangle e^{i(\omega+i\epsilon)\underline{z}} \right]_0^\infty \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(-\frac{1}{V}\right) \left[ \int_0^\infty d\underline{z} \langle \underline{B}_{\underline{k}}(\underline{z}) \underline{A}_{-\underline{k}}(0) \rangle \cdot i(\omega+i\epsilon) e^{i(\omega+i\epsilon)\underline{z}} \right] \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{1}{V}\right) \left[ \langle \underline{B}_{\underline{k}}(0) \underline{A}_{-\underline{k}}(0) \rangle \right. \\
 &\quad \left. + i(\omega+i\epsilon) \int_0^\infty d\underline{z} \langle \underline{B}_{\underline{k}}(\underline{z}) \underline{A}_{-\underline{k}}(0) \rangle e^{i(\omega+i\epsilon)\underline{z}} \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \chi_{BA}(\underline{k}, \omega) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{V} \left[ \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Fouriertransformiert von } C_{BA}(\underline{k}, t) \\ \text{bei } t=0}}{C_{BA}(\underline{k}, t=0)} \right. \\
 &\quad \left. + i(\omega+i\epsilon) \underbrace{\tilde{C}_{BA}(\underline{k}, \omega+i\epsilon)}_{\substack{\text{Laplace-Transformierte zu} \\ \text{komplexer Frequenz} \\ z = \omega+i\epsilon}} \right]
 \end{aligned}$$

Betrachte speziell den Fall  $B=A$

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

(XF)

## Statische Grenzfall

Betrachte den Realteil der dyn. Suszeptibilität

$$\begin{aligned}\operatorname{Re} \chi_{AA}(\underline{k}, \omega) &= \chi'_{AA}(\underline{k}, \omega) \\ &= \frac{1}{V} \left[ C_{AA}(\underline{k}, t=0) \right. \\ &\quad \left. - \omega \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} \tilde{C}_{AA}(\underline{k}, \omega + i\epsilon) \right]\end{aligned}$$

Setze  $\omega \rightarrow 0$

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

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

insgesamt: (im stat. Grenzfall)

$$\langle \Delta A_{\underline{k}} \rangle = \beta \frac{1}{V} \langle A_{\underline{k}} A_{-\underline{k}} \rangle \frac{1}{V_{\underline{k}}}$$

## Dynamischer Teil

aus  $(**)$  betrachte Imaginärteil

$$\begin{aligned} \text{Im } \chi_{AA}(\underline{k}, \omega) &= \chi_{AA}''(\omega) \\ &= \frac{\omega}{V} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Re } \tilde{C}_{AA}(\underline{k}, \omega + i\epsilon) \end{aligned}$$

Laplace-Transformiert

$$= \frac{\omega}{V} C_{AA}(\underline{k}, \omega) \Pi$$

Siehe Exkurs Fouriertransformiert von  $C_{AA}(\underline{k}, t)$  bzgl.  $\omega$  (und  $\underline{k}$ )!

Zusammenfassend

$$C_{AA}(\underline{k}, \omega) = \frac{V}{\Pi} \frac{1}{\omega} \chi_{AA}''(\underline{k}, \omega)$$

Fouriertransformierte von  
 $\langle A(\underline{r}, t) A(\underline{r}=0, t=0) \rangle$   
 raumzeit. 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