Lineare Antwort, Green-Kubo, Fluktuations-Dissipations Theorem

Franziska Böhme, Sophie Seidenbecher

05.07.2012

Theorie der Linearen Antwort

- Wie reagiert Hamiltonsches System auf äußere Störung?
- vollständiger Hamiltonoperator

$$H = H_0 + H_1(t)$$

- Störoperator

$$H_1(t) = -F(t)B$$

für $t \leq t_0$ sei $F(t) = 0 \Rightarrow$ System im Gleichgewicht

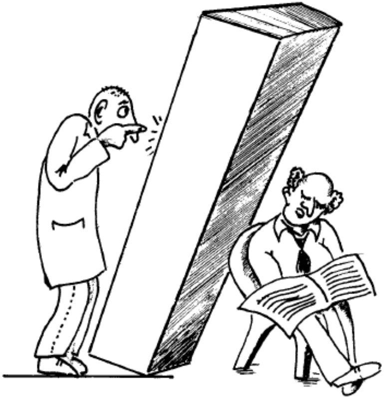


Fig. 1.2. Studying responses of a 'black box'.

Erwartungswerte im Nichtgleichgewicht

Erwartungswerte im Gleichgewicht

$$\langle A(t)\rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho_S(t)A\right)$$

- von-Neumann Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -\frac{i}{\hbar}\left[H, \rho(t)\right]$$

- mit der Lösung

$$\rho_S(t) = U(t,t_0)\rho_0 U^+(t,t_0)$$

$$\Rightarrow \langle A(t)\rangle = \mathrm{Tr}\left(U(t,t_0)\rho_0 U^+(t,t_0)A\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\rho_0 U^+(t,t_0)AU(t,t_0)\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\frac{e^{-\beta H_0}}{Z}U^+(t,t_0)AU(t,t_0)\right)$$

- kanonische Gleichgewichtsdichtesmatrix $\rho_0 = \frac{1}{Z}e^{-\beta H_0}$
- Zustandssumme $Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_0}\right)$

- Übergang ins Wechselwirkungsbild
- Bewegungsgleichung des Zeitentwicklungsoperators:

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H U(t, t_0)$$

mit dem Ansatz: $U(t, t_0) = e^{\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}} U'(t, t_0)$ woraus sich

$$i\hbar \frac{d}{dt} U'(t, t_0) = H_1'(t) U'(t, t_0)$$

ergibt, mit: $H_1'(t) = e^{\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}} H'(t) e^{\frac{-iH_0(t-t_0)}{\hbar}}$

Lineare Response-Näherung

- Integration der Bewegungsgleichung des Zeitentwicklungsoperators in Wechselwirkungsdarstellung und Entwicklung nach Potenzen des Störterms
- Abbruch nach 1.Potenz liefert:

$$\langle A(t)\rangle = \langle A\rangle_0 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \left\langle \left[A(t), B(t')\right]\right\rangle_0 F(t')$$

Kubo-Formel

$$\begin{aligned}\Delta \langle A(t) \rangle &= \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_0 \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dt' X_{AB}(t-t') F(t')\end{aligned}$$

mit der dynamischen Suszeptibilität oder auch „linear response“ Funktion (kausal!):

$$X_{AB}(t-t') = \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \left\langle \left[A(t), (B(t')) \right] \right\rangle_0$$

Fluktuations-Disspations Theorem

- System im Gleichgewicht unterliegt Fluktuationen
- durch äußere Störung wie z.b. anlegen eines Feldes
    - Nicht-Gleichgewicht
    - Reaktion: Änderung von Observablen
    - Bsp. Magnetisierung, el. Strom
- Antwort des Systems muss verschwinden wenn Störung nicht da
- $\rightarrow$ Antwort muss lineares Funktional der Störung sein

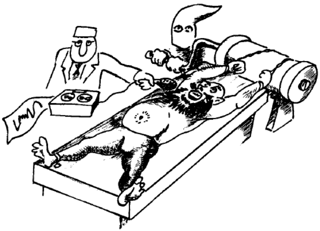


Fig. 1.3. Response functions are usually measurable experimentally.

Fluktuations-Dissipations Theorem (allg.)

Woher weiß ein System das sich zu einem Zeitpunkt t_0 im Nicht-Gleichgewicht befindet, ob es durch Fluktuationen oder durch eine äußere Störung dahin gebracht wurde?

$$X''_{AB}(\omega) = \frac{1}{2\hbar}\left(G^{>}_{AB}(\omega)\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right)$$

im klassischen Grenzfall:

$$X''_{AB}(\omega) = \frac{\beta\omega}{2} G^{>}_{AB}(\omega)$$

- Korrelationsfunktionen:

$$G^{>}_{AB}(t) = \langle A(t)B(0)\rangle$$
$$G^{<}_{AB}(t) = \langle B(0)A(t)\rangle$$

- $G^{>}_{AB}$: Maß für die Korrelation von Fluktuationen von A und B
- X''_{AB}: Beschreibung der Energiezunahme $\propto$ Dissipation

Was beschreibt X''_{AB}?

$\rightarrow$ eine Energieänderung des Systems durch die Störung! stationär

$$\frac{d}{dt}\langle E(t)\rangle = \frac{d}{dt}\mathrm{Tr}[\rho, H(t)]$$

$$= \mathrm{Tr}[\dot{\rho}, H(t)] + \mathrm{Tr}[\rho, \dot{H}(t)] = \langle \frac{\partial}{\partial t} H_1(t)\rangle$$

$$\dot{\rho} = \frac{i}{\hbar}[\rho, H]$$

$$\frac{d}{dt}\langle E(t)\rangle = -\langle B(t)\rangle \dot{F}(t)$$

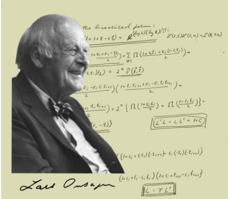
Transportkoeffizienten

Green-Kubo Relation

$$X_{AB} = \beta \int_0^\infty d\tau \langle AB(\tau) \rangle$$

- beinhalten lineare Antwort des Systems auf Störung
- 2 Klassen von Transportkoeffizienten
- (i) Reaktion auf externe Störung (σ, M) und (ii) auf interne Inhomogenitäten (D,η)

Onsager Reziprozitätsbeziehung



- Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Flüssen und Kräften, die in einem thermodynamischen System außerhalb des Gleichgewichts auftreten:
- Fouriersches Gesetz der Wärmeleitung: $\vec{\dot{q}} = -\lambda \nabla T$
- Ohmsches Gesetz der Stromleitung: $\vec{i} = -\sigma \nabla \phi$
- Erstes Ficksches Gesetz der Diffusion: $\vec{j} = -D \nabla c$
- Newtonsches Reibungsgesetz: $\vec{F} = -\eta A \nabla v_y$

Onsager Reziprozitätsbeziehung II

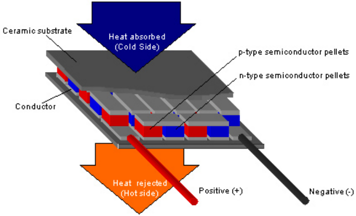
- Mehrere Störungen im System, Bsp: Änderung von Druck und Temperatur in einer Flüssigkeit
- Temperaturgradient erzeugt Wärmestrom, Druckgradient erzeugt Massenstrom
- ABER: auch Temperaturgradient erzeugt Massenstrom (Konvektion) und umgekehrt
- Onsager Reziprozitätsbeziehung: Betrag der Konvektion und des Druck-generierten Wäremstroms sind gleich groß

$$J_u = L_{uu} \nabla \frac{1}{T} - L_{u\rho} \nabla \frac{\mu}{T}$$

$$J_\rho = L_{\rho u} \nabla \frac{1}{T} - L_{\rho\rho} \nabla \frac{\mu}{T}$$

Peltier-Effekt/ Seebeck-Effekt

Stromfluss erzeugt Temperaturdifferenz und umgekehrt



Zusammenfassung

- Reaktion eines Hamiltonschen Systems auf Störung ist lineares Funktional der Störung
- dynamische Suszeptibilität
  $X_{AB}(t-t') = \frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\langle[A(t),(B(t'))]\rangle_0$
- Nicht-Gleichgewicht kann sowohl durch innere Fluktuationen als auch kleine Störung hervorgerufen werden $\longrightarrow$ Fluktuations-Dissipations Theorem
- lineare Antwort eines Systems durch Transportkoeffizienten darstellbar
- Green-Kubo Formel z.B. für Leitfähigkeit: $\sigma = \beta \int_0^\infty d\tau \langle jj(\tau)\rangle$

Vielen Dank für Eure Aufmerksamkeit!