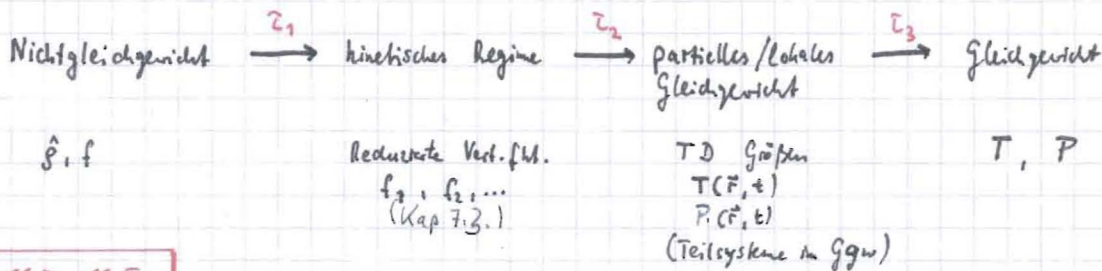


# 7. Nichtgleichgewicht und Transport

## 7.1. Systeme im Nichtgleichgewicht

- Bisher: Gleichgewicht. System durch wenige td. Variable charakterisiert  
Gesamtheit  $\hat{\rho} = \hat{\rho}(T, V, \dots)$
- Jetzt: Nichtgleichgewicht. i.a.  $\hat{\rho}$  beliebig!  $10^{23}$  Freiheitsgrade  
(klas.  $f(q, p, t)$ )

Die Relaxation eines Systems zum Gleichgewicht erfolgt in vielen Fällen „schrittweise“, d.h. verschiedene Zeitskalen spielen eine Rolle.



$$\tau_1 \ll \tau_2 \ll \tau_3$$

Dieses Schema entspricht einer schrittweisen Reduzierung der Freiheitsgrade.

Die Relaxation ist irreversibel und i.a. verbunden mit Entropieproduktion.

Achtung: Mikroskopische Gleichungen (Liouville, von-Neumann) reversibel.

Makroskopisches Verhalten jedoch irreversibel.

System läuft von weniger wahrscheinlichem zu mehr wahrscheinlicher

Makrozustand. ( $\hat{\rho} \rightarrow S \rightarrow \max$  im abgeschl. System)

Achtung: Irreversibilität  $\neq$  Dissipation

(siehe Mischungsentropie)

(Dissipation in Quantenstatistik üblicherweise beschrieben durch Kopplung des Systems an externes „Bad“ – so läßt sich auch der Q.M. Meßprozess verstehen!)

Bei der Behandlung von Nichtgleichgewichtsphänomenen untersucht man:

- Relaxation zum Gleichgewicht  $\rightarrow$  Relaxationsraten
- Transport als Folge eines Feldes  $\rightarrow$  Transportkoeffizienten

Für kleine Abweichungen vom Gleichgewicht läßt sich eine volle quantenstatistische Theorie leicht formulieren: Theorie der linearen Antwort (linear response)

Für langsame Änderungen makroskopischer Größen kann man phänomenologische Verallgemeinerungen der Thermodynamik benutzen: Irreversible Thermodynamik (+ Hydrodynamik + ...)

## 7.2. Mikroskopische Reversibilität und makroskopische Irreversibilität

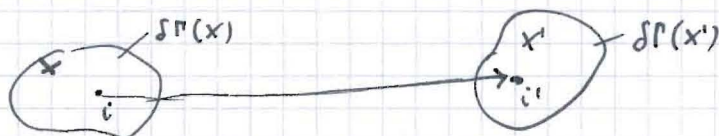
Liouville- und von-Neumann-Gl. sind reversibel!,  
während makroskopische Thermodynamik (erfahrungsgemäß) irreversibel ist.

Betrachte abgeschlossenes System (mikrokanonisch)  $\Rightarrow$  alle Mikrozustände gleichwahrscheinlich

Makrozustand  $X$  (charakterisiert durch wenige Variable, z.B.  $p(\mu), T(\mu), \dots$ )  
mit Wahrscheinlichkeit  $p(X) = \frac{\delta\Gamma(X)}{\delta\Gamma} = \frac{\text{Anzahl Mikrozustände für } X}{\text{Gesamtzahl Mikrozustände im Ensemble}}$

Mikrozustände folgen unitärer Zeitervolution (Hamilton- oder Schrödinger-Gl.)  
 $i \rightarrow i'$  in gegebenem Zeitintervall

Ziel: Berechnung der Wahrscheinlichkeit  $p(X \rightarrow X')$  dafür, dass sich gegebener Makrozustand  $X$  in anderen Makrozustand  $X'$  entwickelt



$$p(X \rightarrow X') = \frac{\delta\Gamma(X \rightarrow X')}{\delta\Gamma(X)} = \frac{\text{Anz. Mikrozustände in } X, \text{ die sich nach } X' \text{ entwickeln}}{\text{Anzahl Mikrozustände in } X}$$

$$p(X' \rightarrow X) = \frac{\delta\Gamma(X' \rightarrow X)}{\delta\Gamma(X')}$$

Mikroskopische Reversibilität:

$$\delta\Gamma(X \rightarrow X') = \delta\Gamma(X' \rightarrow X) \quad \text{unter Zeitumkehr}$$

(d.h.  $i \rightarrow i'$  wird unter Zeitumkehr zu  $i'^* \rightarrow i^*$ ,  
\* = umgekehrte Gewdw.)

$$\leadsto \frac{p(X \rightarrow X')}{p(X' \rightarrow X)} = \frac{\delta\Gamma(X')}{\delta\Gamma(X)} = \exp \left[ \frac{S(X') - S(X)}{k} \right]$$

$S = -k \sum v_i \ln v_i = -k \ln \delta\Gamma$

$$\leadsto S(X') > S(X) \quad \leadsto \quad p(X \rightarrow X') > p(X' \rightarrow X)$$

$$S(X') - S(X) \gg k_B \quad p(X \rightarrow X') \gg p(X' \rightarrow X)$$

$$S(X') = S(X)$$

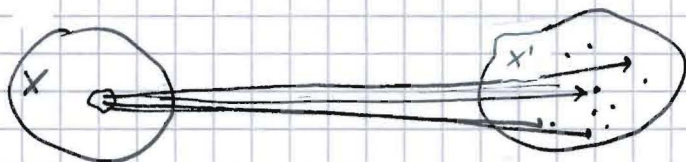
$$p(X \rightarrow X') = p(X' \rightarrow X)$$

Irreversibilität

Gleichgerichtungsprozess

makroskopische Irreversibilität:

System entwickelt sich von weniger wahrscheinlichem zu wahrscheinlicherem Makrozustand, Abgeschlossenes System:  $S \rightarrow \max$

Chaotisches System:

Mikrozustände in  $X'$  „verdünnt“  
durch chaotische Dynamik  
(exponentielle Sensitivität)

→ Präparation für Umkehrprozess unmöglich

Achtung

Irreversibilität entsteht durch Vergrößerung der Beschreibung,  
d.h. durch Informationsverzicht!

Volle Beschreibung liefert dagegen keine Irreversibilität, d.h.

$S = -k \sum p_i \ln p_i$  ist konstant (!) unter von-Neumann-Evolution.  
↑  $S_{\text{Gibbs}}$ .

Interpretation des 2. Hauptsatzes (siehe auch Arbeiten von E.T. Jaynes):

$S_{\text{exp}}$  misst Anzahl aller Mikrozustände eines gegebenen Makrozustandes,  
nicht nur den Anteil, wo ein konkreter Prozess endet!

Damit ist klar:  $\checkmark$  Mikroskopischer Entropiebegriff erfordert Angabe der Genauigkeit / Kontrolle / Menge der Systemparameter.

## 7.3. Boltzmann-Gleichung

Quasiklassische Transporttheorie  $\hat{=}$  betrachte System im Phasenraum  
(Wellenpakete; Unschärfe  $\ll$  char. Längen)

Hamilton-Funktion

$$H(q_i, p_i) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i U(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$$

Verteilungsfkt im Phasenraum  $f(q_i, p_i, t)$  erfüllt Liouville-Gleichung:

$$\frac{d}{dt} f(q_i, p_i, t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left( \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial f}{\partial p_i} \right) = 0$$

Oft genügt es, eine (reduzierte) Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion  $f_1(q, p, t)$  zu betrachten:

$$f_1(q, p, t) = N \int dq_2 \dots dq_N dp_2 \dots dp_N f(q, p, q_2, p_2, \dots, q_N, p_N, t)$$

$$\text{Norm} \quad N = \int d^3p d^3q f_1(q, p, t)$$

$f_1$  beschreibt also die Wahrscheinlichkeitsdichte, irgendwo Teilchen bei  $(q, p)$  zu finden.

Analog lassen sich  $n$ -Teilchen-Verteilungsfkt definieren, z.B.

$$f_2(1, 2, t) = N(N-1) \int d(3) \dots d(N) f(1, 2, 3, \dots, N, t)$$

Mittels der reduzierten Verteilungsfunktionen lassen sich physikalische Größen leicht ausdrücken, z.B.

$$n(\vec{q}, t) = \int d^3p f_1(q, p, t) \quad \text{Teilchendichte}$$

$$\vec{j}(\vec{q}, t) = \int d^3p \frac{\vec{p}}{m} f_1(q, p, t) \quad \text{Teilchenstromdichte}$$

Wir wollen jetzt eine Bewegungsgleichung für die Einzelteil Verteilung ableiten.

- Zunächst ohne Wechselwirkung,  $V=0$ .

$$\begin{aligned}\dot{\vec{r}} &= \vec{p}/m = +\partial H/\partial \vec{p} \\ \dot{\vec{p}} &= -\partial V/\partial \vec{r} = -\partial H/\partial \vec{r} = \vec{F}\end{aligned}$$

Kontinuitätsgleichung für  $f_1$ :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{\nabla}_i (\vec{V}_i f_1) = \frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{q}} (\vec{F}_m f_1) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}} (\vec{F} f_1) = 0$$

$$\rightarrow \left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{q}} + \vec{F} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right) f_1(\vec{r}, \vec{p}, t) = 0 \quad \text{Stoßfreie Boltzmann-Gleichung}$$

- Mit Wechselwirkung  $\Rightarrow$  allg.:

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{q}} + \vec{F} \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \right) f_1 = \left( \frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{\text{Stoß}} =: \Gamma[f_1] \quad \text{Boltzmann-Gleichung}$$

Formal erhält man den Stoßterm aus der Liouville-Gleichung ( $N$   $\int d(2) \dots d(N)$ ):

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{q}_1} - \frac{\partial U}{\partial \vec{q}_1} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} - \frac{N-1}{N-1} \int d(2) \frac{\partial}{\partial \vec{q}_1} \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} V(\vec{q}_{12}) f_2(1,2,t) = 0$$

Hier taucht  $f_2()$  auf; dafür kann man wiederum eine Bew.gl. aufschreiben, die aber  $f_3()$  enthält usw.

(BBGKY-Hierarchie: Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood, Yvon)

Man kann nun nähern. Zunächst aufspalten:

$$U = U_0 + U', \quad U_0 \text{ glatt, } U' \text{ zufällige Störung}$$

$$f_2(1,2) = f_1(1) f_1(2) + g(1,2), \quad g \text{ beschreibt Korrelationen}$$

$$\int d(2) V(\vec{q}_{12}) f_2(1,2) = f_1 \underbrace{\int d(2) V(\vec{q}_{12}) f_1(2)}_{\bar{V}(\vec{q}_1)} + \int d(2) V(\vec{q}_{12}) g(1,2)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{q}_1} + \frac{\partial (U_0 + \bar{V})}{\partial \vec{q}_1} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1} = \underbrace{\frac{\partial U'}{\partial \vec{q}_1} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}_1}}_{\text{Stoßterm } \Gamma[f_1]} + \frac{\partial}{\partial \vec{p}_1} \int d(2) \frac{\partial V(\vec{q}_{12})}{\partial \vec{q}_1} g(1,2)$$

Im Festkörper kann Ortsabhängigkeit oft vernachlässigt werden:

$$f_1(\vec{q}, \vec{p}, t) \rightarrow f_{\vec{k}} \quad , \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad , \quad \text{keine zeitl. für störung Verteilung}$$

Im Gleichgewicht erwarten wir zeitunabhängig

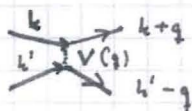
$$f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}^0 = \left( \exp((\epsilon_{\vec{k}} - \mu(T))/kT) + 1 \right)^{-1} \quad \text{Fermi-Verteilung}$$

Damit auch:  $\underline{I[f_{\vec{k}}^0]} = 0$  (System relaxiert zum Gleichgewicht)

Im Nichtgleichgewicht:  $f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}^0 + f_{\vec{k}}^1$  ,  $f_{\vec{k}}^1 \sim$  Störung

### Diskussion des Stoßterms

a) Elektron-Elektron-Stöße. Erhaltung von Gesamtimpuls und Gesamtenergie.



$$V(q) = \int d^3r e^{-iqr} V(r)$$

$$\left( \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{el-el} = -\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k', q} |V(q) - \delta_{00} V(k-k'+q)|^2 \delta(\epsilon_k + \epsilon_{k'} - \epsilon_{k+q} - \epsilon_{k'-q}) [f_{\vec{k}} f_{\vec{k}'} (1-f_{\vec{k}+q}) (1-f_{\vec{k}'-q}) - f_{\vec{k}+q} f_{\vec{k}'-q} (1-f_{\vec{k}}) (1-f_{\vec{k}'})]$$

(ohne Beweis; anschaulich klar)

b) Störstellenstreuung. Energieerhaltung, keine Impulserhaltung



$$\left( \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{imp} = -\frac{2\pi}{\hbar} N_{imp} \sum_{k'} |U_{imp}(k-k')|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}'})$$

Relaxationszeitnäherung ( $\hat{=}$  einfachste sinnvolle Näherung)

$$\underline{\left( \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{stop} = I[f_{\vec{k}}] = -\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0)}$$

$$\tau_{\vec{k}} = \text{Relax.zeit}$$

$$(f_{\vec{k}}^1 = f_{\vec{k}}^1(t=0) e^{-t/\tau_{\vec{k}}})$$

## Elektrische Leitfähigkeit

Strom  $\vec{j} = e \sum_{k\sigma} \vec{v}_k f_k$  als Antwort auf Feld  $\vec{E}$

Stationäre Situation, homogen, Relax. Zeit approx  $\rightarrow$  Boltzmann-Gleichung

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \nabla_k f_k = \left( \frac{\partial f_k}{\partial t} \right)_{\text{imp}} = -\frac{1}{\tau_k} (f_k - f_k^0)$$

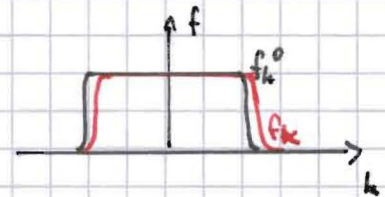
Mit  $f_k = f_k^0 + f_k'$  ergibt sich in linearer Ordnung in  $E$  ( $f' \sim E$ ):

$$f_k' = e \vec{E} \cdot \vec{v}_k \tau_k \left( -\frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} \right) \quad \left( \text{da } \frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} = \frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} \frac{\partial \epsilon_k}{\partial \hbar k} \right)$$

$\rightarrow \vec{j} = e \sum_{k\sigma} \vec{v}_k f_k$  ( $f_k \rightarrow f_k'$  wg. Symmetrie)

$$\tau_k \text{ weilt von } k \rightarrow -\tau e^2 \sum_{k\sigma} \vec{v}_k \otimes \vec{v}_k \frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k} \stackrel{=}{=} \underline{\underline{\sigma}}$$

Leitfähigkeitskursor  $\frac{\sigma}{\Omega}$



Bei  $T \rightarrow 0$  liefert  $\frac{\partial f_k^0}{\partial \epsilon_k}$  nur Beitrag nahe der Fermifläche,  
für ein kubisches System mit isotroper Fermifläche und  $\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$   
erhält man:

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{\tau e^2 n}{m}, \quad n = \frac{N}{V} \quad \text{Teilchendichte} \quad (\text{Druck})$$

Ähnlich lassen sich auch andere Transportgrößen berechnen.

Z.B. Wärmeleitfähigkeit:

Räumliche Variation  $T(\vec{r})$ ,  $\mu_0(\vec{r})$ .

$$\text{Lokales Gleichgewicht } f_k^0 = \left( \exp \left( \frac{\epsilon_k - \mu(\vec{r})}{k_B T(\vec{r})} \right) + 1 \right)^{-1}$$

Liefert i.a. Teilchen- und Wärmetransport.



## 7.4. Theorie der linearen Antwort (linear response)

(steht g.m. Störungsrechnung)

System (ohne Störung):  $\hat{H}_0$

Äußeres Feld:  $b(t)$ , koppelt an  $\hat{B}$  (z.B.  $b = \text{mag. Feld}$ ,  
 $\hat{B} = \text{Magnetisierung}$ )

$$\leadsto \underline{\hat{H} = \hat{H}_0 - \hat{B} b(t)}$$

Betrachten Observable  $\hat{A}$ . Im Gleichgewicht  $\langle \hat{A} \rangle_0 = \text{Sp}(\hat{\rho}_0 \hat{A})$  ( $b=0$ ).

In Anwesenheit der Störung ändert sich  $\langle \hat{A} \rangle$ . Für kleine Störungen

ist  $\Delta \langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \hat{A} \rangle(t) - \langle \hat{A} \rangle_0$  linear in  $b$ .

$$\leadsto \underline{\Delta \langle \hat{A} \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t, t') b(t')}$$

Diese Gleichung definiert die dynamische Response-Funktion (oder verallgemeinerte dynamische Suszeptibilität)  $\chi_{AB}$ .

Aus Homogenität der Zeit folgt  $\chi_{AB}(t, t') = \chi_{AB}(t-t')$ ;

aus Kausalität folgt  $\chi_{AB}(t < 0) = 0$ .

Es folgt mit

$$\chi(t-t') = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t-t')} \chi(\omega)$$

$$\leadsto \Delta \langle \hat{A} \rangle(\omega) = \chi_{AB}(\omega) b(\omega)$$

Wir wollen jetzt  $\chi_{AB}(t-t')$  ausrechnen. Dazu nehmen wir an, dass Störung zum Zeitpunkt  $t_0$  (in der Vergangenheit) adiabatisch eingeschaltet wird, d.h.  $b(t) = 0$  für  $t < t_0$ . System ist im Gleichgewicht mit  $B_{ad}$  für  $t < t_0$ :  $\hat{\rho}(t < t_0) = \hat{\rho}_0$  (ungestörter Dichteop.)

Berechnen von  $\chi_{AB}$  in Störungstheorie. Dazu  $Sp(\hat{\rho} \hat{A})$  im Heisenberg-Bild:

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = Sp(\hat{\rho} \hat{A}_H(t)) = Sp(\hat{\rho}_0 \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t))$$

Dabei ist  $\hat{U}(t)$  der Zeitentwicklungsoperator mit

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t)$$

$\hat{U}$  kann zerlegt werden in ungestörten Anteil und „S-Matrix“:

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{S}(t, t_0) \quad \text{mit} \quad \hat{S}(t < t_0) = 1.$$

Die Zeitentwicklung von  $\hat{S}$  ist gegeben durch Störung:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = -b(t) \hat{B}_{\hat{H}_0}(t) \hat{S}(t, t_0)$$

mit

$$\hat{B}_{\hat{H}_0}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{B} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

Formale Integration:

$$\hat{S}(t, t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' b(t') \hat{B}_{\hat{H}_0}(t') \hat{S}(t', t_0)$$

Entwickeln bis zu linearer Ordnung:

$$\hat{S}(t, t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' L(t') \hat{B}_{H_0}(t')$$

Einsetzen:

$$\begin{aligned} \hat{A}_H(t) &= \hat{S}^\dagger(t, t_0) e^{iH_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-iH_0 t/\hbar} \hat{S}(t, t_0) = \hat{S}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_{H_0}(t) \hat{S}(t, t_0) \\ &= \hat{A}_{H_0}(t) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' L(t') \left[ \hat{A}_{H_0}(t), \hat{B}_{H_0}(t') \right] + \mathcal{O}(L^2) \end{aligned}$$

Damit können wir ablesen:

$$\chi_{AB}(t, t') = \frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \left\langle \left[ \hat{A}_{H_0}(t), \hat{B}_{H_0}(t') \right] \right\rangle_{H_0}$$

(Kubo-  
Formel)

mit  $\langle \dots \rangle_{H_0} = \text{Sp}(\hat{\rho}_0 \dots)$ .  $\Theta(t-t')$  ist Ausdruck der Kausalität.

Dieses Resultat für die Response-Fkt (oder Suszeptibilität)

ist bemerkenswert: Die lineare Antwort des Systems (Nichtgleichgewicht!) wird vollständig durch Gleichgewichtseigenschaften (nämlich eine zeitabh. Korrelationsfunktion) ausgedrückt.

### Beispiele

- Dielektrizitätsfunktion  $\epsilon$

$$\vec{D}(t) = \int dt' \epsilon(t-t') \vec{E}(t') = \vec{E} + 4\pi \vec{P}$$

$$\vec{P}(t) = \int dt' \chi_{el}(t-t') \vec{E}(t') \quad \leadsto \quad \epsilon_{ij} = \delta_{ij} + 4\pi \chi_{ij}$$

Ankoppelung des Feldes:

$$H^{el} = - \int d^3r \hat{\Pi}(\vec{r}) \hat{E}(\vec{r}) \quad , \quad \hat{\Pi}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum q_i \vec{r} \delta(\vec{r}-\vec{r}_i)$$

Polarisation

$\leadsto$

$$\chi_{el,ij}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \left[ \hat{\Pi}_i(t), \hat{\Pi}_j(0) \right]$$

• Magnetische Suszeptibilität  $\chi_{\text{mag}}$

$$\vec{M}(t) = \int dt' \chi_{\text{mag}}(t-t') \vec{B}(t')$$

$$\rightarrow \chi_{\text{mag}; ij}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \chi^2 [ \hat{S}_i(t), \hat{S}_j(0) ] \quad (m = \gamma S)$$

• Elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$

$$\vec{j} = \vec{\sigma} \vec{E}$$

$$\rightarrow \sigma_{ij}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) [ \hat{j}_i(t), \hat{\Pi}_j(0) ]$$

Unter gewissen Bed. kann man  $\sigma$  auch als Strom-Strom-Korrelationsfunktion oder als Geschwindigkeits-Geschwindigkeits-Korrelationsfunktion schreiben.

Von besonderem Interesse sind Fälle mit  $A=B$ ,  $\chi = \chi_{AA}$ .

In der Fouriers transformierten  $\chi(\omega)$  kann  $\omega$  als komplexe Variable aufgefaßt werden.

Def  $\chi(\omega + i\eta) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega) \quad (\eta \rightarrow 0^+; \chi', \chi'' \text{ reell})$

(Der Term  $i\eta$  sichert Konvergenz in Integrale mit  $e^{i\omega t} e^{-\eta t}$ .)

Es ergibt sich:

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

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

Außerdem  $\omega \chi''(\omega) \geq 0$ .

Es zeigt sich, daß  $\chi''$  mit Energieabsorption (d.h. Dissipation) verknüpft ist:

$$\Delta E = \int dt \frac{d}{dt} \langle E(t) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega \chi''_{BB}(\omega) |b(\omega)|^2 \geq 0$$

Da  $\chi''$  mittels Kubo-Formel durch Gleichgewichtsfluktuationen  $\langle [B, B] \rangle$  ausgedrückt werden kann, spricht man vom Fluktuation-Dissipation-Theorem.

Im Limes  $\omega \rightarrow 0$  ist  $\chi''(0)$  die statische thermodyn.  
Suszeptibilität, die sich auch als zweite Ableitung der freien  
 Energie ergibt.

(Beachte: Bei der elektr. Leitfähigkeit ist gemäß Konvention der  
Realteil der absorptive Teil!  $\epsilon(\omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\omega)$ )

Zur konkreten Auswertung von  $\chi_{AB}$  muß der Korrelator  
 $\langle [A, B] \rangle$  mittels geeigneter Näherungen berechnet werden.

Für die Leitfähigkeit benötigen wir z.B. die  $\langle V(t) V(0) \rangle$ -  
 Korrel. fun. Im Rahmen eines einfachen Relaxationszeitmodells erhält  
 man  $\langle V(t) V(0) \rangle = v_F^2 e^{-t/\tau}$  und schließlich

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{\tau^{-1} - i\omega} \quad (\text{wie bekannt})$$

Die dargestellte Lineare Response-Theorie ist die allgemeine  
 quantenstatistische Theorie zur Beschreibung linearer Zusammenhänge  
 zwischen Ursachen (Kräfte, Felder) und Wirkungen (Ströme, Magnetisierung).  
 Sie läßt sich für nichtlineare Prozesse erweitern (höhere Ordnungen  
 in  $b^{\hat{}}$ ).