

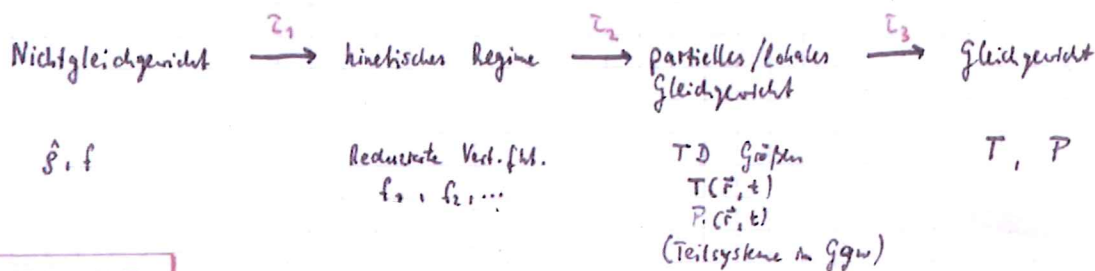
4. Dynamik und Antworttheorie

(Ziel: Externe Störung
& Messung)

4.1. Systeme im Nichtgleichgewicht

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

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.

Macroscopisches Verhalten jedoch irreversibel.

System läuft von weniger wahrscheinlichem zu mehr wahrscheinlichem

Macrozustand. ($\hat{\rho} \rightarrow S \rightarrow \max$ 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 + ...)

Bem.: Mikroskopische Beschreibung von Thermalisierung insb. abgeschlossener Quantensysteme ist nicht trivial und nur in Anfängen verstanden!

4.2. Korrelationsfunktionen und Antwortfunktionen

Für zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} definieren wir

Korrelationsfunktion $C_{AB}(t, t') = \langle \hat{A}(t), \hat{B}(t') \rangle$

Retardierte Greensche Fkt $G_{AB}^{\pm}(t, t') = -i \Theta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')] \rangle$

Dabei sind \hat{A} und \hat{B} kl. (orh. abh.) Operatoren.

G^{\pm} heißt (i) Einkeilchen-Greenfkt falls \hat{A}, \hat{B} Erzeuger / Vernichter für Bosonen oder Fermionen sind

(ii) Zweikeilchen-Greenfkt falls \hat{A}, \hat{B} Operatoren für Observable wie Dichte, Magnetisierung etc. sind.

$\eta = -$ für bosonische Operatoren (und Fall (ii)),

$\eta = +$ für fermionische Operatoren.

In Experimenten wird häufig die Antwort eines Systems auf (kleine) externe Felder gemessen. Formel:

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

\uparrow System, zeitunabh. \nwarrow Operator für Feldanpassung \swarrow äußeres Feld

Beispiele:

	$b = \text{Magnetfeld } \vec{h}$	\leadsto	$\hat{B} = \text{Magnetisierung } \sum_i \vec{m}_i$
	$b = \text{elekt. Feld } \vec{E}$	\leadsto	$\hat{B} = \text{Dipolmoment } \sum_i q_i \vec{r}_i$

Kleine Störung \leadsto lineare Antwort

Isotherme Suszeptibilität

Zeitunabh. Störung, System gekoppelt an Bad.

$$\text{Dichteoperator } \rho = \rho_0 + \Delta\rho \quad \left. \begin{array}{l} \rho_0 \propto e^{-\beta \hat{H}_0} \\ \rho \propto e^{-\beta \hat{H}} \end{array} \right\} \text{Gleichgewicht!}$$

Linearisieren $\Delta\rho \propto b$

Observable \hat{A} :

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}(\rho \hat{A}), \quad \langle \hat{A} \rangle_0 = \text{Sp}(\rho_0 \hat{A})$$

$$\leadsto \underline{\Delta \langle \hat{A} \rangle = \text{Sp}(\Delta\rho \hat{A}) =: \chi_{AB}^T b} \quad \text{Def. von } \chi^T$$

Dynamische Suszeptibilität

Zeitabh. Störung $b(t)$, wird adiabatisch eingeschaltet bei $t = t_0$

System im Gleichgewicht mit Bad für $t < t_0$; ($b = 0$ für $t < t_0$)

Bad wird abgeschaltet für $t > t_0$. (Grenzwert $t_0 \rightarrow -\infty$ meist unproblematisch)

Linearisierung ergibt

$$\underline{\Delta \langle \hat{A} \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t, t') b(t')} \quad \text{Def. von } \chi(t, t')$$

$$\hat{H}_0 \text{ zeitunabh. } \leadsto \chi(t, t') = \chi(t - t')$$

$$\text{Kausalität } \leadsto \chi(t < 0) = 0$$

$$\text{Fourier-Transform } \chi_{AB}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{AB}(t), \quad \chi_{AB}(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} \chi_{AB}(\omega)$$

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

Isotherme (adiabatische) Suszeptibilität

Konstantes $b(t) = b$ (mit adiab. Einschalten $b \propto \lim_{\eta \rightarrow 0} e^{-\eta t}$)

$$\underline{\chi_{AB}^{is} = \chi_{AB}(\omega=0) = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{AB}(t')}$$

Achtung:

$$\chi^{is} \neq \chi^T \text{ ist möglich}$$

\uparrow isoliert \uparrow ggw mit Bad

(Unterschied existiert für Erhaltungsgrößen!)

4.3. Theorie der linearen Antwort (linear response)

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

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

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:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t_0)}{\partial t} = -b(t) \hat{B}_{H_0}(t) \hat{S}(t, t_0)$$

mit

$$\hat{B}_{H_0}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{B} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

Formale Integration:

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

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:

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

(t_0) $\rightarrow -\infty$

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 ϵ

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

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

Ankoppelung des Feldes:

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

Polarisation

\leadsto

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

• Magnetische Suszeptibilität χ_{mag}

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

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

• Elektrische Leitfähigkeit σ

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

$$\leadsto \sigma_{ij}(t) = \frac{1}{\hbar} \theta(t) [\hat{j}_i(t), \hat{\Pi}_j(0)]$$

Unter gewissen Bed. kann man σ auch als Strom-Strom-Korrelationsfunktion oder als Geschwindigkeits-Geschwindigkeits-Korrelationsfunktion schreiben.

4.4. Bewegungsgleichungen

Ziel: Ableiten einfacher Formeln für Green'sche Fkt

Betrachte
(H zeitunv.)

$$G_{AB}^r(t) \equiv \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_t = -i \theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] \rangle$$

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

Jetzt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_t &= -i \theta(t) \langle [\dot{\hat{A}}(t), \hat{B}(0)] \rangle - i \delta(t) \langle [\hat{A}, \dot{\hat{B}}] \rangle \\ &= \langle\langle \dot{\hat{A}}; \hat{B} \rangle\rangle_t - i \delta(t) \langle [\hat{A}, \dot{\hat{B}}] \rangle \end{aligned}$$

Definiere Laplace-Transform (halbseitige Fourier-Transform von θ):

$$G_{AB}(z) = \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_z = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_t \quad (\text{Im } z > 0)$$

Part. Int:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_t = -iz \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{izt} \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_t = -iz \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_z$$

↪

$$\underline{z \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_z + \frac{1}{\hbar} \langle\langle \mathcal{L} \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_z = \langle [\hat{A}, \dot{\hat{B}}] \rangle}$$

\uparrow
 $\mathcal{L} \hat{A} = [\hat{H}, \hat{A}]$ Liouville-Operator

Rücktransform

$$G_{AB}^r(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i(\omega+i\delta)t} G_{AB}(\omega+i\delta)$$

Beispiel: Ein Teilchen - Greenfkt für freie Elektronen

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}$$

Hier ist Zeitabhängigkeit bzgl $\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}$ zweckmäßig, d.h.

$$\hat{c}_{k\sigma}(t) = e^{i\hat{K}t} \hat{c}_{k\sigma} e^{-i\hat{K}t} \quad (t=1)$$

Betrachte $G(k\sigma, k'\sigma', z) = \langle\langle \hat{c}_{k\sigma} ; \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_z$. ($\eta = +$)

Dazu $[\hat{c}_{k\sigma}, \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$

und $\mathcal{L} \hat{c}_{k\sigma} = [\hat{K}, \hat{c}_{k\sigma}] = -(\varepsilon_k - \mu) c_{k\sigma}$
 $\uparrow \hat{K} = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \hat{c}_{k\sigma}$

Bewgl. liefert

$$z \langle\langle \hat{c}_{k\sigma} ; \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_z - (\varepsilon_k - \mu) \langle\langle \hat{c}_{k\sigma} ; \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_z = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}$$

↪

$$\langle\langle \hat{c}_{k\sigma} ; \hat{c}_{k'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_z = \frac{\delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}}{z - (\varepsilon_k - \mu)}$$

oder

$$G(k, z) = \langle\langle \hat{c}_{k\sigma} ; \hat{c}_{k\sigma}^\dagger \rangle\rangle_z = \frac{1}{z - (\varepsilon_k - \mu)}$$

(Pol bei EinTeilchenenergie)

4.5. Harmonischer Oszillator

Geschwindigkeitsproportionale Dämpfung $\vec{f}_{\text{res}} = -\gamma m \vec{v}$

Bewegungsgleichung in 1d: $\ddot{x} + \omega_0^2 x + \gamma \dot{x} = f/m$

Federkonstante K ,
 $m\omega_0^2 = K$

Freie Bewegung ($f=0$): $x = A e^{i\omega t}$ (Re!)

$$\leadsto \omega = \pm \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2/4} - i\gamma/2$$

ω_1 ($\omega_0^2 \gtrless \gamma^2/4$ oszillierend
überdämpft)

Stark überdämpfter Fall $\omega_0^2 \ll \gamma^2/4$; dann wird Abfall durch

Im ω_1 dominiert, mit Zeitkonstante $\tau_s^{-1} \approx \frac{\omega_0^2}{\gamma}$. Dies entspricht

dem Vernachlässigen des \ddot{x} -Terms in Bew.gleichung!

Antwort - Fkt (Entwickeln in f !)

$$\underline{\chi(\omega) := \frac{\partial x(\omega)}{\partial f(\omega)} = \frac{1}{m} \frac{1}{-\omega^2 + \omega_0^2 - i\omega\gamma}}$$

$\leadsto \chi$ hat Pole bei (komplexen) Eigenfrequenzen des Oszillators.

Statische Kraft f erzeugt Auslenkung $x = f/K = f/m\omega_0^2$.

Dies ist Grenzfall $\omega \rightarrow 0$ von χ :

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(\omega) = \frac{1}{m\omega_0^2} = \frac{\partial x}{\partial f} = \chi$$

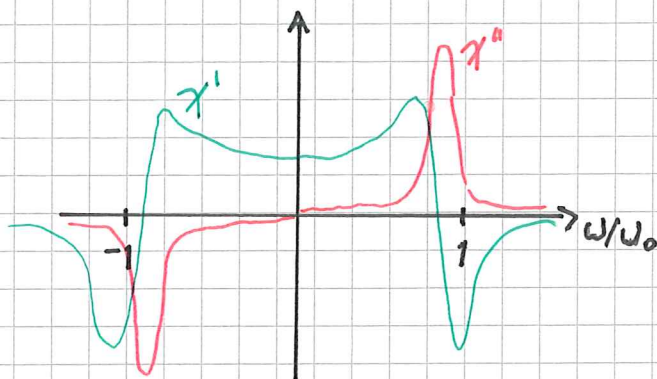
Imaginärteil $\chi''(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\omega\gamma}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + (\omega\gamma)^2}$

$$= \frac{1}{2m\omega_1} \left(\frac{\gamma/2}{(\omega - \omega_1)^2 + (\gamma/2)^2} - \frac{\gamma/2}{(\omega + \omega_1)^2 + (\gamma/2)^2} \right)$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \chi''(\omega) = \frac{\pi}{2m\omega_0} \left(\delta(\omega - \omega_0) - \delta(\omega + \omega_0) \right)$$

Real teil $\chi'(\omega) = \frac{1}{m} \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2 \gamma^2}$

Schwungfall: χ'' Peak bei ω_1



Überdämpfter Fall: χ'/ω Peak bei $\omega = 0$

Stark überdämpfter Fall: $\chi(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - i\gamma\omega} = \chi \frac{1}{1 - i\omega\tau_s}$

$$\chi''/\omega = \chi \frac{\tau_s^{-1}}{\omega^2 + \tau_s^{-2}}$$

Dissipation

Getriebener Oszillator im stationären Zustand:

Externe Kraft verrichtet Arbeit, die über Reibung dissipiert wird.

Leistung $\frac{dW}{dt} = f(t) \dot{x}(t)$

über Periode $\overline{\frac{dW}{dt}} = \frac{1}{T} \int_0^T dt f(t) \dot{x}(t)$

$$f(t) = f_0 e^{-i\omega t} \Rightarrow \dots$$

$$= \frac{1}{2} f_0^2 \underbrace{\omega \chi''(\omega)}_{> 0}$$

$\chi''(\omega)$ beschreibt Energieabsorption ($\hat{=}$ Dissipation) durch System!

4.6. Diffusion

Teilchen in Lösung oder schwebend in Flüssigkeit

Teilchendichte $n(\vec{r}, t)$ erfüllt Kontinuitätsgleichung:

$$\underline{\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0} \quad \text{mit } n(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}(t))$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \sum_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}(t))$$

Erwartung (ohne äußeres Potential):

System erreicht Gleichgewicht wo $n(\vec{r})$ homogen ist.

Inhomogene Dichte erzeugt dann (mittleren) Strom, linearisiert:

$$\underline{\vec{j} = -D \vec{\nabla} n} \quad \text{mit } D \equiv \text{Diffusionskonstante}$$

(1. Ficksches Gesetz)

Bem: - Phänomenologisches Gesetz

- \vec{j} ungerade unter Zeitumkehr, $\vec{\nabla} n$ gerade \curvearrowright D ist dissipativer Koeff!

Zusammen:
$$\underline{\frac{\partial n}{\partial t} = D \Delta n}$$

(2. Ficksches Gesetz $\hat{=}$ Diffusionsgleichung)

Lösen mit Wellenansatz ergibt $\omega = -i D q^2 \hat{=}$ überdämpfte Dynamik

In $d=1$ lautet die explizite Lsg für die Anfangsbed $n(x, t=0) = \delta(x-x_0)$:

$$n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}\right) \quad \left(\text{vgl. Prop für freies TL.}\right)$$

$$\left(\langle x \rangle = x_0; \quad \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = 2Dt\right)$$

Lösung für δ -förmige Inhomogenität (bei $x_0=0$) in beliebiger Dimension

$\hat{=}$ Greensche Fkt der Diffusionsgleichung: $n(\vec{r}, t) = \int d^d \vec{r}' dt' G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') n(\vec{r}', t')$

$$G(\vec{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{4Dt}\right)$$

Fourier-Transform:

$$\underline{G(\vec{q}, z) = \frac{1}{-iz + Dq^2}}$$

Diffusionspol

$$G(z) = \int_0^{\infty} dt e^{izt} G(t)$$

Antwort-Fkt für Diffusion:

„Antwort“ als Dichteänderung bei Änderung des chemischen Potentials.

$$H = H_0 - \int d^d r n(\vec{r}, t) \delta \mu(\vec{r}, t)$$

Thermodynamische Suszeptibilität:

$$\underline{\delta n(q) = \chi(q) \delta \mu(q)}$$

hängt von mikroskop. Details ab

Jetzt: $t < 0$, $\delta \mu(\vec{r})$ adiabatisch einschalten $\leadsto \delta n(q)$ bei $t=0$

$t > 0$, $\delta \mu$ aus, \leadsto Relaxation

$$\leadsto \delta n(q, z) = G(q, z) \delta n(q, t=0) = \frac{\chi(q) \delta \mu(q)}{-i\omega + Dq^2}$$

Adiabatisches Einschalten berücksichtigen:

$$\delta n(q, t) = \int_{-\infty}^0 dt' \chi(q, t-t') e^{i\omega t'} \delta \mu(q)$$

Rechnung (Chalkin/Lukatsky Kap 7.4) ergibt:

$$\delta n(q, z) = \frac{1}{iz} (\chi(q, z) - \chi(q)) \delta \mu(q)$$

$$\leadsto \underline{\chi(q, z) = \chi(q) \frac{Dq^2}{-iz + Dq^2}}$$

(Vgl. überdämpfter Oszillator)

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

Langevin-Dynamik

Mikroskopische Beschreibung der Relaxation:

Kollisionen \rightarrow fluktuierende Kraft + Reibung (nicht unabh.)

$$m \ddot{\vec{r}} + m \gamma \dot{\vec{r}} - \vec{F} = \vec{f}(t)$$

\uparrow Reibungskoeff. \uparrow Zufallskraft

Langevin 1908
(Verallg. von Newton!)typisch $\langle f_i \rangle = 0$

$$\langle f_i(t) f_j(t') \rangle = A \delta_{ij} \delta(t-t') \quad (\text{weisses Rauschen})$$

Kollisionen erzeugen stochastische ($\hat{=}$ diffusive) Bewegung eines individuellen Teilchens.Im Gleichgewicht sind A und γ durch Flukt.-Diss.-Theorem verknüpft.Ohne äußere Kraft: $\vec{F} = 0$

Langevin-Lsg:
$$\vec{v}(t) = \int_{-\infty}^t dt' e^{-\gamma(t-t')} \frac{\vec{f}(t')}{m} \quad (+ e^{-\gamma(t-t_0)} v_{-\infty})$$

bzw
$$\vec{v}(\omega) = \frac{1}{-i\omega + \gamma} \frac{\vec{f}(\omega)}{m}, \quad \langle \vec{v} \rangle = 0 \text{ wg } \langle \vec{f} \rangle = 0$$

Geschwindigkeit flukt.

$$\langle v_i^2(t) \rangle = \frac{1}{m^2} \int_{-\infty}^t dt' dt'' e^{-\gamma(t-t')} e^{-\gamma(t-t'')} \langle f_i(t') f_i(t'') \rangle$$

$$= \frac{1}{m^2} \int_{-\infty}^t dt' e^{-2\gamma(t-t')} A \delta(t'-t'')$$

$$\leadsto \langle v_i^2 \rangle = \frac{A}{2\gamma m^2}$$

Gleichgewicht \leadsto Gleichverteilungssatz $\frac{m}{2} \langle v_i^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T$

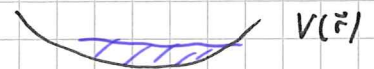
$$\leadsto \underline{A = 2m\gamma k_B T} \quad (\text{Einstein})$$

Verbindung zu makroskopischer Diffusion:

Inhom. System in Potential. Kraft \rightarrow Driftstrom $\vec{j}_{\text{ext}} = n \vec{f}_{\text{ext}} \frac{1}{\gamma m}$ Gleichgewicht: $\vec{j}_{\text{diff}} = -\vec{j}_{\text{ext}}$ für Stationarität $\leadsto D \vec{\nabla} n = n \vec{\nabla} V \frac{1}{\gamma m}$ Lösung $n \propto \exp(-V/D\gamma m)$, vgl. Boltzmann $n \propto \exp(-V/k_B T)$

$$\leadsto \underline{D = k_B T / \gamma m} \quad (A = 2m\gamma k_B T \leadsto A = 2 \frac{(k_B T)^2}{D})$$

(Einstein)



4.7. Formale Eigenschaften Greenscher Funktionen

Greensche Funktionen: $G_{AB}^r(t) = -i\theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}] \rangle = -\chi_{AB}(t)$

$G_{AB}^a(t) = i\theta(-t) \langle [\hat{A}(t), \hat{B}] \rangle$ + for Fermions

Korrelationsfunktionen: $C_{AB}^>(t) = \langle \hat{A}(t) \hat{B} \rangle$

$C_{AB}^<(t) = \langle \hat{B} \hat{A}(t) \rangle$

Fourier-Transform: $\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \chi(t)$, C, G analog

(auch für komplexe Frequenzen z , siehe unten)

Spektraldarstellung:

$$C_{AB}^>(t) = \text{Tr} \left(\rho e^{iHt/\hbar} \hat{A} e^{-iHt/\hbar} \hat{B} \right)$$

$$= \sum_{nm} p_n \langle n | e^{iHt/\hbar} \hat{A} | m \rangle \langle m | e^{-iHt/\hbar} \hat{B} | n \rangle$$

$$= \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} e^{i(E_n - E_m)t}$$

$$\leadsto C_{AB}^>(\omega) = \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} 2\pi \delta(\omega + \frac{E_n - E_m}{\hbar})$$

$$C_{AB}^<(\omega) = \sum_{nm} p_m B_{mn} A_{nm} 2\pi \delta(\omega + \frac{E_n - E_m}{\hbar})$$

$$\leadsto C_{AB}^<(\omega) = e^{-\beta\hbar\omega} C_{AB}^>(\omega) \quad (\text{aus } p_m = e^{-\beta(E_m - E_n)} p_n)$$

Definiere:

$$A_{AB}(\omega) = +2\pi \sum_{nm} p_n A_{nm} B_{mn} \delta(\omega + \frac{E_n - E_m}{\hbar}) (1 - e^{-\beta\hbar\omega})$$

$$= + (C_{AB}^>(\omega) - C_{AB}^<(\omega))$$

Spektraldichte

i.a. komplex!

Jetzt: G^T über $C^{\mathbb{Z}}$ ausdrücken:

$$G_{AB}^r(t) = -i \Theta(t) (C_{AB}^>(t) - C_{AB}^<(t))$$

$$G_{AB}^r(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} A_{AB}(\Omega) \frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dt \Theta(t) e^{i(\omega-\Omega)t}$$

Mit

$$\Theta(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ixt}}{x+i\eta} dx \quad (\text{Übung})$$

erhält man

$$\frac{1}{i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\Omega)t} \Theta(t) dt = \frac{1}{\omega - \Omega + i\eta}$$

\leadsto

$$G_{AB}^r(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{A_{AB}(\Omega)}{\omega + i\eta - \Omega}$$

A_{AB} enthält alle
Informationen über G !

Analog:

$$G_{AB}^a(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{A_{AB}(\Omega)}{\omega - i\eta - \Omega}$$

Dies erlaubt, eine (gemeinsame) Greensche Fkt mit komplexem Frequenzargument z einzuführen:

$$G_{AB}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \frac{A_{AB}(\Omega)}{z - \Omega} = \begin{cases} G^r(\omega) & \text{für } z = \omega + i\eta \\ G^a(\omega) & \text{für } z = \omega - i\eta \end{cases}$$

$G^r(\omega)$, $G^a(\omega)$ können analytisch fortgesetzt werden:

$G^r(z)$ analytisch in oberer Halbebene, (Pole bei $\text{Im } z = -\eta$)

$G^a(z)$ -//- unterer Halbebene (Pole bei $\text{Im } z = +\eta$)

Aus G kann die Spektraldichte rekonstruiert werden:

$$A_{AB}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} i(G(\omega + i\eta) - G(\omega - i\eta))$$

(Beweis mittels $\frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x)$.)

Es war:

$$A_{AB}(\omega) = 2\omega \sum_{nm} \rho_n A_{nm} B_{mn} \delta(\omega + E_n - E_m) (1 - e^{-\beta\omega})$$

Falls $\hat{A} = \hat{B}^\dagger$, dann ist $A_{AA^\dagger}(\omega)$ reell. (\leadsto Einheitschen - Greenfkt)

Damit:

$$A_{AA^\dagger}(\omega) = -2 \operatorname{Im} G_{AA^\dagger}^r(\omega).$$

Falls außerdem $\hat{A} = \hat{A}^\dagger (= \hat{B} = \hat{B}^\dagger)$, dann $A_{AA}(\omega) = -A_{AA}(-\omega)$. (reell)

Die Relation zwischen $C(\omega)$ und $A(\omega)$,

$$C_{AB}^>(\omega) = \frac{A_{AB}(\omega)}{1 - e^{-\beta\omega}},$$

heißt häufig Fluktuation - Dissipations - Theorem. Für $\hat{A} = \hat{B}^\dagger$:

$$C_{AA^\dagger}^>(\omega) = 2 \frac{\chi_{AA^\dagger}''(\omega)}{1 - e^{-\beta\omega}}$$

mit $\chi = \underbrace{\chi' + i\chi''}_{\text{real}}$, $\chi = -G_{AA^\dagger}^r$.

Real- und Imaginärteil von $G^r(\omega)$ (oder χ) sind über

Kramers - Kronig - Relationen verknüpft (folgen aus Analytizität).

$$\operatorname{Re} G^r(\omega) = -P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\operatorname{Im} G^r(\Omega)}{\omega - \Omega}$$

$$\operatorname{Im} G^r(\omega) = +P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{\pi} \frac{\operatorname{Re} G^r(\Omega)}{\omega - \Omega}$$

Für reelles $A_{AB}(\omega)$ folgt dies direkt aus der Spektraldarstellung,

zusammen mit $A = -2 \operatorname{Im} G^r$. Im allgemeinen Fall benötigt man:

$$G^r(z) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C dz' \frac{G^r(z')}{z - z'} \quad (\text{Cauchy})$$

C in upper half plane, where G^r is analytic, encloses z

Mit $z = \omega + i0$ und C  ergibt sich das Resultat.