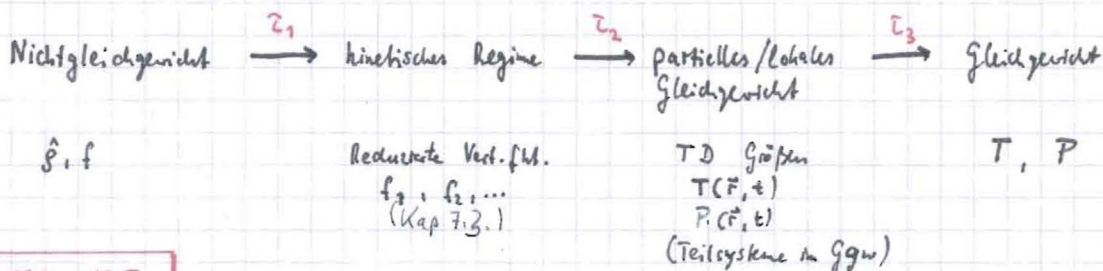


7. Nichtgleichgewicht und Transport

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
(klass. $f(q, p, t)$)

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

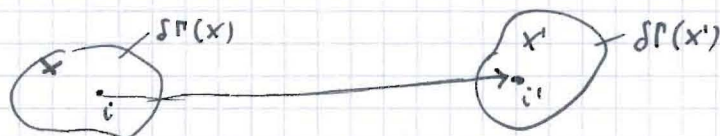
Makrozustand X (charakterisiert durch wenige Variable, z.B. $p(\rho)$, $T(\rho)$, ...)

mit Wahrscheinlichkeit $p(X) = \frac{\delta\Gamma(X)}{\delta\Gamma} = \frac{\text{Anzahl Mikrozustände für } X}{\text{Gesamtzahl Mikrozustände im Ensemble}}$

Mikrozustände folgen unitärer Zeitentwicklung (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 Geschw.)

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

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

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

$$S(X') - S(X) \gg k_B$$

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

Irreversibilität

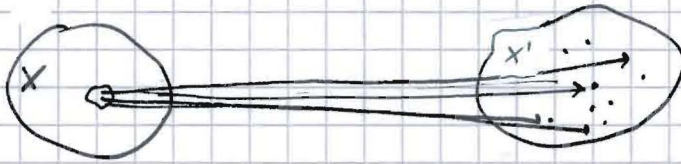
$$S(X') = S(X)$$

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

Gleichgewichtsprozess

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 Informationsverlust!

Volle Beschreibung liefert dagegen keine Irreversibilität, d.h.

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

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

S_{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 Liaville-Gleichung:

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

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.

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

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

Wir wollen jetzt eine Bewegungsgleichung für die Einteilchenverteilung ableiten.

- Zunächst ohne Wechselwirkung, $V=0$.

$$\dot{\vec{r}} = \vec{p}/m = +\partial H/\partial \vec{p}$$

$$\dot{\vec{p}} = -\partial V/\partial \vec{r} = -\partial H/\partial \vec{r} = \vec{F}$$

Kontinuitätsgleichung für f_1 :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{\nabla}_6 (\vec{V}_6 f_1) = \frac{\partial f_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{q}} (\vec{F}_m f_1) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}} (\vec{F} f_1) = 0$$

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

- Mit Wechselwirkung $\Rightarrow$ allg:

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

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.gf. aufschreiben, die aber $f_3()$ enthält usw.

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

Man kann nun nähern. Zunächst aufspalten:

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

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

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

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

Im Festkörper kann Ortsabhängigkeit oft vernachlässigt werden:

$$f_1(\vec{q}, \vec{p}, t) \rightarrow f_{\vec{k}} \quad , \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad , \quad \text{heute Zeitabh. für stationäre Verteilung}$$

Im Gleichgewicht erwarten wir zeitunabhängig

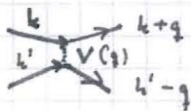
$$f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}^0 = \left(\exp((\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(T))/kT) + 1 \right)^{-1} \quad \text{Fermi-Verteilung}$$

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

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

Diskussion des Stoßterms

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

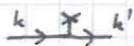


$$V(q) = \int d^3r e^{-iqr} V(r)$$

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

(ohne Beweis; anschaulich klar)

b) Störstellenstreuung. Energieerhaltung, keine Impulserhaltung



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

Relaxationszeitnäherung

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

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

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

$$(f_{\vec{k}}' = f_{\vec{k}}'(t=0) e^{-t/\tau_{\vec{k}}})$$

Elektrische Leitfähigkeit

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

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

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_{\vec{k}} = \left(\frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial t} \right)_{\text{imp}} = -\frac{1}{\tau_{\vec{k}}} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0)$$

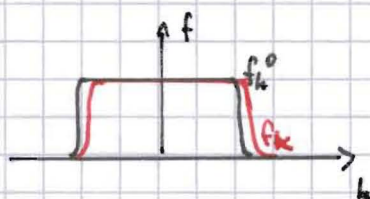
Mit $f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}^0 + f_{\vec{k}}'$ ergibt sich in linearer Ordnung in E ($f' \sim E$):

$$f_{\vec{k}}' = e \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}} \tau_{\vec{k}} \left(-\frac{\partial f_{\vec{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \right) \quad \left(\text{da } \frac{\partial f_{\vec{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} = \frac{\partial f_{\vec{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \frac{\partial \varepsilon_{\vec{k}}}{\partial \hbar \vec{k}} \right)$$

$$\vec{j} = e \sum_{\vec{k}\sigma} \vec{v}_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \quad (f_{\vec{k}} \rightarrow f_{\vec{k}}' \text{ wg. Symmetrie})$$

$$\xrightarrow{\tau_{\vec{k}} \text{ wech. von } \vec{k}} = -\tau e^2 \sum_{\vec{k}\sigma} \vec{v}_{\vec{k}} \otimes \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f_{\vec{k}}^0}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \quad \vec{E}$$

Leitfähigkeitskursor $\frac{\partial \vec{j}}{\partial \vec{E}}$



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

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

Ähnlich lassen sich auch andere Transportgrößen berechnen.

Z.B. Wärmeleitfähigkeit:

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

$$\text{Lokales Gleichgewicht } f_{\vec{k}}^0 = \left(\exp \left((\varepsilon_{\vec{k}} - \mu(\vec{r})) / kT(\vec{r}) \right) + 1 \right)^{-1}$$

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) χ_{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 $\chi_{AB}(t-t')$ ansprechen. 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 Bad für $t < t_0$: $\hat{\rho}(t < t_0) = \hat{\rho}_0$ (ungestörter Dichteop.)

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:

$$\begin{aligned} \hat{A}_H(t) &= \hat{S}^\dagger(t, t_0) e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{S}(t, t_0) = \hat{S}^\dagger(t, t_0) \hat{A}_{H_0}(t) \hat{S}(t, t_0) \\ &= \hat{A}_{H_0}(t) + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' L(t') [\hat{A}_{H_0}(t), \hat{B}_{H_0}(t')] + \mathcal{O}(L^2) \end{aligned}$$

(t_0) → -∞

Damit können wir ablesen:

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

(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 (Nicht-gleichgewicht!) 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

~

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

• Magnetische Suszeptibilität χ_{mag}

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

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

($m = \gamma S$)
(Gesamtmagnetisierung)

• Elektrische Leitfähigkeit σ

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

$$\leadsto \sigma_{ij}(t) = \frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [\hat{j}_i(t), \hat{\pi}_j(0)] \rangle$$

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

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

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

Def $\chi(\omega + i\eta) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega)$ ($\eta \rightarrow 0^+$; χ', χ'' reell)

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

Es ergibt sich:

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

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

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

Es zeigt sich, daß χ'' 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 χ'' mittels Kubo-Formel durch Gleichrichterschwankungen $\langle [B, B] \rangle$ ausgedrückt werden kann, spricht man vom Fluktuations-Dissipations-Theorem.

Im Limit $\omega \rightarrow 0$ 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 χ_{AB} muß der Korrelator
 $\langle [A, B] \rangle$ mittels geeigneter Näherungen berechnet werden.

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

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

Die dargestellte Lineare Response-Theorie ist die allgemeine
 quantenstatistische Theorie zur Beschreibung linear zusammenhängender
 zwischen Ursachen (Kräften, Feldern) und Wirkungen (Strömen, Magnetisierungen).
 Sie läßt sich für nichtlineare Prozesse erweitern (höhere Ordnungen
 in $b\hat{O}$).