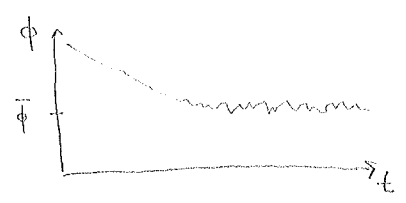


### 4.3 Lineare Antwort-Theorie

Ausgangspunkt:



Auch wenn die Boltzmann-Gleichung eine „systematische“ Methode darstellt, ist sie trotzdem eine Näherung und nur unter bestimmten Umständen gültig (u.a. schwache Wechselwirkungen). So ist z.B. vom Anfang an alles „dekohärent“, weil keine komplexen Phasen auftauchen (außer innerhalb von  $10^{-21}$ ). Das physikalische Bild auf Seite 41 ist aber auch für stark wechselwirkende Systeme gültig, und kann als eine „lineare Antwort-Theorie“ implementiert werden.

Antwort-Funktion:

\* Zur Erinnerung:

$$\begin{aligned} i\hbar \partial_t |\psi\rangle &= \hat{H} |\psi\rangle, \\ -i\hbar \partial_t \langle \psi| &= \langle \psi| \hat{H} \\ \Rightarrow i\hbar \partial_t |\psi\rangle \langle \psi| &= [\hat{H}, |\psi\rangle \langle \psi|] \end{aligned}$$

Die Quantenmechanik eines statistischen Systems wird durch eine „Dichtematrix“  $\hat{\rho}$  beschrieben. Ihre Zeitentwicklung wird durch die von Neumann-Gleichung gegeben\*:

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$$

Wir nehmen an, dass das System bei  $t = -\infty$  im Gleichgewicht ist,

$$\hat{\rho}(-\infty) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}$$

dass aber nachher eine kleine Störung eingeführt wird:

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}(t) := \hat{H} - \mu(t) \hat{O}(t), \quad [\hat{H}, \hat{O}(t)] \neq 0$$

Wie ändern sich die Dichtematrix und der Erwartungswert von  $\hat{O}$ ?

Die formale iterative Lösung der von Neumann-Gleichung lautet

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(-\infty) + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}(t'), \hat{\rho}(t')] + \dots$$

Weil  $[\hat{H}, \hat{\rho}(-\infty)] = 0$  gilt, können wir  $\hat{H}(t') \rightarrow -\mu(t') \hat{O}(t')$  ersetzen. Uns interessiert folglich der Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}(t) \rangle &:= \text{Tr} [\hat{\rho}(t) \hat{O}(t)] \\ &= \text{Tr} [\hat{\rho}(-\infty) \hat{O}(t)] - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \mu(t') \text{Tr} \{ [\hat{O}(t'), \hat{\rho}(-\infty)] \hat{O}(t) \} + \dots \\ &= \text{Tr} [\hat{\rho}(-\infty) e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} \hat{O}(0) e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}] \underbrace{\int_{-\infty}^t dt' \mu(t') \text{Tr} \{ \hat{\rho}(-\infty) [\hat{O}(t), \hat{O}(t')] \}}_{= \int_{-\infty}^t dt' \langle \theta(t-t') [\hat{O}(t), \hat{O}(t')] \rangle_0 \mu(t')} + \dots \\ &\stackrel{[\hat{\rho}(-\infty), \hat{H}] = 0}{=} \text{Tr} [\hat{\rho}(-\infty) \hat{O}(0)] \\ &= \langle \hat{O}(0) \rangle_0 \end{aligned}$$

$[\hat{\rho}(-\infty), \hat{H}] = 0$

im Gleichgewicht

Dieses Ergebnis gibt Anlass zur Definition einer „retardierten“ bzw. Antwort-Funktion

$$C_R(t-t') := \left\langle \frac{i}{\hbar} \theta(t-t') [\hat{O}(t), \hat{O}(t')] \right\rangle_0$$

Wir sehen, dass die Antwort des Systems auf eine kleine Störung ( $\mu \ll 1$ ) durch Gleichgewichtskorrelatoren gegeben wird:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \hat{O}(0) \rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty} dt' C_R(t-t') \mu(t') + \mathcal{O}(\mu^2)$$

Andere Korrelatoren: Neben  $C_R$  können auch andere zeitgeordnete Korrelatoren, sowie deren Fourier-Transformationen, definiert werden:

$$\tilde{C}_R(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} C_R(t-t')$$

$$\mathcal{X}^>(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \langle \hat{O}(t) \hat{O}(t') \rangle_0 \quad \left. \vphantom{\int_{-\infty}^{\infty}} \right\} \text{ "Wightman-Funktionen"}$$

$$\mathcal{X}^<(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \langle \hat{O}(t') \hat{O}(t) \rangle_0$$

$$S(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \left\langle \frac{1}{2\hbar} [\hat{O}(t), \hat{O}(t')] \right\rangle_0 \quad \left. \vphantom{\int_{-\infty}^{\infty}} \right\} \text{ "Spektralfunktion"}$$

$$\tilde{\Delta}(\omega) := \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \left\langle \frac{1}{2} \{ \hat{O}(t), \hat{O}(t') \} \right\rangle_0 \quad \left. \vphantom{\int_{-\infty}^{\infty}} \right\} \text{ "statistischer Korrelator"}$$

Diese sind nicht unabhängig, sondern miteinander verwandt:

$$\begin{aligned} \mathcal{X}^>(\omega) &= \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H} + \frac{i\hbar t}{\hbar}} \hat{O}(0) e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} e^{\frac{i\hbar t'}{\hbar}} \hat{O}(0) e^{-\frac{i\hbar t'}{\hbar}} \right] \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} e^{(-\beta + \frac{it-t'}{\hbar}) E_m} e^{\left(\frac{it'}{\hbar} - \frac{it}{\hbar}\right) E_n} \langle m | \hat{O}(0) | n \rangle \langle n | \hat{O}(0) | m \rangle \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} 2\pi \delta\left(\omega + \frac{E_m}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}\right) \langle m | \hat{O}(0) | n \rangle \langle n | \hat{O}(0) | m \rangle$$

$$\mathcal{X}^<(\omega) = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \text{Tr} \left[ e^{-\beta \hat{H} + \frac{i\hbar t'}{\hbar}} \hat{O}(0) e^{-\frac{i\hbar t'}{\hbar}} e^{\frac{i\hbar t}{\hbar}} \hat{O}(0) e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \right]$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} e^{(-\beta + \frac{it-t'}{\hbar}) E_n} e^{\left(\frac{it}{\hbar} - \frac{it'}{\hbar}\right) E_m} \langle n | \hat{O}(0) | m \rangle \langle m | \hat{O}(0) | n \rangle$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{m,n} e^{-\beta E_n} 2\pi \delta\left(\omega + \frac{E_m}{\hbar} - \frac{E_n}{\hbar}\right) \langle n | \hat{O}(0) | m \rangle \langle m | \hat{O}(0) | n \rangle$$

$$\stackrel{!}{=} e^{-\beta \hbar \omega} \mathcal{X}^>(\omega)$$

$$\Rightarrow S(\omega) = \frac{\mathcal{X}^>(\omega) - \mathcal{X}^<(\omega)}{2\hbar} = \frac{e^{\beta \hbar \omega} - 1}{2\hbar} \mathcal{X}^<(\omega)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \mathcal{X}^<(\omega) = 2\hbar n_B(\hbar\omega) S(\omega), \\ \mathcal{X}^>(\omega) = 2\hbar \frac{e^{\beta \hbar \omega} - 1 + 1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} S(\omega) = 2\hbar [1 + n_B(\hbar\omega)] S(\omega) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \tilde{\Delta}(\omega) = \frac{\mathcal{X}^>(\omega) + \mathcal{X}^<(\omega)}{2} = \hbar [1 + 2n_B(\hbar\omega)] S(\omega)$$

Uns fehlt noch die Beziehung von  $\tilde{C}_R(\omega)$  zu  $S(\omega)$ , was dann das Fluktuations-Dissipations-Theorem ergibt (Seite 51).

Fluktuations-Dissipations-Theorem

Betrachten wir letztendlich  $\tilde{C}_R(\omega)$ . Diese hat wichtige Eigenschaften, u.a.

\*  $C_R(t-t')$  enthält  $\Theta(t-t') \Rightarrow$  in der Fourier-Transformation wird nur über positive Zeiten integriert  $\Rightarrow$  wenn wir in  $e^{i\omega(t-t')}$   $\omega$  komplex machen, mit einem positiven Imaginärteil, ist das Integral exponentiell konvergent.  $\Rightarrow \tilde{C}_R(\omega)$  ist analytisch in der oberen Hälfte ( $\text{Im } \omega > 0$ ).

\* Trick mit zweifacher Transformation:

$$\tilde{C}_R(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} \Theta(t-t') \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} e^{-i\omega'(t-t')} 2\hbar g(\omega')$$

$\text{MMP III: } i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \frac{e^{-i\tilde{\omega}(t-t')}}{\tilde{\omega} + i0^+}$

$\langle [\hat{O}(t), \hat{O}(t')] \rangle_0$  als Rücktransformation

$$= -2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{e^{i(\omega - \tilde{\omega} - \omega')(t-t')}}{\tilde{\omega} + i0^+} g(\omega')$$

$$= -2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\tilde{\omega}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{2\pi \delta(\omega - \tilde{\omega} - \omega')}{\tilde{\omega} + i0^+} g(\omega')$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \cdot \frac{g(\omega')}{\omega' - \omega - i0^+} \quad (*)$$

Dies heißt eine Spektraldarstellung von  $\tilde{C}_R(\omega)$ .

\* Auch aus MMP III bekannt:

$$\frac{1}{\Delta \pm i0^+} = \mathbb{P} \left( \frac{1}{\Delta} \right) \mp i\pi \delta(\Delta)$$

$\uparrow$   
Prinzipalwert

Die Funktion  $\tilde{C}_R(\omega)$  ist komplex, während  $g(\omega)$  reell ist. Der Imaginärteil von Gl. (\*) ergibt

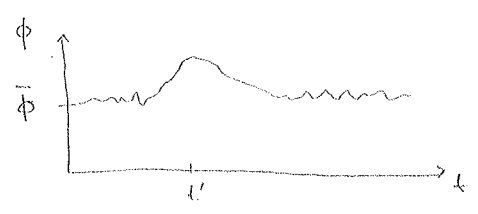
$$\text{Im } \tilde{C}_R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} g(\omega') \text{Im} \left\{ \mathbb{P} \left( \frac{1}{\omega' - \omega} \right) + i\pi \delta(\omega' - \omega) \right\}$$

$$= g(\omega). \quad (**)$$

Fazit: der statistische Korrelator  $\tilde{\Delta}(\omega)$  stellt thermische Fluktuationen dar; als Antikommutator hat  $\tilde{\Delta}(\omega)$  auch einen klassischen Limes. Aus  $\tilde{\Delta}(\omega)$  kann die Spektralfunktion  $g(\omega)$  konstruiert werden (Seite 50). Aus  $g(\omega)$  können  $\text{Re} \tilde{C}_R(\omega)$  (Gl. (\*)) und  $\text{Im} \tilde{C}_R(\omega)$  (Gl. (\*\*)) extrahiert werden. Laut Seite 49 bestimmt  $C_R$  die Antwort des Systems auf eine Störung, inklusive Dissipation bzw. Thermalisierung.

Kubo-Formel:

Um das Fluktuations-Dissipations-Theorem konkret zu machen, können wir es zur Bestimmung von Transportkoeffizienten benutzen (vgl. Seite 13), falls die Boltzmann-Gleichung nicht gültig ist.



Die Idee: die Näherung des Gleichgewichtszustands laut Seite 41 gilt auch für seltene „grosse“ thermische Fluktuationen.

Sei  $\hat{O}$  jetzt der Operator für die Messung von  $\phi - \bar{\phi}$ , d.h. der Mittelwert wird subtrahiert.

Im klassischen Limes gilt dann

$$\Delta_{cl}(t-t') := \langle O(t)O(t') \rangle_{cl} = \left\langle \frac{1}{2} [O(t)O(t') + O(t')O(t)] \right\rangle_{cl}$$

$$= \Delta_{cl}(0) e^{-\Gamma(t-t')}, \quad t > t'$$

Weil  $\langle O(t')O(t) \rangle_{cl} = \langle O(t)O(t') \rangle_{cl}$ , sollten wir die Zeitdifferenz als  $|t-t'|$  ausdrücken. Die Fourier-Transformierte lautet

$$\tilde{\Delta}_{cl}(\omega) = \Delta_{cl}(0) \left\{ \int_{-\infty}^{t'} dt e^{i\omega(t-t')} e^{+\Gamma(t-t')} + \int_{t'}^{\infty} dt e^{i\omega(t-t')} e^{-\Gamma(t-t')} \right\}$$

$$= \Delta_{cl}(0) \left\{ \frac{1}{i\omega + \Gamma} - \frac{1}{i\omega - \Gamma} \right\}$$

$$= \Delta_{cl}(0) \left\{ \frac{-2\Gamma}{-\omega^2 - \Gamma^2} \right\} = \frac{2\Delta_{cl}(0)\Gamma}{\omega^2 + \Gamma^2} \quad (*)$$

Der Wert  $\Delta_{cl}(0)$  wird durch die quantenmechanische Suszeptibilität  $\Delta(0) = \langle \hat{O}^2 \rangle$  ersetzt; dies erzählt, wie gross die thermischen Fluktuationen sein können. Der klassische Korrelator  $\tilde{\Delta}_{cl}(\omega)$  wird durch den statistischen Korrelator  $\tilde{\Delta}(\omega)$  ersetzt; es kann argumentiert werden, dass der Ersatz bei kleinen Frequenzen gerechtfertigt ist. So folgt die berühmte Kubo-Formel:

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \tilde{\Delta}_{cl}(\omega) \stackrel{\text{Gl. (*)}}{=} \frac{2\langle \hat{O}^2 \rangle}{\Gamma} \stackrel{\text{Ersatz}}{=} \lim_{\omega \rightarrow 0} \tilde{\Delta}(\omega) \stackrel{\text{Seite 50}}{=} \lim_{\omega \rightarrow 0} \hbar \left[ 1 + \frac{2}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right] S(\omega)$$

