Lineare Antwort (linear Response), Kubo-Formel

Gleichgewicht $\quad W = \rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$

Nichtgleichgewicht $\quad$? viele Möglichkeiten

Schwache Anregung $\quad \rho(t) = \rho_0 + \delta\rho$

$\delta\rho$ klein, linear zur Anregung (Kraft, Amplitude ..)

Erinnerung QM.

Schrödinger - Bild

$$i\hbar \dot{\psi}_S(t) = H(t)\psi_S(t) \quad \Rightarrow \quad \psi_S(t) = U(t,t_0)\psi_S(t_0)$$

$$U(t,t_0) = T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,dt'\right)$$

für $H(t) = H \quad \Rightarrow \quad U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right)$

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

Heisenberg - Bild

$$O_H(t) = U^+(t,t_0)\,O_S(t)\,U(t,t_0)$$

$$\psi_H = U^+(t,t_0)\,\psi_S(t)$$

$$\langle\psi_H|O_H|\psi_H\rangle = \langle\psi_S|O_S|\psi_S\rangle = \langle\psi_I|O_I|\psi_I\rangle$$

$$i\hbar\,\dot{O}_H = [O_H, H(t)] + i\hbar\,U^+\left(\frac{\partial}{\partial t}O_S\right)U$$

Wechselwirkung - Bild

$\hat{=}$ Heisenberg - Bild mit H_0

$$H = H_0 + V$$

$$O_I(t) = \exp\left(i H_0 \frac{t}{\hbar}\right) O_S \exp\left(-i \frac{H_0 t}{\hbar}\right)$$

$$\psi_I(t) = \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) \psi_S(t)$$

$$i\hbar \dot{\psi}_I = i\hbar H_0 \frac{i}{\hbar} \psi_I + i\hbar \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) \dot{\psi}_S$$

$$= -H_0 \psi_I + \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) (H_0 + V) \psi_S$$

$$= -H_0 \psi_I + \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) (H_0 + V) \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) \psi_I$$

$$= \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) V \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) \psi_I$$

$$= V_I \psi_I$$

daraus erhält man leicht die Zeitentwicklung von

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\rho_I = \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right) \rho_S \exp\left(i \frac{H_0 t}{\hbar}\right)$$

$$\Rightarrow \boxed{i\hbar \dot{\rho}_I = [V_I, \rho_I]}$$

Integrieren von $\dot{\rho}_I$ (formal)

$$\rho_I(t) = \rho_I(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' [V_I(t'), \rho_I(t')]$$

Iteration $\rho_I(t_0) = \rho_0$

$$\rho_I(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' [V_I(t'), \rho_0]$$

$$\delta\rho = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt' [V_I(t'), \rho_0]$$

$$V_S = -\int d^3r \; \underbrace{F(\vec r, t)}_{\text{Zahl, z.B. Kraft}} \; \underbrace{\hat A_S(\vec r)}_{\text{Operator}}$$

z.B.

$A = \psi^+(\vec r)\,\psi(\vec r)$ Dichte

$F = -|e|\varphi(r,t)$ Potential · Ladung

Bsp 2

$A = \hat\rho(\vec r)$ Spin-Operator Magnetisierung

$F = \vec B(\vec r, t)$ Magnetisierung

$$\underbrace{\langle \hat B_S \rangle}_{\text{bel. Operator}} = Tr(\rho_S B_S) \underbrace{=}_{\text{wähle WW-Bild}} Tr(\rho_I\, B_I)$$

$\overset{H}{\underset{I}{}}$ $\overset{H}{\underset{I}{}}$

$$= \underbrace{Tr(\rho_0 B_I)}_{B_0} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\; Tr\{[V_I(t'), \rho_0]\, B_I(t)\}$$

$$Tr(V\rho B - \rho V B) = Tr(B V\rho - \rho V B)$$

$$= tr(\rho B V - \rho V B) = Tr(\rho[B, V])$$

$$\langle \delta B(\vec r, t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt'\; Tr\{\rho_0 [B_I(t, \vec r), V_I(t')]\}$$

$$= \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' \int d^3r'\; Tr\{\rho_0 [B_I(\vec r, t), \hat A_I(\vec r\,', t')]\}\, F(\vec r\,', t')$$

$$\langle \delta B(\vec r, t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int d^3r'\; \chi_{BA}(\vec r, t, \vec r\,', t')\, F(\vec r\,', t')$$

χ_{BA} linear Antwort Funktion

response function

(Antwort = Faltung von Störung mit response function)

$$\boxed{\chi(\vec{r},t,\vec{r}\,',t') = \frac{i}{\hbar} Tr\left\{ \rho_0 [B_I(\vec{r},t), A_I(\vec{r}\,',t')] \right\} \Theta(t-t')}$$

Kubo Formel

$t_0 \longrightarrow -\infty$ bei stationärer Antwort auf Störung

χ nur von Gleichgewichtsgrößen abhängig

wegen Homogenität in $\vec{r}$ und t.

$$\chi_{BA} = \chi_{BA}(\vec{r}-\vec{r}\,', t-t')$$

Mit Fourier-Trafo

$$\boxed{\langle \delta B(\vec{k},\omega) \rangle = \chi_{BA}(\vec{k},\omega) F(\vec{k},\omega)}$$

Fluktuation Dissipationsrelation

Wdh. E-Dynamik

$\varepsilon(\vec{k},\omega)$

$\vec{D}(\vec{k},\omega) = \varepsilon \, \vec{E}(\vec{k},\omega)$ (ε skalar angenommen, kein Tensor)

$A = B = \psi^+(r)\psi(r) = \rho_{el}$

$F = e\varphi(\vec{r},t)$

$\delta \rho_{el} = \chi_{\rho\rho} \; e\,\varphi(k,\omega)$

$D = E + 4\pi P \qquad -\vec{\nabla}\vec{P} = \rho_{el}$

im Frq. Raum $\vec{\nabla} = i\vec{k}$

$-i\vec{k}\vec{P} = \rho_{el} \iff P = \frac{i\rho_{el}}{k}$

$E = -\nabla\varphi \quad \overset{FT}{\Longrightarrow} \quad E = -ik\varphi$

$$P = \frac{i}{k}\delta\rho = \frac{e i}{k}\chi_{\rho\rho}\frac{iE}{k}$$

$$P = \boxed{-\frac{e}{k^2}\chi_{\rho\rho}}\; E$$

χ aus E-Dynamik Suszeptibilität

$$\boxed{\chi = -\frac{e}{k^2}\chi_{\rho\rho}}$$

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\chi$$

Mathematik

$$\frac{1}{x \mp i\delta} = P\frac{1}{x} \pm \pi\delta(x)$$

$\omega \in \mathbb{R}$, $\delta > 0$ klein

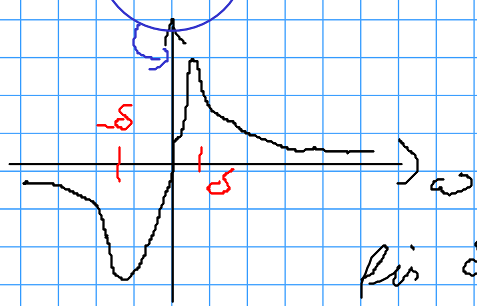
$$\int_0^\infty dt\, e^{i\omega t}\, e^{-\delta t} = \frac{1}{\delta - i\omega} = i\frac{1}{\omega + i\delta}$$

$$\frac{1}{\omega + i\delta} = \frac{\omega - i\delta}{(\omega + i\delta)(\omega - i\delta)} = \frac{\omega - i\delta}{\omega^2 + \delta^2} = \frac{\omega}{\omega^2+\delta^2} - i\frac{\delta}{\omega^2+\delta^2}$$

$$\int d\omega \frac{1}{\omega + i\delta} f(\omega)$$

Testfunktion $\in C^\infty$

$$= \int d\omega \frac{\omega}{\omega^2+\delta^2} f(\omega) - i\int d\omega \overbrace{\frac{\delta}{\omega^2+\delta^2}}^{\pi\delta(\omega)} f(\omega)$$



für $\delta \to 0$ Hauptwert, principal value

$$\lim_{\delta\to 0}\int d\omega \frac{\omega}{\omega^2+\delta^2} f(\omega) = PV\int d\omega \frac{1}{\omega} f(\omega)$$