Funzione di risposta nella teoria della risposta lineare

Premesse varie

Si consideri un sistema il cui moto naturale è governato da un hamiltoniano H_0 e si assuma che una forza esterna $K(t)$ venga applicata al tempo t_0, prima del quale il sistema era in equilibrio alla temperatura T. La teoria della risposta lineare permette di descrivere le proprietà dipendenti dal tempo del sistema, nel caso in cui questo interagisca ***debolmente*** con la perturbazione esterna.

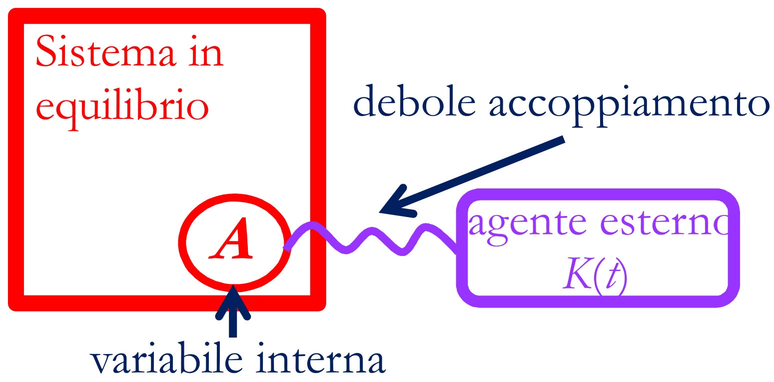
Se l'agente esterno interagisce con il sistema attraverso una variabile "interna" A (cioè agisce su una certa variabile A del sistema), allora l'hamiltoniano totale del sistema al tempo generico t è la somma dell'hamiltoniano imperturbato e della (debole) perturbazione H_{ext}:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{ext}} = \hat{H}_0 - \hat{A}\,K(t)$$

dove A è l'operatore che rappresenta la variabile dinamica coniugata alla forza applicata $K(t)$ dipendente dal tempo. Si noti che l'hamiltoniano dipende dal tempo, ma solo attraverso la funzione $K(t)$: questo comporta l'invarianza per traslazioni temporali delle medie di insieme di variabili dinamiche, e.g.:

$$\langle \hat{B}(t) \rangle = \langle \hat{B}(0) \rangle = \langle \hat{B} \rangle$$

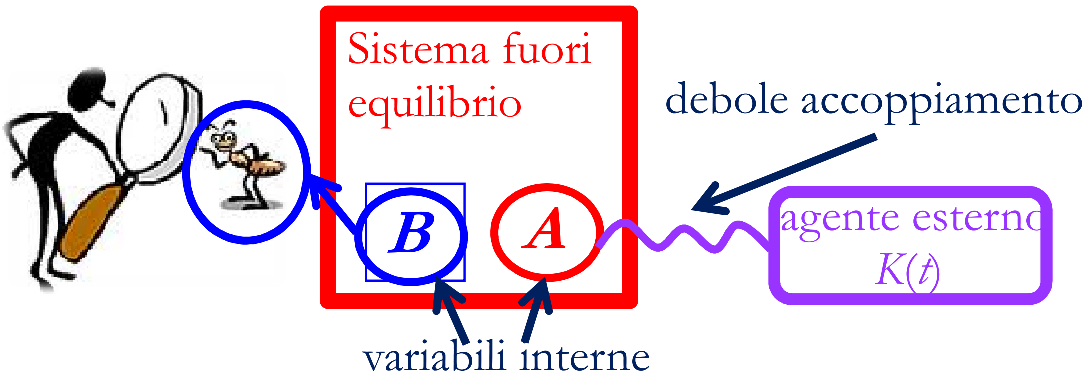
Per rendere possibili le medie di insieme è tuttavia necessaria l'ipotesi che l'interazione con l'agente esterno sia la stessa per tutti i possibili microstati del sistema.

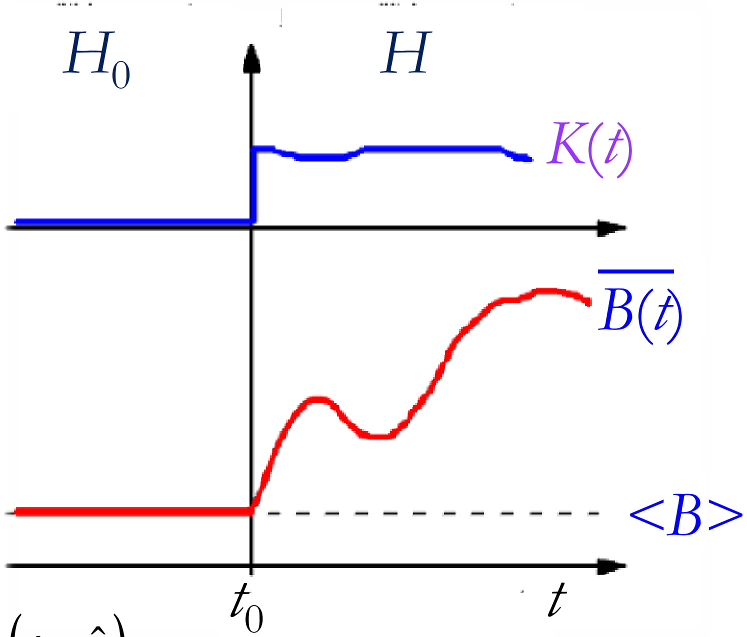


Funzione di risposta nella teoria della risposta lineare

Premesse varie e richiami di meccanica statistica

Nel caso più generale, la ***risposta*** del sistema alla debole perturbazione esterna $H_{ext} = - A\, K(t)$ può essere analizzata considerando il cambiamento subìto da un'altra variabile interna B.





Il valor medio di B in presenza della perturbazione è diverso da quello di equilibrio: $\overline{\hat{B}(t)} \neq \langle \hat{B} \rangle$

La media di insieme della variabile B all'equilibrio è $\langle \hat{B} \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_{eq} \hat{B}\right)$

con $\hat{\rho}_{eq} = \dfrac{e^{-\beta \hat{H}_0}}{Z} = \dfrac{e^{-\beta \hat{H}_0}}{\mathrm{Tr}\; e^{-\beta \hat{H}_0}}$ matrice densità (nell'insieme canonico) all'equilibrio.

Nota: nella meccanica statistica classica Tr equivale all'integrazione nello spazio delle fasi:

$$\mathrm{Tr} \ldots = \iint \ldots d\boldsymbol{r}^N d\boldsymbol{p}^N \quad \text{con} \quad \boldsymbol{r}^N \equiv (\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N); \quad \boldsymbol{p}^N \equiv (\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$$

Funzione di risposta nella teoria della risposta lineare

Se la perturbazione è debole, è possibile esprimere $\overline{B(t)}$ attraverso uno sviluppo in serie di potenze di $K(t)$:

$$\overline{B}(t) = \langle B \rangle + \int_{-\infty}^{t} dt' \, R_{BA}(t,t') K(t') + \ldots$$

dove si è assunto che la forza esterna sia stata applicata nel lontano "passato" (cioè $t_0 \rightarrow -\infty$), mentre il sistema viene osservato al tempo t.

Il termine di ordine zero (sistema imperturbato) non dipende da K ed è dunque proprio $\langle B \rangle$. Il termine successivo descrive la deviazione dal valore di equilibrio in termini di una dipendenza lineare da K ma che tiene conto dell'intera "storia" della perturbazione, per cui è scritta come sovrapposizione (sotto forma di integrale) di effetti (indipendenti) a tutti i tempi precedenti rispetto a quello di osservazione.

$R_{BA}(t,t')$ è la ***funzione di risposta*** del sistema, ovvero la risposta al tempo t ad un disturbo in t'.

NB: Al momento questo non dice niente sull'espressione esplicita della funzione di risposta (che vedremo in seguito), ma ne illustra il concetto fisico… Be patient!!

Funzione di risposta
Proprietà

1. Causalità

La risposta ad una perturbazione non può essere osservata prima che quest'ultima sia applicata $\Rightarrow$

$$R_{BA}(t,t') = 0 \quad \text{per } t < t'$$

2. Stazionarietà

L'invarianza delle medie per traslazioni temporali comporta che la funzione di risposta dipende da t e t' solo attraverso la loro differenza $t - t'$:

$$\delta\overline{B}(t) = \overline{B}(t) - \langle B \rangle = \int_{-\infty}^{t} dt'\, R_{BA}(t-t')\, K(t')$$

pertanto, il cambiamento osservato è la ***CONVOLUZIONE*** della funzione di risposta con l'evoluzione temporale della forza applicata.

$R_{BA}(\tau) = 0$ per $\tau < 0$

Se si effettua il cambiamento di variabile $\tau = t - t'$, si ha anche (e tenendo conto della causalità) :

$$\delta\overline{B}(t) = \overline{B}(t) - \langle B \rangle = \int_{0}^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, K(t-\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau)\, K(t-\tau)\,\theta(\tau)$$

che è una scrittura conveniente per descrivere la risposta del sistema nel dominio delle frequenze (trasformate di Fourier).

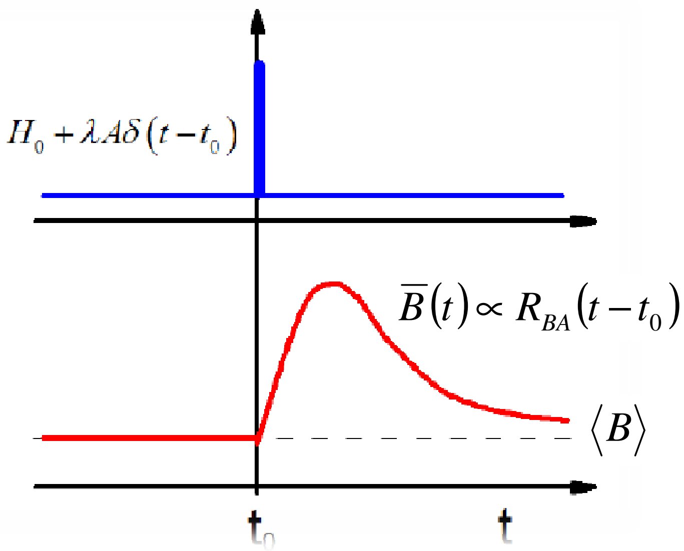
Funzione di risposta
Proprietà

3. Risposta ad un impulso

Per una perturbazione impulsiva a forma di delta di Dirac, $K(t) = \lambda\, \delta(t)$, si ha

$$\delta\overline{B}(t) = \overline{B}(t) - \langle B \rangle = \int_{-\infty}^{t} dt'\, R_{BA}(t-t')\,\lambda\,\delta(t') = \lambda\, R_{BA}(t)$$

quindi $R_{BA}(t)$ descrive il comportamento del sistema al tempo t (misurato dalla variazione della media della variabile B) quando questo è stato sottoposto ad una brusca perturbazione istantanea al tempo $t = 0$.



Rappresentazione nel dominio della frequenza

La suscettività

Il comportamento temporale del sistema fuori equilibrio può anche essere descritto nel dominio della frequenza attraverso la funzione di risposta spettrale o ***suscettività***. Avevamo

$$\delta\overline{B}(t) = \overline{B}(t) - \langle B \rangle = \int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, K(t-\tau)$$

con $\tau = t - t'$. Facendo la trasformata di Fourier di entrambi i membri e sfruttando l'identità $e^{i\omega\tau}\, e^{-i\omega\tau} = 1$, si ottiene

$$\widetilde{\delta\overline{B}}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, K(t-\tau)\right] e^{-i\omega t} =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, K(t-\tau)\right] e^{-i\omega(t-\tau)} e^{-i\omega\tau} = \underbrace{\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\, K(t')\, e^{-i\omega t'}}}_{\tilde{K}(\omega)}\ \underbrace{\boxed{\int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, e^{-i\omega\tau}}}_{\chi_{BA}[\omega]}$$

Trasformata di Fourier della forzante $K(t)$ $\leftarrow$ $\tilde{K}(\omega)$

$\chi_{BA}[\omega]$

suscettività

(trasformata di Fourier-Laplace della R)

Nota: la trasformata di Fourier-Laplace, simboleggiata da [ ], non è altro che una trasformata di Fourier "unilaterale" (one-sided FT)

La suscettività (o ammettenza)

Relazioni e proprietà

1. $\delta\tilde{\overline{B}}(\omega) = \tilde{K}(\omega)\,\chi[\omega]$ (trasformata di Fourier di una convoluzione in tempo)

2. La suscettività è in generale complessa:

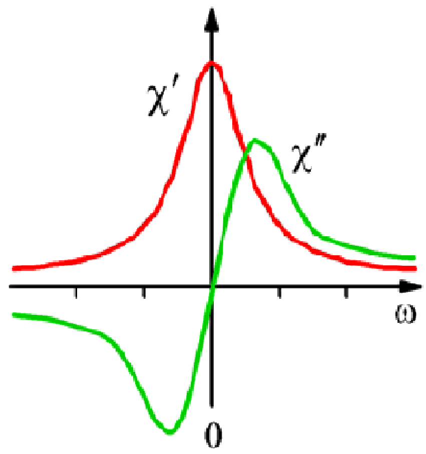
$$\chi_{BA}[\omega] = \int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, e^{-i\,\omega\tau} = \int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\cos\omega\tau - i\int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\sin\omega\tau =$$

$= \chi'_{BA}[\omega] - i\,\chi''_{BA}[\omega]$ con χ' e χ'' ***non*** indipendenti fra loro (v. rel. Kramers-Krönig)

3. Poiché la risposta nel dominio dei tempi deve essere reale, sfruttando la antitrasformata della $\chi(\omega)$ è possibile mostrare che:

$\chi'_{BA}[\omega] = \chi'_{BA}[-\omega]$ funzione ***pari*** in ω

$\chi''_{BA}[\omega] = -\chi''_{BA}[-\omega]$ funzione ***dispari*** in ω



da cui anche:

$\chi^*_{BA}[\omega] = \chi_{BA}[-\omega]$

$\chi'_{BA} = \frac{1}{2}\left(\chi_{BA}[\omega] + \chi_{BA}[-\omega]\right)$ e $\chi''_{BA} = \frac{1}{2i}\left(\chi_{BA}[-\omega] - \chi_{BA}[\omega]\right)$

3. Poiché la risposta nel dominio dei tempi deve essere reale, sfruttando la antitrasformata della $\chi(\omega)$ è possibile mostrare che:

$$\chi'_{BA}[\omega] = \chi'_{BA}[-\omega] \qquad \text{funzione } \textit{pari} \text{ in } \omega$$

$$\chi''_{BA}[\omega] = -\chi''_{BA}[-\omega] \qquad \text{funzione } \textit{dispari} \text{ in } \omega$$

Dimostrazione:

$$R_{BA}(t) \propto \int_0^{+\infty} d\omega\, \chi_{BA}[\omega]\, e^{i\,\omega t} = \int_0^{+\infty} d\omega \{\chi'_{BA}[\omega] - i\,\chi''_{BA}[\omega]\} [\cos\omega t + i\sin\omega t] =$$

$$= \int_0^{+\infty} d\omega [(\chi'_{BA}[\omega]\cos\omega t + \chi''_{BA}[\omega]\sin\omega t) + i(\chi'_{BA}[\omega]\sin\omega t - \chi''_{BA}[\omega]\cos\omega t)]$$

Ma $R_{BA}(t)$ deve essere **reale,** dunque :

$$(\chi'_{BA}[\omega]\sin\omega t - \chi''_{BA}[\omega]\cos\omega t) = 0$$

$$\chi'_{BA}[\omega] \; \textit{deve avere parità opposta a} \sin\omega t \qquad \Rightarrow \textit{PARI} \text{ in } \omega$$

$$\chi''_{BA}[\omega] \; \textit{deve avere parità opposta a} \cos\omega t \qquad \Rightarrow \textit{DISPARI} \text{ in } \omega$$

La suscettività (o ammettenza)

Relazioni e proprietà

4. Nel caso di una forza esterna periodica $K(t) = \mathrm{Re}(K_0\, e^{\,i\omega t})$, si ha

$$\delta\overline{B}(t) = \mathrm{Re}\left[\int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau) K_0\, e^{i\omega(t-\tau)}\right] = \mathrm{Re}\left[K_0 e^{i\omega t}\int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau) e^{-i\omega\tau}\right] =$$

$$= \mathrm{Re}\left[K_0 e^{i\omega t}\chi_{BA}[\omega]\right] = \mathrm{Re}\left[K_0\, e^{i\omega t}\left|\chi_{BA}[\omega]\right| e^{i\phi(\omega)}\right] = K_0\left|\chi_{BA}[\omega]\right|\cos(\omega t + \phi(\omega))$$

quindi la risposta del sistema **(al tempo *t***) ad un segnale periodico dipende direttamente dalla suscettività.

Il modulo della suscettività è massimo in corrispondenza delle frequenze proprie del sistema, pertanto la risposta è ***massima*** per frequenze della forzante prossime a quelle naturali del sistema: tipico fenomeno di ***risonanza***.

Ne vedremo un esempio.

Espressione di $R_{BA}(t\text{-}t')$

Data l'equazione di moto per la matrice densità ρ che rappresenta l'insieme statistico:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]}{i\hbar}$$

è possibile mostrare che la soluzione al primo ordine , con condizione iniziale $\rho(-\infty) = \rho_{eq}$, è data da

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_{eq} + \Delta\hat{\rho}(t) \quad \text{con} \quad \Delta\hat{\rho}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \left[\rho_{eq}, \hat{A}(t'-t)\right] K(t')$$

di conseguenza si ha

$$\delta\overline{B}(t) = \overline{B}(t) - \langle B \rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\hat{B}\right) - \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_{eq}\hat{B}\right) = \mathrm{Tr}\left[\left(\hat{\rho}_{eq} + \Delta\hat{\rho}\right)\hat{B}\right] - \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_{eq}\hat{B}\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\Delta\hat{\rho}\,\hat{B}\right) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\,\mathrm{Tr}\left\{\left[\hat{\rho}_{eq}, \hat{A}(t'-t)\right]\hat{B}\right\} K(t')$$

e, sfruttando la rappresentazione di Heisenberg degli operatori e la ciclicità della traccia, si ha anche

$$\delta\overline{B}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\,\mathrm{Tr}\left\{\left[\hat{\rho}_{eq}, \hat{A}(0)\right]\hat{B}(t-t')\right\} K(t') \Rightarrow \boxed{R_{BA}(t-t') = \frac{\mathrm{Tr}\left\{\left[\hat{\rho}_{eq}, A(0)\right]\hat{B}(t-t')\right\}}{i\hbar}}$$

Espressione di $R_{BA}(t\text{-}t')$

e suscettività

Sempre grazie alla ciclicità della traccia, vale anche:

$$R_{BA}(\tau) = \frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}\left\{\left[\hat{\rho}_{eq}, \hat{A}(0)\right]\hat{B}(\tau)\right\}\theta(\tau) = \frac{1}{i\hbar}\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}_{eq}\left[\hat{A}(0), \hat{B}(\tau)\right]\right\}\theta(\tau)$$

$$= \boxed{\frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}(0), \hat{B}(\tau)\right]\right\rangle\theta(\tau)}$$

dove la funzione a gradino $\boldsymbol{\theta}$ di Heaviside è introdotta per garantire il rispetto del principio di causalità.

È questo un risultato chiave poiché permette di ottenere la relazione fra la risposta lineare ad una perturbazione e lo spettro delle fluttuazioni spontanee del sistema, da cui poi il teorema di fluttuazione-dissipazione.

Data l'espressione della funzione di risposta, per la ***suscettività*** si ha di conseguenza:

$$\chi_{BA}[\omega] = \int_0^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau)\, e^{-i\omega\tau} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\langle\left[\hat{A}(0), \hat{B}(\tau)\right]\right\rangle\theta(\tau)e^{-i\omega\tau}$$

Una funzione di risposta più comoda

Come passare alle trasformate di Fourier convenzionali...

Avevamo introdotto una funzione di risposta definita su tutto l'asse dei tempi e che possiamo prendere dall'espressione esplicita della R_{BA}, eliminando la funzione a gradino:

$$\phi_{BA}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}(0),\hat{B}(t)\right]\right\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{B}(0),\hat{A}(-t)\right]\right\rangle = \begin{cases} R_{BA}(t) & t>0 \\ -R_{AB}(-t) & t<0 \end{cases}$$

$$\phi_{AB}(t) = -\phi_{BA}(-t) = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{B}(0),\hat{A}(t)\right]\right\rangle$$

dove R_{AB} è la funzione di risposta inversa (causale anch'essa) che descrive i cambiamenti nella media di A dovuti alla perturbazione $H_{ext} = -B\,K(t)$.

Tutto ciò consente l'utilizzo delle trasformate di Fourier "convenzionali" e la conformità al caso **quantistico** (nella risposta di un sistema reale), che deve tener conto del **bilancio dettagliato**. Unico modo di stabilire un legame diretto fra risposta e spettri delle funzioni di correlazione di variabili dinamiche del sistema

In particolare se $\phi_{BA} = \phi_{AB}$, come avviene per es. se $A=B$, allora ϕ_{BA} è una funzione ***dispari*** in t. È questo il caso più comune e di nostro più diretto interesse, ***e a questo ci limiteremo qui***.

Parte dissipativa della suscettività

Analizziamo la trasformata di Fourier della ϕ_{BA} :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau)\, e^{-i\omega\tau} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\langle \left[\hat{A}(0), \hat{B}(\tau) \right] \right\rangle e^{-i\omega\tau}$$

Si può mostrare che se A e B hanno lo stesso segno sotto inversione temporale, allora ϕ_{BA} è una funzione ***dispari*** in t e la $\chi''[\omega]$ è reale. Essendo questa la parte immaginaria della $\chi[\omega] = \chi'[\omega] - i\,\chi''[\omega]$ viene per questo associata al concetto di "dissipazione".

Vale in particolare:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau) \cos\omega\tau - i \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau) \sin\omega\tau =$$

$$= 0 - 2i \int_{0}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau) \sin\omega\tau$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau)\, e^{-i\omega\tau} = -2i \int_{0}^{+\infty} d\tau\, R_{BA}(\tau) \sin\omega\tau = -2i\, \chi''_{BA}[\omega]$$

Verso il teorema...

Proprietà delle funzioni di correlazione e dei loro spettri

Date due osservabili quantistiche X e Y, le correlazioni $<X(0)Y(t)>$ e $<Y(t)\, X(0)>$ non sono in genere uguali. In particolare, poiché $<X(0)Y(t)> = <Y(t-i\beta\hbar)\, X(0)>$, ***fra gli spettri di tali correlazioni*** sussiste la relazione:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \langle X(0)Y(t)\rangle\, e^{-i\omega t} = e^{\beta\hbar\omega}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \langle Y(t)X(0)\rangle\, e^{-i\omega t}$$

ed è possibile mostrare che, in seguito a ciò, lo spettro della funzione di correlazione è dato da:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \langle X(0)Y(t)\rangle e^{-i\omega t} = \frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle [X(0),Y(t)]\rangle\, e^{-i\omega t}}$$

Analogamente, si dimostra che per lo spettro della funzione di correlazione simmetrizzata $<X(0)Y(t)>_s = <X(0)Y(t) + Y(t)\, X(0)>/2$ vale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \langle X(0)Y(t)\rangle_s\, e^{-i\omega t} = \frac{1}{2}\,\frac{1+e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle [X(0),Y(t)]\rangle\, e^{-i\omega t} = \frac{E_\beta}{\hbar\omega}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle [X(0),Y(t)]\rangle\, e^{-i\omega t}$$

con $E_\beta = \dfrac{\hbar\omega}{2}\,\dfrac{1+e^{-\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}$ energia media di un oscillatore armonico alla temperatura $T = (\beta\, k_B)^{-1}$

Verso il teorema...

Suscettività e spettri della funzione di correlazione

Combinando il risultato visto in precedenza, cioè:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\, \phi_{BA}(\tau)\, e^{-i\omega\tau} = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \left\langle \left[\hat{A}(0), \hat{B}(\tau)\right] \right\rangle e^{-i\omega\tau} = -2i\chi''_{BA}[\omega]$$

con lo spettro della funzione di correlazione simmetrizzata:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \left\langle A(0)B(t)\right\rangle_s e^{-i\omega t} = \frac{E_\beta}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \left[A(0), B(t)\right]\right\rangle\, e^{-i\omega t}$$

si ottiene, se ϕ_{BA} è una funzione ***dispari*** in *t*,

$$\frac{\hbar\omega}{E_\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \left\langle A(0)B(t)\right\rangle_s e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \left[A(0), B(t)\right]\right\rangle\, e^{-i\omega t} = i\hbar\left[-2i\chi''_{BA}[\omega]\right]$$

$$\Rightarrow \chi''_{BA}[\omega] = \frac{\omega}{2E_\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, \left\langle A(0)B(t)\right\rangle_s e^{-i\omega t}$$

ovvero ***la parte dissipativa*** (parte immaginaria) ***della suscettività*** è legata allo ***spettro della funzione di correlazione simmetrizzata*** degli operatori. È questa una delle tante forme del ***teorema di fluttuazione-dissipazione***.

Il teorema di fluttuazione-dissipazione

Nel caso della autocorrelazione rappresentata da F(Q,t)

Abbiamo già incontrato la ***funzione intermedia di scattering***:

$$F(\boldsymbol{Q},t)=\int d\boldsymbol{r}\ e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{r}}G(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{N}\left\langle \rho_{-Q}(0)\rho_{Q}(t)\right\rangle=\frac{1}{N}\sum_{\alpha,\beta}\left\langle e^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{R}_\alpha(0)}e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{R}_\beta(t)}\right\rangle$$

Il cui spettro è il ***fattore di struttura dinamico***: $S(\boldsymbol{Q},\omega)=\frac{1}{2\pi}\int dt\ e^{-i\omega t}F(\boldsymbol{Q},t)$

Se poniamo $\hat{A}=\frac{1}{\sqrt{2\pi N}}\sum_{\alpha=1}^{N}e^{-i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{R}_\alpha(0)}$, si può anche scrivere $S(\boldsymbol{Q},\omega)=\int dt\ e^{-i\omega t}\left\langle \hat{A}(0)\hat{A}^+(t)\right\rangle$

che permette di scrivere la trasformata di Fourier della funzione di risposta nella forma

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dt\ e^{-i\omega t}\phi_{A^+A}(t)=\int_{-\infty}^{+\infty}dt\ e^{-i\omega t}\frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A}(0),\hat{A}^+(t)\right]\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dt\ e^{-i\omega t}\frac{1}{i\hbar}\left\langle \hat{A}(0)\hat{A}^+(t)-\hat{A}^+(t)\hat{A}(0)\right\rangle=$$

$$=\frac{1}{i\hbar}S(\boldsymbol{Q},\omega)-\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\ e^{-i\omega t}\left\langle \hat{A}^+(t)\hat{A}(0)\right\rangle=\frac{1}{i\hbar}\left[S(\boldsymbol{Q},\omega)-\int_{-\infty}^{+\infty}dt\ e^{-i\omega t}\left\langle \hat{A}(0)\hat{A}^+(t+i\beta\hbar)\right\rangle\right]$$

Il teorema di fluttuazione-dissipazione

Nel caso della autocorrelazione rappresentata da F(Q,t)

Quindi, posto $t + i\beta\hbar = \tau$

$$-2i\chi''[\omega] = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\ e^{-i\omega t}\phi_{A^+A}(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[S(\boldsymbol{Q},\omega) - \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau\ e^{-i\omega\tau}e^{-\beta\hbar\omega}\left\langle \hat{A}(0)\hat{A}^+(\tau)\right\rangle\right] = \frac{1}{i\hbar}\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)S(\boldsymbol{Q},\omega)$$

$$\boxed{S(\boldsymbol{Q},\omega) = \frac{2\hbar}{\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)}\chi''[\omega]} \xrightarrow[\hbar\to 0]{} \frac{2}{\beta\omega}\chi''[\omega]$$

Si ricorda che spesso viene usata la notazione $\quad n(\omega)+1 = \dfrac{1}{\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)} = -n(-\omega)$

La "***risposta ad una perturbazione***" fornisce dunque ***lo spettro della correlazione di fluttuazioni spontanee***

ATTENZIONE: nella notazione di Kubo, qui seguita, le trasformate sono definite a meno del fattore $(2\pi)^{-1}$!!!!!

Tornando agli aspetti di "principio"

Proprietà dinamiche di equilibrio (i.e. delle relative funzioni di correlazione) possono essere determinate attraverso l'interazione con una sonda e, in particolare, tramite 'perturbatrici' **misure di scattering?**

Se la perturbazione è debole (regime di risposta lineare) **allora...**