

d) Kramers-Kronig-Relation:

• Motivation: FD-Theorem:  $C(\omega) \rightarrow X''(\omega) \xrightarrow[\text{Rel.}]{\text{KK-}} X'(\omega)$

$$\boxed{\text{Kausalität} \rightarrow X'(\omega) \leftrightarrow X''(\omega)} \quad (7.20)$$

• Herleitung:

(1) Definiere:  $X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{izt} \chi(t) dt = \int_0^{\infty} e^{izt} \chi(t) dt, \text{Im } z \geq 0$

$\rightarrow X(z)$  ist analytisch in  $\text{Im } z \geq 0$  Gnd: Kausalität

Eigenschaft:  $X(-z^*) = X^*(z) \quad (7.21)$

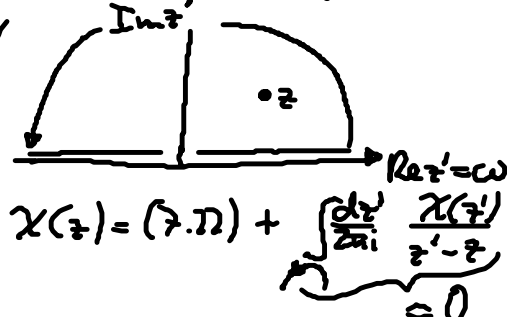
andere Darstellung

$$\boxed{X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{X(\omega)}{\omega - z}} \quad (7.22)$$

Gnd: Cauchy'sche Integralformel

$$f(z) = \oint \frac{dz'}{2\pi i} \frac{f(z')}{z' - z}$$

Beweis:  $X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega t}}{\omega - z}$



$$X(z) = (7.22) + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi i} \frac{X(\omega')}{z' - z}}_{=0}$$

falls  $X(\omega) \sim \frac{1}{|\omega|^{1+\epsilon}}$   
für  $\omega \rightarrow \infty$

(2) (7.22)  $\rightarrow X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} X(\omega) \left[ \frac{1}{\omega - z} \pm \frac{1}{\omega - z^*} \right]$

$0 = \oint \frac{X(z)}{z - z^*}$  weil  $X(z)$  analytisch für  $\text{Im } z > 0$

$$\stackrel{(+)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi i} X(\omega) \text{Re} \frac{1}{\omega - z} \stackrel{(-)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} X(\omega) \text{Im} \frac{1}{\omega - z}$$

(lese ab:  $\rightarrow \text{Re } X(z) \quad \rightarrow \text{Im } X(z)$ )

also:  $X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \text{Im } X(\omega) \left[ \text{Re} \frac{1}{\omega - z} + i \text{Im} \frac{1}{\omega - z} \right] \quad (7.23)$

$$\rightarrow \boxed{X(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{X''(\omega)}{\omega - z}} \quad (7.24)$$

...  $X(z)$  aus  $X''(\omega)$ !

$$\rightarrow \chi(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - (\omega + i\varepsilon)}$$

$$\text{mit } \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{x - i\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{x + i\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \rho \frac{1}{x} + \pi i \delta(x) \quad (7.25)$$

$$\rightarrow \chi(\omega) = \rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} + i \chi''(\omega)$$

$$\rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{x} \dots dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{1}{x} \dots dx \quad (7.26)$$

$$\rightarrow \chi'(\omega) = \rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (a) \quad (7.27)$$

$$\text{analog: } \chi''(\omega) = \rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (b) \quad [(7.23) \text{ mit } \text{Re } \chi(\omega)]$$

... Kramers-Kronig-Relationen

$$\cdot \text{wegen: } \chi(z^*) = \chi^*(z) \xrightarrow{z=\omega} \chi''(\omega) = -\chi''(-\omega) \quad (7.28)$$

... Antisymmetrie

$$(7.27)(a) \xrightarrow{(7.28)} \chi'(\omega) = \rho \int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega} + \rho \int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi''(\omega')}{\omega' + \omega}$$

$$\xrightarrow{\substack{\omega' + \omega + \omega' - \omega \\ = 2\omega'}} \chi'(\omega) = 2\rho \int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\omega' \chi''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (7.29)$$

... nur  $\chi''(\omega)$  für  $\omega > 0$  nötig!

## 7.4 Beispiel: Brownsches Teilchen

- System: Hemische Bewegung in viskoser Flüssigkeit (Wärmebad!)



• mögliche dynamische Variable:

$$\langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle = 2 \left[ \langle x^2 \rangle - \langle x(0) \cdot x(t) \rangle \right] \quad (7.30)$$

$$= 2 \left[ C(0) - C(t) \right]$$

... mittlere quadratische Verschiebung

NB:  $\langle x(0) - x(t) \rangle = 0!$

• dynamische Suszeptibilität:

vernachlässige Trägheitseffekte von Teilchen und Flüssigkeit:

$$\rightarrow x(t) = \mu E(t) \rightarrow \frac{dx(t)}{dt} = \mu \dot{E}(t)$$

Mobilität:  
 $\frac{1}{6\pi\eta a}$   $f = \text{Kugel}$

$$\xrightarrow{FT} -i\omega x(\omega) = \mu \dot{E}(\omega)$$

$$x(\omega) = i \underbrace{\frac{\mu}{\omega}}_{\chi''(\omega)} E(\omega) \quad (7.31)$$

[gültig für „kleines“  $\omega$ ]

• FD-Theorem:

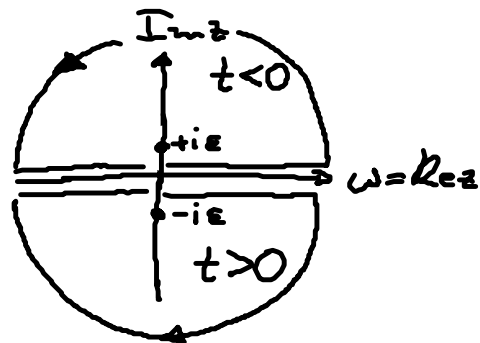
$$C(\omega) = \int \langle x(0) \cdot x(t) \rangle e^{i\omega t} dt$$

$$= 3 \cdot \frac{2k_B T}{\omega} \chi''(\omega) = \frac{6\mu k_B T}{\omega^2}$$

für jede  
 Raumdimension

Berechne:

$$\begin{aligned}
 C(0) - C(t) &= \int C(\omega) (1 - e^{-i\omega t}) \frac{d\omega}{2\pi} \\
 &= 6\mu k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \frac{d\omega}{2\pi} \\
 &\quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\omega + i\varepsilon)(\omega - i\varepsilon)}
 \end{aligned}$$



Residuensatz =  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 6\mu k_B T \begin{cases} \frac{2\pi i}{-2\pi} \frac{1 - e^{-\varepsilon t}}{-2i\varepsilon} = 3\mu k_B T t, & t > 0 \\ \frac{2\pi i}{2\pi} \frac{1 - e^{\varepsilon t}}{2i\varepsilon} = -3\mu k_B T t, & t < 0 \end{cases}$

(7.30)  $\rightarrow$

$$\begin{aligned}
 \langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle &= 2 [C(0) - C(t)] \\
 &= 6Dt \quad \dots \text{ Diffusion} \quad (7.32) \\
 \text{mit } D &= \mu k_B T \quad \dots \text{ Einstein-Relation}
 \end{aligned}$$

Fluktuation  $\nearrow$   $\nwarrow$  Dissipation