

# Fluktuation-Dissipations-Theorem

$$C(\omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \chi''(\omega) \quad (7.15)$$

## d) Kramers-Kronig-Relation:

- Motivation: FD-Theorem:  $C(\omega) \rightarrow \chi''(\omega) \xrightarrow{KK} \chi'(\omega)$

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

- Herleitung:  
 (1) Definiere:  $\chi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{izt} \chi(t) dt = \int_0^{\infty} e^{izt} \chi(t) dt, \quad \text{Im } z \geq 0! \quad (7.21a)$

Fortschreibung von  $\chi(\omega)$  ins Komplexe  $\rightarrow \chi(z)$  ist analytisch in  $\text{Im } z \geq 0$   
 Grund: Kausalität

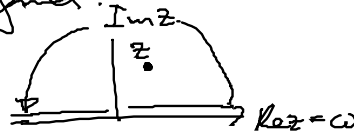
$$\text{Eigenschaften: } \chi^*(z) = \chi(-z^*) \quad (7.21)$$

andere Darstellung:

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

(i) Grd: Cauchy'sche Integralformel:

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



(ii) Beweis:  $\chi(z) \stackrel{(7.21a)}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) e^{izt} dt = \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi(t) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega t}}{\omega - z} \chi(\omega)$

(2) (7.22)  $\rightarrow \chi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \chi(\omega) \left[ \frac{1}{\omega - z} \pm \frac{1}{\omega - z^*} \right]$   
 $\oint \frac{\chi(z') dz'}{z' - z^*} = 0$ , weil  $\frac{\chi(z')}{z' - z^*}$  analytisch für  $\text{Im } z > 0$

$$\begin{aligned} \text{(+) } \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi i} \chi(\omega) \text{Re} \frac{1}{\omega - z} &= \text{(')} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \chi(\omega) \text{Im} \frac{1}{\omega - z} \\ \text{Re abt} \rightarrow \text{Re } \chi(z) &\rightarrow \text{Im } \chi(z) \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

... Kramers-Kronig-Relationen

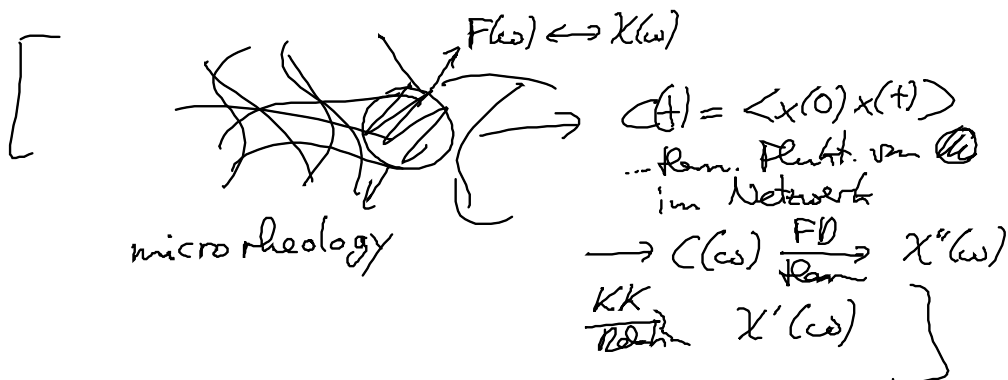
• Wegen (7.21)  $\chi(-z^*) = \chi^*(z)$   $\xrightarrow{z=\omega} \text{Im}} \boxed{\chi''(\omega) = -\chi''(-\omega)} \quad (7.28)$

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

verwende  $\int_{-\infty}^{\infty}$  in (7.28) in  $\int \dots$

$$\rightarrow \boxed{\chi'(\omega) = 2P \int_0^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\omega' \chi''(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}} \quad (7.29)$$

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



## 7.4 Beispiel: Brownsches Teilchen

- System: Ramische Bewegung in viskoser Flüssigkeit (Wannebad)



- mögliche dynamische Variable:  $\langle x \rangle = 0$

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

$$= 2 [C(0) - C(t)]$$

... mittlere quadratische Verschiebung

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

- dynamische Suszeptibilität:  
vernachlässige Trägheitseffekte von Teilchen und Flüssigkeit

$$\rightarrow v(t) = \mu F(t) \longrightarrow \frac{dx(t)}{dt} = \mu F(t)$$

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

Mobilität  
 $\frac{1}{6\pi\eta a}$  für Kugel  
Viskosität Kugelradius

$$\rightarrow x(\omega) = i \frac{\mu}{\omega} F(\omega) \quad (7.31)$$

$$\underbrace{\quad}_{\tilde{\chi}''(\omega)}$$

[gültig für „kleines“  $\omega$ ]

- FD-Theorem:

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

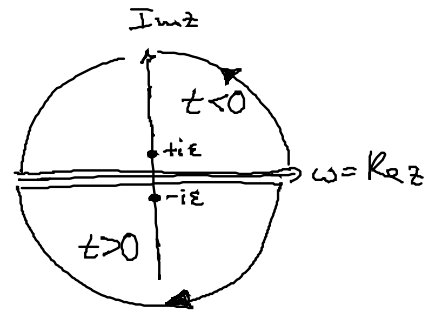
$$= 3 \times \frac{2k_B T}{\omega} \tilde{\chi}''(\omega) = \frac{6\mu k_B T}{\omega^2}$$

für jede  
Raumdimension!

Berechne:

$$C(0) - C(t) = \int C(\omega) (1 - e^{-i\omega t}) \frac{d\omega}{2\pi}$$

$$= 6\mu h_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\omega^2} (1 - e^{-i\omega t}) \frac{d\omega}{2\pi}$$



$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\omega + i\varepsilon)(\omega - i\varepsilon)} \underbrace{1 - e^{-i\omega t}}$$

Residuensatz

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

(7.30) →

$$\langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle = 2 [C(0) - C(t)]$$

$$= 6 D |t| \dots \text{Diffusion!}$$

mit  $D = \mu h_B T \dots$  Einstein-Relation

Fluktuation      Dissipation