

d) Kramers-Kronig-Relation:

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

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

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

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

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

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

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

analog:  $\chi''(\omega) = P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (b)$

... Kramers-Kronig-Relationen

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

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

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

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

[gut für Exp./Simulationen]

[s. 7.5]

7.4 Beispiel: Brownsche Teilchen

• System: Remische Bewegung in viskoser Flüssigkeit (Wannebad!!)



• mögliche dynamische Variable:

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

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

... mittlere quadratische Verschiebung

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

• dynamische Suszeptibilität:

vernachlässige Trägheitseffekte von Teilchen und Flüssigkeit

$$\rightarrow x(t) = \mu \int_0^t F(t') dt' \quad \rightarrow \frac{dx(t)}{dt} = \mu F(t)$$

Mobilität

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

$\frac{1}{6\pi\eta a}$  für Kugel

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

• FO-Theorem:

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

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

↑  
für jede Raumdimension

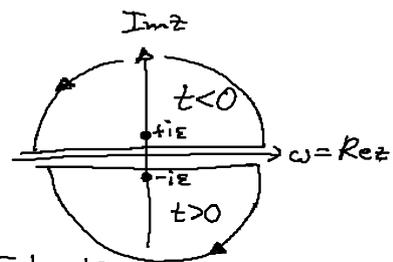
Brede:

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

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

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\omega + i\epsilon)(\omega - i\epsilon)}$$

$$\text{Residuen-} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} 6\mu k_B T \left\{ \begin{aligned} & \frac{-2\pi i}{2\pi} \frac{1 - e^{-\epsilon t}}{-2i\epsilon t} = 3\mu k_B T t, t > 0 \\ & \frac{2\pi i}{2\pi} \frac{1 - e^{\epsilon t}}{2i\epsilon} = -3\mu k_B T t, t < 0 \end{aligned} \right.$$



(7.30)  $\rightarrow$

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

$$= 6 D |t| \quad \dots \text{ Diffusion} \quad (7.32)$$

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

↑  
Reibkoeffizienten      ↑  
Dissipation

## 7.5 Mikrorheologie

- Ref: B. Schnur et al.: Determining Microscopic Viscoelasticity in Flexible and Semiflexible Polymer Networks from Thermal Fluctuations of Macromolecules 30, 7781 (1997)

- Motivation: Experimentelle Methode um viskoelastische Eigenschaften zu messen:



aktiv:  $F(\omega) \rightarrow x(\omega) = \chi(\omega) F(\omega)$

↑  
Viskoelastizität

passiv: therm. Fluktuationen:  $x(t)$   
 $\rightarrow \langle |x(\omega)|^2 \rangle \rightarrow \chi(\omega)$  (7.33)

- Bsp. 1 s. Abschnitt 7.4

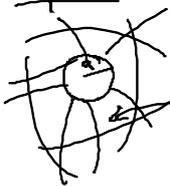
Newtonsche Flüssigkeit

Spannung:  $T_{ij} = 2\eta A_{ij}$ ,  $A_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)$  (7.34)

Skalaviszität

(7.31)  $\rightarrow \chi(\omega) = i \frac{\eta}{\omega} = i \frac{1}{6\pi\eta a \omega}$  (7.35)

- Bsp. 2: Polymer / Aktin Netzwerk



↑  
Skelett einer Zelle  $\rightarrow$  Steifigkeit

charakterisiert durch:

$T_{ij}(\omega) = 2 G(\omega) \varepsilon(\omega)$ ,  $\varepsilon(\omega) = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$  (7.36)

... Spags-Dehngrelation

... Verzerrungstensor  
 $u$  ... Verschiebungsfeld  
 $[v = \dot{u} !!]$

Komplexer Sdarmodul

$G(\omega) = G'(\omega) + i G''(\omega)$  (7.37)

Elastizitäts  
modul

Verlustmodul  
 $= \omega \eta(\omega)$

↑  
 $v = \dot{u}$   
in (7.36)

• Methode:

Verallg. von (7.35):  $i\omega\eta \rightarrow G(\omega)$

also:  $\chi(\omega) = \frac{1}{6\pi G(\omega) a}$  (7.38)

Messe:  $\chi(\omega) \rightarrow G(\omega)$ !

(i) Messe  $\chi''(\omega)$  über FD-Theorem:

Therm. Bewegung von  $\begin{matrix} \circ \\ x(t) \end{matrix}$    $2 \times 2 \dots 2\text{Dimension}$

$\rightarrow$  spektrale Dichte  $\langle |x(\omega)|^2 \rangle \stackrel{\text{FD}}{=} \frac{4k_B T}{\omega} \chi''(\omega)$

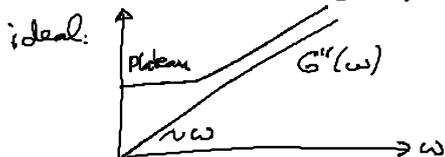
(ii) Berechne  $\chi'(\omega)$  über KK-Relation (7.29)

(iii) Berechne:  $G(\omega) = G'(\omega) + i G''(\omega) = \frac{1}{6\pi \chi(\omega) a}$  } (7.38)

mit  $G'(\omega) = \frac{1}{6\pi a} \frac{\chi'(\omega)}{\chi'(\omega)^2 + \chi''(\omega)^2}$

$G''(\omega) = \frac{1}{6\pi a} \frac{-\chi''(\omega)}{\cdot}$

• Atkinnetzwerk:



real: (jenseits) s. Folien