

## 7.3 Fluktuation-Dissipationstheorem II

• lineare Antwort: 
$$\begin{cases} \Delta \bar{x}(\omega) = \chi(\omega) F(\omega) \\ \Delta \bar{x}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t-t') F(t') dt' \end{cases} \quad (7.7)$$

a) Herleitung: • siehe (7.10) = (7.13)

$$\Delta \bar{x}(t) = C(t) \beta F = F \int_{-\infty}^0 \underbrace{\chi(t-t')}_{\tau} \underbrace{dt'}_{-d\tau} \quad \text{für } t \geq 0!$$

$$\langle \Delta x(0) \Delta x(t) \rangle$$

$$\rightarrow \beta C(t) = - \int_{-\infty}^t \chi(\tau) d\tau$$

$$\rightarrow \boxed{\chi(t) = \begin{cases} -\beta \frac{d}{dt} C(t), & t > 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}} \quad (7.14)$$

• Betrachte:

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{2i} [\chi(\omega) - \chi^*(\omega)]$$

$$\text{mit } \chi(\omega) \stackrel{(7.14)}{=} -\beta \int_0^{\infty} \left[ \frac{d}{dt} C(t) \right] e^{i\omega t} dt$$

$$= -\beta \left[ C(t) e^{i\omega t} \Big|_0^{\infty} - i\omega \int_0^{\infty} C(t) e^{i\omega t} dt \right]$$

$$C(\infty) = 0 \quad = \beta C(0) + \beta i\omega \int_0^{\infty} C(t) e^{i\omega t} dt$$

$$\rightarrow \chi''(\omega) = \frac{1}{2i} \left[ \beta i\omega \int_0^{\infty} \dots + \beta i\omega \underbrace{\int_0^{\infty} \frac{C(t)}{C(t)} e^{-i\omega t} dt}_{\xrightarrow{-t \rightarrow t} \int_{-\infty}^0 C(t) e^{i\omega t} dt} \right]$$

$$= \frac{\beta\omega}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} C(t) dt$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad \boxed{C(\omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \chi''(\omega)} \quad (7.15)$$

Fluktuationen im Fern. GG

... Fluktuation-Dissipationstheorem

Dissipation von Energie

b) Verallgemeinerung

$$\begin{aligned} x_i(\underline{k}, \omega) &= \chi_{ij}(\underline{k}, \omega) F_j(\underline{k}, \omega) \\ \xrightarrow{FT} x_i(\underline{k}, t) &= \iint d^3r' dt' \chi_{ij}(\underline{r}-\underline{r}', t-t') F_j(\underline{r}', t') \end{aligned} \quad (7.16)$$

... zeitlich und räumlich nichtlokale  
lineare Antwort  $x$  auf generalisierte  
Kraft  $F$  in homogenem System

→ Dissipations-Fluktuationstheorem

$$\begin{aligned} C_{ij}(\underline{k}, \omega) &= \frac{2k_B T}{\omega} \chi_{ij}''(\underline{k}, \omega) \\ \text{mit } C_{ij}(\underline{k}, \omega) &= \iint d^3r dt \langle x_i(\underline{Q}, 0) x_j(\underline{r}, t) \rangle e^{i(\omega t - \underline{k} \cdot \underline{r})} \end{aligned} \quad (7.17)$$

c) Wiener-Khintline-Theorem:

• Betrachte: eine Variable, nur Zeit

Berechne  $\langle x(\omega) x^*(\omega') \rangle = \iint \langle x(t) x^*(t') \rangle e^{i(\omega t - \omega' t')} dt dt'$   
 $C(t'-t) = C(t-t')$

[Korrel.fkt. hängt nur  
von Zeitdiff. ab  
im fem. GG]

$$= \iint C(t-t') e^{i\omega(t-t')} e^{-i\omega'(t-t')} d(t-t') dt'$$

$$= C(\omega) 2\pi \delta(\omega - \omega')$$

$$\langle |x(\omega)|^2 \rangle := \int \langle x(\omega) x^*(\omega') \rangle \frac{d\omega'}{2\pi} = C(\omega)$$

spektrale  
Dichte

... Wiener-Khintline-  
Theorem

FT der Autokorrelations-  
funktion

• Verallgemeinerung:

$$\langle x_i(\underline{k}, \omega) x_j^*(\underline{k}, \omega') \rangle := \int \langle x_i(\underline{k}, \omega) x_j^*(\underline{k}, \omega') \rangle \frac{d\omega'}{2\pi} = C_{ij}(\underline{k}, \omega) \quad (7.18)$$

• Relevanz: für Experiment, Simulation

Messe:  $[x(t) \rightarrow] x(\omega) \rightarrow \langle |x(\omega)|^2 \rangle \xrightarrow{WK} C(\omega) \rightarrow C(t)$   
Planck

Bsp: Lichtstreuung: Messe Streufeld  $E(\omega) \rightarrow \langle |E(\omega)|^2 \rangle$

$$\rightarrow C_{EE}(\omega) \rightarrow C_{EE}(t) \rightarrow \text{Info über Dynamik des Systems}$$

d) Kramers-Kronig-Relation

• Motivation: PD-Theorem:  $C(\omega) \rightarrow \chi''(\omega) \xrightarrow{\text{KK.}} \chi'(\omega)$   
 $\xrightarrow{\text{Rel.}}$

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

• Ableitung:

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

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

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

andere Darstellung:

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

(i) Grd: Cauchy'sche Integralformel (CI)  $\text{Im} z$

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



(ii) Beweis (7.22)

$$(7.20) \rightarrow \chi(z) \stackrel{\text{CI auf } e^{izt}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{i\omega t}}{\omega - z} = \chi(\omega)$$

(iii) allg. Def. von  $\chi(z)$  in (7.22)

$$\chi(z) \stackrel{\text{CI}}{=} (7.22) + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz'}{2\pi i} \frac{\chi(z')}{z - z'}}_{=0}$$

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

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

$$\int \frac{\chi(z')}{z - z'^*} = 0, \text{ weil } \frac{\chi(z)}{z - z^*}$$

analytisch für  $\text{Im} z > 0$

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

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{\text{Kesselnb.} \rightarrow \text{Re} \chi(z)} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\rightarrow \text{Im} \chi(z)}$$

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

$$\rightarrow \boxed{\chi(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\chi''(\omega)}{\omega - z}} \quad (2.24)$$

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