7.3 Fluktuations-Dissipationstheorem II

· lineare Antwort:

$$\boxed{\begin{aligned}\Delta\bar{x}(\omega) &= \chi(\omega)\,F(\omega)\\ \Delta\bar{x}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty}\chi(t-t')\,F(t')\,dt'\end{aligned}} \quad (7.7)$$

a) Herleitung: · Setze $(7.10) = (7.13)$

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

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

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

· Betrachte:

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

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

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

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

$$\longrightarrow \chi''(\omega) = \frac{1}{2i}\Big[\beta i\omega\int_0^{\infty}\ldots + \beta i\omega\underbrace{\int_0^{\infty}\underset{C(-t)}{C(t)}\,e^{-i\omega t}\,dt}_{\overset{-t\to t}{\longrightarrow}\int_{-\infty}^{0}C(t)\,e^{i\omega t}\,dt}\Big]$$

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

$$\xrightarrow{\beta=\frac{1}{k_BT}} \quad \boxed{C(\omega) = \frac{2k_BT}{\omega}\,\chi''(\omega)} \quad (7.15)$$

... Fluktuations-Dissipationstheorem

Fluktuationen im therm. GG

Dissipation von Energie

b) Verallgemeinerung

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

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

$\longrightarrow$ Dissipations-Fluktuations-Theorem

$$\boxed{\begin{aligned} C_{ij}(\underline{k},\omega) &= \frac{2k_BT}{\omega}\, \chi''_{ij}(\underline{k},\omega) \\ \text{mit } C_{ij}(\underline{k},\omega) &= \iint d^3r\,dt\, \langle x_i(\underline{0},0)\, x_j(\underline{r},t)\rangle\, e^{i(\omega t-\underline{k}\cdot\underline{r})} \end{aligned}} \tag{7.17}$$

c) Wiener-Khintchine-Theorem:

- Betrachte: eine Variable, nur Zeit t

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

[Korrel. fkt. hängt nur von Zeitdifferenz ab im therm. GG]

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

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

$$\boxed{\underbrace{\langle |x(\omega)|^2\rangle}_{\text{spektrale Dichte}} := \int \langle x(\omega)\, x^*(\omega')\rangle \frac{d\omega'}{2\pi} = C(\omega)}$$

... Wiener-Khintchine-Theorem

$C(\omega)$: FT der Autokorrelations-funktion

- Verallgemeinerung:

$$\boxed{\langle x_i(\underline{k},\omega)\, x_j^*(\underline{k},\omega)\rangle := \int \langle x_i(\underline{k},\omega)\, x_j^*(\underline{k},\omega')\rangle \frac{d\omega'}{2\pi} = C_{ij}(\underline{k},\omega)} \tag{7.19}$$

- Relevanz: für Experiment, Simulation

Messe: $[x(t)\to]\ x(\omega) \longrightarrow \langle |x(\omega)|^2\rangle \xrightarrow[\text{Theorem}]{WK} C(\omega) \longrightarrow C(t)$

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

$\longrightarrow C_{EE}(\omega) \longrightarrow C_{EE}(t) \longrightarrow$ Info über Dynamik des Systems.

d) Kramers-Kronig-Relation

· Motivation: FD-Theorem: $C(\omega) \longrightarrow \chi''(\omega) \xrightarrow[\text{Rel.}]{\text{KK.}} \chi'(\omega)$

$$\boxed{\text{Kausalität} \longrightarrow \chi'(\omega) \longleftrightarrow \chi''(\omega)} \quad (7.20)$$

· Herleitung:

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

$\longrightarrow$ $\chi(z)$ ist analytisch in $\mathrm{Im}\, z \geq 0$ Grund: Kausalität

Eigenschaft: $\chi(-z^*) = \chi^*(z)$ (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) Grund: Cauchysche Integralformel (CI)

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

(ii) Beweis (7.22)

$$(7.20) \longrightarrow \chi(z) \underset{\substack{\text{CI auf} \\ e^{izt}}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t)\,dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i}\, \frac{e^{i\omega t}}{\omega - z} \quad = \chi(\omega)$$

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

$$\chi(z) \underset{\text{CI}}{=} (7.22) + \underbrace{\int \frac{dz'}{2\pi i}\, \frac{\chi(z')}{z - z'}}_{=0!}, \quad \text{falls } \chi(\omega) \sim \frac{1}{|\omega|^{1+\delta}} \text{ für } \omega \to \infty$$

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

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

$$\overset{(+)}{=} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi i}\, \chi(\omega)\, \mathrm{Re}\, \frac{1}{\omega - z}}_{\text{lese ab: } \to \mathrm{Re}\, \chi(z)} \overset{(-)}{=} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi}\, \chi(\omega)\, \mathrm{Im}\, \frac{1}{\omega - z}}_{\to \mathrm{Im}\, \chi(z)}$$

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

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

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