

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

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

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

... 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

$$\rightarrow x(t) = \int \mu F(t) dt \quad \rightarrow \frac{dx(t)}{dt} = \mu F(t)$$

Mobilität

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

$\frac{1}{6\pi\eta a}$ für Kugel

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

• 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

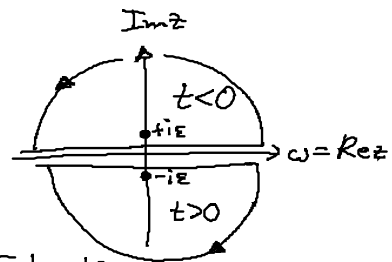
Brede:

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

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

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

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



$$(7.30) \rightarrow \boxed{\langle |x(t) - x(0)|^2 \rangle = 2 [C(0) - C(t)]} \quad (7.32)$$

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

mit $D = \mu k_B T \quad \dots \text{ Einstein-Relation}$

↑ ↑
Fluktuationen 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: $F(\omega) \rightarrow x(\omega) = \chi(\omega) F(\omega)$
 ↑
 viskoelastität

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

- Bsp. 1 s. Abschnitt 7.4

Newtonsche Flüssigkeit

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

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

Komplexer Sdarmodul

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

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

↑
 $v = \dot{u}$
 in (7.36)

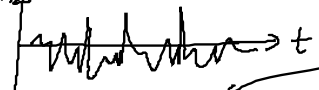
• Methode:

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

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

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

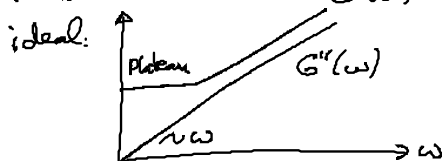
(ii) Berechne $\chi'(\omega)$ über KK-Relation (7.29)

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

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

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

• Aktivenetzwerk:



real: (jenseits) s. Folien