Lösungen zum 4. Plenum Statistische Physik II UE, 20.05.2019

1. **Experimentelle Bestimmung des komplexe Brechungsindex**

   Um die optischen Eigenschaften eines Materials zu bestimmen, wird elektromagnetische Strahlung mit Kreisfrequenz ω an einer ebenen polierten Oberfläche des Materials, unter normalem Einfallswinkel reflektiert und das Reflexionsvermögen
   $$R(\omega) = \frac{I_{\text{aus}}(\omega)}{I_{\text{ein}}(\omega)}.$$
   über einen weiten Frequenzbereich gemessen.

   a) Auf TUWEL finden Sie Messwerte für das Reflexionsvermögen $R(\omega)$ von Aluminium. Berechnen Sie damit numerisch den komplexen Brechungsindex $n(\omega) = n_r(\omega) + in_i(\omega)$.

   Lösung:

   Die reflektierte Strahlung $E_{\text{aus}}(\omega)$ steht mit der einfallenden Strahlung $E_{\text{ein}}(\omega)$ über den Reflektionskoeffizienten $r(\omega) = |r(\omega)|e^{i\theta(\omega)}$ in Beziehung
   $$E_{\text{aus}}(\omega) = r(\omega)E_{\text{ein}}(\omega).$$
   Durch einfache Intensitätsmessung kann das Betragsquadrat des Reflektionskoeffizienten
   $$R(\omega) = |r(\omega)|^2 = \frac{I_{\text{aus}}(\omega)}{I_{\text{ein}}(\omega)}$$
   über einen weiten Frequenzbereich gemessen werden. Um die Phase zu bestimmen wendet man die Kramers-Kronik-Relationen auf die Responsefunktion
   $$\ln r(\omega) = \frac{1}{2}\ln R(\omega) + i\theta(\omega)$$
   an und erhält
   $$\theta(\omega) = -\frac{1}{2\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\ln R(\omega')}{\omega'-\omega}d\omega' = -\frac{1}{2\pi}\lim_{\Omega\to\infty}\int_{-\Omega}^{\Omega}\frac{\ln R(\omega') - \ln R(\omega)}{\omega'-\omega}d\omega'.$$
   Um die negativen Frequenzen zu eliminieren verwendet man $R(\omega) = R(-\omega)$ und erhält
   $$\theta(\omega) = -\frac{1}{2\pi}\lim_{\Omega\to\infty}\int_{0}^{\Omega}(\ln R(\omega') - \ln R(\omega))\left(\frac{1}{\omega'-\omega} - \frac{1}{\omega'+\omega}\right)d\omega'.$$
   In dieser Form kann das Integral zwar berechnet werden, konvergiert aber sehr schlecht mit Ω. Um eine bessere Konvergenz zu gewährleisten, integriert man einmal partiell und erhält
   $$\theta(\omega) = -\frac{1}{2\pi}\lim_{\Omega\to\infty}\int_{0}^{\Omega}\frac{d}{d\omega'}[\ln R(\omega')]\ln\left|\frac{\omega'+\omega}{\omega'-\omega}\right|d\omega',$$

wobei verwendet wurde, dass der Randterm

$$(\ln R(\omega') - \ln R(\omega)) \ln \left| \frac{\omega' + \omega}{\omega' - \omega} \right|$$

für $\omega' \to \infty$ und $\omega' \to 0$ verschwindet. Die Berechnung des Integrals und der Vergleich mit Werten aus der Literatur finden Sie im Mathematica-File auf TUWEL. Ich werde in den nächsten Tagen auch ein Jupyter-File erstellen. Um schlussendlich den Berechnungsindex zu berechnen, verwendet man die Beziehung

$$r = \frac{n-1}{n+1} \qquad \text{bzw.} \qquad n = \frac{1+r}{1-r},$$

welche einen Spezialfall der Fresnel-Gleichungen unter normalem Einfallswinkel darstellt.

b) Vergleichen Sie mit dem komplexen Brechungsindex, der vom Drude-Modell mit Parameter $\omega_p^2 = \frac{n_e e^2}{m\varepsilon_0} = 15\,\mathrm{eV}$ und $\gamma = 0.4\,\mathrm{eV}$ vorhergesagt wird. Diskutieren Sie eventuelle Unterschiede.

Lösung:

Wie im 5.Tutorium gezeigt, lautet die komplexe Leitfähigkeit im Drude-Modell

$$\sigma(\omega) = \frac{n_e e^2}{m} \frac{1}{-i\omega + \gamma},$$

wobei n_e die Elektronendichte ist. Der Zusammenhang zwischen Leitfähigkeit und dielektrischer Funktion ist im SI-Einheitensystem gegeben durch

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_0 + \frac{i\sigma(\omega)}{\omega}.$$

Der Brechungsindex berechnet sich aus der dielektrischer Funktion mit

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0}} = \sqrt{1 + \frac{n_e e^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{-i\omega + \gamma}} = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma}},$$

wobei die Plasmafrequenz

$$\omega_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m\varepsilon_0}}$$

verwendet wurde. Für höhere Frequenzen $\omega > 5\mathrm{eV}$ liefert das Drude-Modell relativ gute Vorhersagen für die optischen Konstanten von Aluminium. Bei niedrigen Frequenzen gibt es Bandübergänge, die im Drude-Modell nicht beschrieben werden können. Der numerische Vergleich ist im Mathematica-File diskutiert.

2. **Weiterführende Analyse des Gleichgewichtszustandes**

Gegeben sei die folgende stochastische Differentialgleichung

$$\dot{Y}(t) = -aY(t) + b\zeta(t),$$

wobei die stochastische Variable $\zeta(t)$ ungerichtet $\langle\zeta(t)\rangle = 0$, aber nicht notwendigerweise unkorreliert ist $\langle\zeta(t)\zeta(t')\rangle = \phi(t-t')$. Das System befindet sich im Gleichgewichtszustand.

a) Argumentieren Sie warum das Zeitmittel und das Ensemblemittel

$$\bar{B} = \frac{1}{T}\int_T B(Y(t))dt \qquad \text{und} \qquad \langle B\rangle = \int B(Y)\,w_\infty(Y)\,dY$$

einer Observable $B(Y)$ im Gleichgewichtszustand äquivalent sind.

Lösung:

Wie im 3.Plenum gezeigt wurde, besitzt diese stochastische Differentialgleichung einen eindeutigen Gleichgewichtszustand $w_\infty(Y)$. Wir gehen im Folgenden davon aus, dass sich das System bereits seit $t \to -\infty$ im Gleichgewichtszustand befindet. Die Equilibrierung des Systems hat also bereits vor unendlich langer Zeit stattgefunden.

Betrachtet man eine spezielle Trajektorie $Y(t)$ über einen genügend langen Zeitraum T, so „besucht" diese Trajektorie jedes Intervall $[Y, Y+dY]$ im Phasenraum immer wieder. Die (relative) Häufigkeit mit der sich die Trajektorie im Intervall $[Y, Y+dY]$ befindet, ist gerade gegeben durch $w_\infty(Y)dY$. Dies ist der Inhalt der Ergodenhypothese. Wenn diese Ergodenhypothese gültig ist, dann folgt daraus die Äquivalenz von Zeitmittel und Ensemblemittel.

b) Die zur Autokorrelationsfunktion $C_{YY}(t) = \langle Y(\tau)Y(\tau+t)\rangle$ gehörende Fouriertransformation $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ wird als spektrale Leistungsdichte bezeichnet. Zeigen Sie, dass der Zusammenhang zwischen spektraler Leistungsdichte $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ und den harmonischen Komponenten des stochastischen Prozesses $Y(t)$ durch

$$\tilde{C}_{YY}(\omega) = \lim_{T\to\infty}\frac{|\tilde{Y}_T(\omega)|^2}{T} \qquad \text{mit} \qquad \tilde{Y}_T(\omega) = \int_T Y(t)e^{-i\omega t}dt$$

gegeben ist.

Lösung:

Um die harmonischen Komponenten einer Trajektorie $Y(t)$ zu bestimmen wäre die Fourier-Transformation

$$\tilde{Y}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} Y(t)e^{i\omega t}dt$$

naheliegend. Allerdings divergiert dieses Integral. Um ein konvergentes Integral zu erhalten, kann man die Fourier-Transformation auf die abgeschnittenen Funktion

$$Y_T(t) = \theta(t)\theta(T-t)Y(t)$$

anwenden, wobei die Theta-Funktionen $\theta(t)$ und $\theta(T-t)$ eine „Portion" der Trajektorie mit Länge T „herausschneiden". Die zugehörige Fourier-Transformation

$$\tilde{Y}_T(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} Y_T(t) e^{i\omega t} dt = \int_T Y(t) e^{i\omega t} dt$$

bleibt nun endlich. Um ein Maß für das Gewicht der harmonischen Komponenten zu erhalten, berechnet man das Betragsquadrat

$$\begin{aligned} |\tilde{Y}_T(\omega)|^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Y_T(\tau) Y_T(\tau') e^{i\omega(\tau-\tau')} d\tau d\tau' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} Y_T(\tau) Y_T(\tau+t) d\tau}_{g(t)} \, e^{i\omega t} dt. \end{aligned}$$

Die Hilfsfunktion $g(t)$ lässt sich weiter vereinfachen

$$\begin{aligned} g(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} Y_T(\tau) Y_T(\tau+t) d\tau \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \theta(\tau)\theta(T-\tau) Y(\tau) \theta(\tau+t)\theta(T-\tau-t) Y(\tau+t) d\tau \\ &= \theta(T-|t|) \int_{T-|t|} Y(\tau) Y(\tau+t) d\tau \\ &= (T-|t|)\theta(T-|t|) \langle Y(\tau) Y(\tau+t) \rangle \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Äquivalenz von Zeitmittel und Ensemblemittel verwendet wurde. Die Verbindung zur spektralen Leistungsdichte $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{YY}(\omega) &= \lim_{T\to\infty} \frac{|\tilde{Y}_T(\omega)|^2}{T} \\ &= \lim_{T\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 - \frac{|t|}{T}\right) \theta(T-|t|) \langle Y(\tau) Y(\tau+t) \rangle \, e^{i\omega t} dt \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle Y(\tau) Y(\tau+t) \rangle \, e^{i\omega t} dt. \end{aligned}$$

Dieses Resultat wird als Wiener-Chintschin-Theorem bezeichnet und gilt ganz allgemein für stochastische Prozesse, die sich im Gleichgewicht befinden. Die spektraler Leistungsdichte $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ misst dabei wie stark gewisse Frequenzkomponenten im stochastischen Prozess vorhanden sind. Weißes Rauschen besitzt beispielsweise eine konstante spektraler Leistungsdichte, alle Frequenzkomponenten sind demnach mit gleicher Stärke vorhanden. Ist die Autokorrelationsfunktion $C_{YY}(t)$ bekannt, kann $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ einfach durch Fourier-Transformation berechnet werden.

c) Zeigen Sie, dass zwischen den spektralen Leistungsdichten $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ und $\tilde{C}_{\zeta\zeta}(\omega)$ der folgende Zusammenhang gilt

$$\tilde{C}_{YY}(\omega) = \frac{b^2 \tilde{C}_{\zeta\zeta}(\omega)}{\omega^2 + a^2} = \frac{b^2 \phi(\omega)}{\omega^2 + a^2}.$$

Lösung:

Aus der stochastischen Differentialgleichung

$$\dot{Y}(t) + aY(t) = b\zeta(t)$$

folgt durch Multiplikation mit $e^{i\omega t}$ und anschließender Integration

$$\int_T \dot{Y}(t)e^{i\omega t} + a \int_T Y(t)e^{i\omega t} = b \int_T \zeta(t)e^{i\omega t}.$$

Den ersten Term kann man durch partielle Integration umschrieben in

$$\int_T \dot{Y}(t)e^{i\omega t} = Y(t)e^{i\omega t}\Big|_{t_1}^{t_2} - i\omega \int_T Y(t)e^{i\omega t}.$$

Für sehr große T kann der Randterm vernachlässigt werden, da die beiden anderen Terme im Fall $T \to \infty$ geben unendlich gehen, der Randterm aber endlich bleibt. Daraus folgt weiter

$$-i\omega \tilde{Y}_T(\omega) + a\tilde{Y}_T(\omega) = b\tilde{\zeta}_T(\omega)$$
$$(\omega^2 + a^2)|\tilde{Y}_T(\omega)|^2 = b^2|\tilde{\zeta}_T(\omega)|^2.$$

Unter Verwendung des Wiener-Chintschin-Theorems lassen sich die spektralen Leistungsdichten $\tilde{C}_{\zeta\zeta}(\omega)$ und $\tilde{C}_{YY}(\omega)$ in Beziehung bringen

$$\tilde{C}_{YY}(\omega) = \lim_{T\to\infty} \frac{|\tilde{Y}_T(\omega)|^2}{T} = \frac{b^2}{\omega^2 + a^2} \lim_{T\to\infty} \frac{|\tilde{\zeta}_T(\omega)|^2}{T} = \frac{b^2}{\omega^2 + a^2} \tilde{C}_{\zeta\zeta}(\omega).$$

d) Berechnen Sie $C_{YY}(t)$ im Fall $\phi(t) = \delta(t)$ durch Rücktransformation von $\tilde{C}_{YY}(\omega)$.

Lösung:

Es gilt im Fall $\zeta(t) = \xi(t)$ mit $\langle \xi(t)\xi(t')\rangle = \delta(t - t')$ für die spektrale Leistungsdichte

$$\tilde{C}_{\xi\xi}(\omega) = \int \langle \xi(\tau)\xi(\tau + t)\rangle e^{i\omega\tau} d\tau = 1.$$

Daraus folgt

$$\tilde{C}_{YY}(\omega) = \frac{b^2}{\omega^2 + a^2}$$

und weiters durch Rücktransformation

$$C_{YY}(t) = \frac{1}{2\pi} \int \tilde{C}_{YY}(\omega)e^{-i\omega\tau} d\omega = \frac{b^2}{2a} e^{-a|t|}.$$