

Am 17.07. Keine VL

↑ letzter Tag Semester

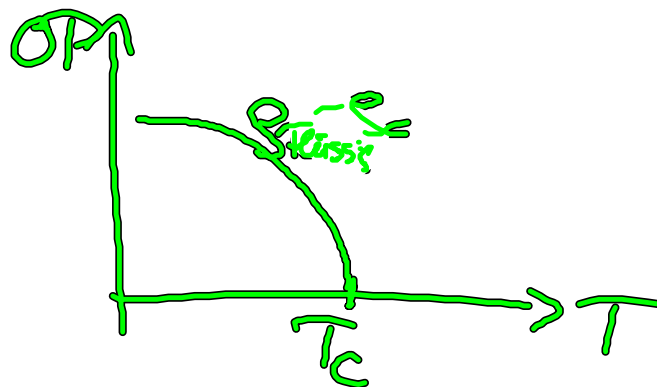
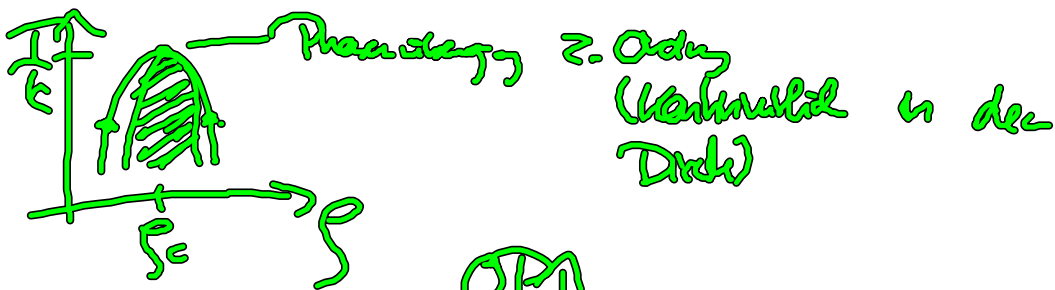
I.15. Allgemeine Modelle für die Dynamik von Ordnungparametern

bisher behandelt: Dynamik der Erntedaten wahlständig
 $\rho(\epsilon, \epsilon)$

→ DDT
→ Coleman-Modell-Theorie

Allgemeine
Skizze:

$\rho(\epsilon, \epsilon)$ ist ein spezieller Ordnungparameter (OP),
nämlich der OP beim Phasenübergang 2. Ordnung und Fließigkeit.



$T < T_c$: Dichtesystem:
 $\rho_{\text{Skizze}} \neq \rho_{\text{Gas}}$

Generelle Eigenschaft von OP

Der OP beschreibt die unterschiedl. Zer. Zust. einer

Waktu. Beispiels

- Magnetismus (Übergang paramagn. \leftrightarrow ferromagn.)

$$\underline{M} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle$$

Spin-Variab.

- Polarisation (Übergang paraelektr. \leftrightarrow ferroelektr.)

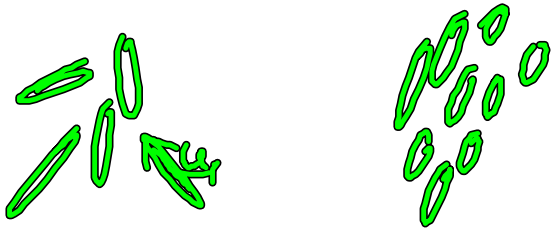


$$\underline{P} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N p_i \right\rangle$$

mikroskop. permanente Dipolmom.

- Kissingglanzball

isotrop - normal (1. Ordnung)



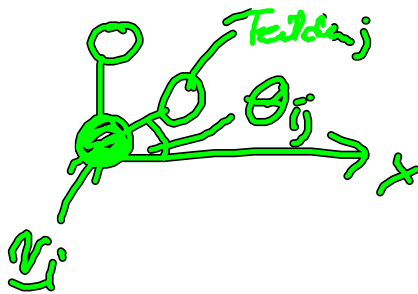
$$S = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \left(\frac{3}{2} (\hat{G}_i \cdot \hat{d})^2 - \frac{1}{2} \right) \right\rangle$$

Min-Saye-
Param

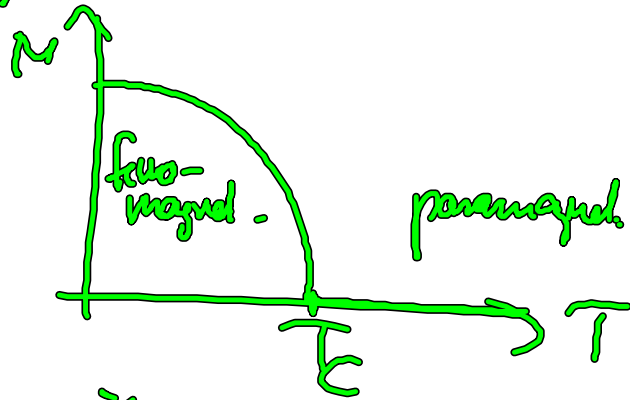
Man sieht:

Die OP's sind (meist) Entfernungsgrößen

(Annahme: z.B. Ford-OP dem Charge Flusskosten - Kosten)
 $\Psi = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{1}{z_i} \sum_{\text{Nachbarn}} e^{i\theta_{ij}} \right\rangle$ mit



Ein gute OP ist Null in der ungedrehten Phase und ungleich Null in der gedrehten Phase



Wie sieht die Dynamik solcher OP's im Nichtgleichgewicht aus?

- Mehrfachwert
- Relaxationsdynamik dient zur Phasierung
 - Dynamik in Anwesenheit einer treibenden Kraft

→ Benutze „mesoskopische Gleichungen“

(Klein durch Platten zu einer mikroskopischen Bewegungsgleichung)

Erinnere: die DDT hat wie „mikroskopisch“ auf Band der Layer bez. Je klar Platten-Gl. hergestellt!

Generelle Überlegungen bei der Aufstellung mesoskopischer Gerichte

- Ist der OP eine Erhaltungsgröße?
- Welche Symmetrien gibt es in dem System
- Gibt es Randkorrekturen in der mesoskop.
Bewegungsgleichung?

→ Aufstellung geeigneter
Gleichungen

Zu dieser Frage haben Hohenberg und
Halperin 1977 eine Klassifikation
von Bewegungsgleichungen für OP's vorgeschlagen

P.C. Hohenberg, B.I. Halperin

Rev. Mod. Phys. 49, 435 (1977)

'Theory of dynamic critical phenomena'

Neuere Diskussion

R.C. Desai, R. Kapriel

"Self-organized and self-assembled structures"
(Cambridge, 2003)

Herv: Diskussion von 2 Modellen

das OP sei in folgender $\Phi = \Phi(\underline{r}, \underline{\epsilon})$
(siehe OP)

Modell A

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -M \frac{\delta F[\Phi]}{\delta \Phi} + \eta(\underline{r}, \underline{\epsilon})$$

Mobilitäts-
koeffizient

Variationsableitung
einer Free-Energy-
Funktion

Rauschen

$F[\Phi]$ hat Ginzburg-Landau Form
also $F[\Phi] = \int d\underline{r} (f(\Phi(\underline{r}, \underline{\epsilon})) + (\nabla \Phi)^2)$

$f(\Phi)$: Potential
in Φ

und

$$\langle \eta(\underline{r}, \underline{\epsilon}) \eta(\underline{r}', \underline{\epsilon}') \rangle$$

$$= \Gamma \delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta(\underline{\epsilon} - \underline{\epsilon}')$$

Beacht:

Im Unterschied zu den bisher betrachteten Gleichungen (DDF, Ginzburg-Landau) fehlt der Dragnet-Term

\Rightarrow man kann die G. nicht als Kontinuitätsgl. schreiben \Rightarrow der OP ist nicht erhalten!

Und: Es gibt ein Paradoxon

Zum Paradoxon
Annahme:

Auch auf mesoskopischer Ebene gibt es ein Fluktuations-Dissipationstheorem (FDT)

Betrachte dazu Modell A mit aut. unabhängigen ϕ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\partial F}{\partial \phi} + \eta(\epsilon)$$

einfache partielle Ableitung, da ϕ konst.

$$\text{mit } \langle \eta(\epsilon) \eta(\epsilon') \rangle = \Gamma \delta(\epsilon - \epsilon')$$

Frage: Konflikt zum Gleichgewicht?

Idee: Im Gleichgewicht soll Φ
die Wahrscheinlichkeitsdichte

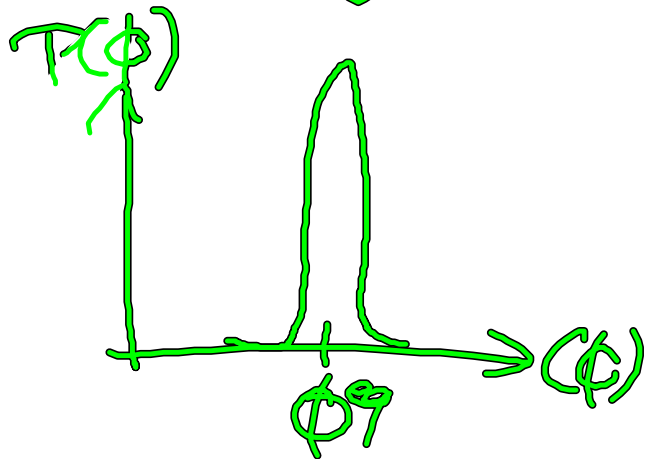
$$P^{\text{eq}}(\Phi) = e^{-\beta F(\Phi)}$$

genügend !!

$$\frac{\partial F}{\partial \Phi} = 0 \rightarrow \Phi^{\text{eq}}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi^2} > 0$$

(Minimum)



Betrachte Modell A als generalisiert
Lagrange-Gl. und konstruiere die
zugehörige Fokker-Planck-Gl.

Kramers-Hoyal-Konflikt.

$$k^{(1)} = -M \frac{\partial F}{\partial \phi}$$

$$k^{(0)} = \frac{\pi}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial \epsilon} P(\phi, \epsilon) = \left(-\frac{\partial}{\partial \phi} \left(\overbrace{-M \frac{\partial F}{\partial \phi}}^{k^{(0)}} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi^2} \frac{\pi}{2} \right) P(\phi, \epsilon)$$

Leitungs

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} P(\phi) = -\frac{\partial}{\partial \phi} J_{\phi}$$

$$\text{mit } J_{\phi} = \left(-M \frac{\partial F}{\partial \phi} P(\phi, \epsilon) - \frac{\pi}{2} \frac{\partial}{\partial \phi} P(\phi, \epsilon) \right) \quad \text{Wohlerd. strom!}$$

gleichzeit: $J_{\phi} = 0$

$$\frac{\pi}{2} \frac{\partial}{\partial \phi} P^{\text{eq}}(\phi) = -M \frac{\partial F}{\partial \phi} P^{\text{eq}}(0)$$

$$\rightarrow P^{\text{eq}}(\phi) = e^{-\left[\text{const} + \frac{2}{\Gamma} \int_{\phi_0}^{\phi} d\phi' \left(-M \frac{\partial F}{\partial \phi'} \right) \right]}$$

S. Kap. I. 12.
Mikroreversibilität)

$$P^{\text{eq}}(\phi) \sim e^{-\frac{2M}{\Gamma} F(\phi)} \stackrel{!}{=} e^{-\beta F(\phi)} \Rightarrow \boxed{\Gamma \stackrel{!}{=} 2Mk_B T}$$

FDT

Daraus folgt (auch im inhomogenen Fall !)

$$\langle \eta(\underline{r}, t) \eta(\underline{r}', t') \rangle = 2Mk_B T \frac{d(\epsilon - \epsilon')}{d(\epsilon - \epsilon')}$$

$$\frac{\partial \phi(\underline{r}, t)}{\partial t} = -M \frac{\partial F}{\partial \phi} + \eta(\underline{r}, t)$$

Anwendung von Modell A

~~Symmetrie~~

- Möglichste Lyapunov \rightarrow später
in der letzten ein
Phasenübergang z. Ordnung

- bestimmte chem. Reaktionen, Reaktions-Diffusions-Modell

Modell B

hier bleibt der OP erhalten

Ansatz

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$$

Punkt

$$\text{mit } \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -M \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi} + \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \phi} + \underbrace{G(\mathbf{r}, t)}_{\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}$$

Punkt

Mit $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0$ und $\Phi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}, t)$
ergibt sich gerade die Ginzburg-Landau-Theorie!

Anwendung von Modell A

Dynamik der Magnetisierung einer Ferromagneten
Magnetisierung $M(\mathbf{r}, t)$ sei skalar

Ginzburg-Landau-Funktional der freien Energie

$$F[M] = \int d\mathbf{r} \left(\frac{a}{2} (T - T_c) M(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{b}{4} (M(\mathbf{r}, t))^4 + \frac{c}{2} (\nabla M(\mathbf{r}, t))^2 - M(\mathbf{r}, t) h(\mathbf{r}, t) \right)$$

Bem:

~~Kenn~~ $F[\phi]$ enthält keinen Term 3. Ordnung ^{in M} ,
da wir eine Phasenübergang zweite
Ordnung beschreiben wollen!

Die wahrscheinlichste Konfiguration ($\stackrel{!}{=} \text{gleichgewichtige Konfiguration}$)
erhält sich aus der Bedingung

$$\frac{\delta F[M]}{\delta M} \stackrel{!}{=} 0$$

homogener Fall:
($\nabla M = 0$)
 $h(\mathbf{r}) = h$

$$a(T - T_c)M + bM^3 - h = 0 \Rightarrow M^2$$

Inhomogener Fall

$$F[M] = \int d\underline{r} \left(\frac{a}{2} (T - T_c) (M(\underline{r}))^2 + \frac{b}{4} (M(\underline{r}))^4 + \frac{c}{2} (\nabla M(\underline{r}))^2 - h(\underline{r}) M(\underline{r}) \right)$$

$$\frac{\delta F}{\delta M(\underline{r}')} \quad ?$$

$$\boxed{g' = \frac{\partial g}{\partial M}}$$

Für die Potenzen von M in $F[M]$ benutzt man

$$\frac{\delta g(M(\underline{r}))}{\delta M(\underline{r}')} \underset{\text{Kettenregel}}{=} g'(M(\underline{r})) \frac{\delta M(\underline{r})}{\delta M(\underline{r}')} = g' d(\underline{r} - \underline{r}')$$

$$\Rightarrow \frac{\delta F}{\delta M(\underline{r}')} = \int d\underline{r} \left[\frac{a}{2} (T - T_c) M(\underline{r}) \frac{\delta M(\underline{r})}{\delta M(\underline{r}')} + b (M(\underline{r}))^3 \frac{\delta M(\underline{r})}{\delta M(\underline{r}')} - h(\underline{r}) \frac{\delta M(\underline{r})}{\delta M(\underline{r}')} \right]$$

$$+ b (M(\underline{r}))^3 d(\underline{r} - \underline{r}') - h(\underline{r}) d(\underline{r} - \underline{r}') \Big]$$

$$+ C \frac{1}{\delta M(\underline{r})} \int d\underline{r} \nabla M(\underline{r}) \cdot \delta \nabla M(\underline{r})$$

Zum letzten Term: nehme an $\delta \nabla M(\underline{r}) = \nabla \delta M(\underline{r})$

$$\frac{\delta F[M]}{\delta M(\underline{r}')} = a(T - T_c) M(\underline{r}') + b(M(\underline{r}'))^3 - h(\underline{r}') + C \frac{1}{\delta M(\underline{r}')} \int d\underline{r} \nabla M(\underline{r}) \nabla \delta M(\underline{r})$$

$$+ C \frac{1}{\delta M(\underline{r}')} \int d\underline{r} \nabla M(\underline{r}) \nabla \delta M(\underline{r})$$

benutze:

$$\nabla \cdot (\underline{A} \cdot \varphi) = \nabla \cdot \underline{A} \cdot \varphi + \underline{A} \cdot \nabla \varphi$$

\uparrow \uparrow
 Vektorfeld \leftarrow Skalares Feld
 Feld

$$\text{hier: } \underline{A} = \nabla M(\underline{r}) \\ \varphi = \delta M(\underline{r})$$

$$\Rightarrow \nabla M(\underline{r}) \nabla \delta M(\underline{r})$$

$$= \nabla \cdot (\nabla M(\underline{r}) \cdot \delta M(\underline{r}))$$

$$- \delta M(\underline{r}) \Delta M(\underline{r})$$

benutzte aufgaben:

$$\int_{d\underline{r}} \nabla \cdot (\nabla M(\underline{r}) \cdot \delta M(\underline{r}))$$

Gauß'sche Integralsatz $\rightarrow \int_{F_V} (d\underline{F} \cdot \nabla M(\underline{r}) \cdot \delta M(\underline{r})) = 0$

$\delta M(\underline{r}) \rightarrow \infty$
auf dem Rand des Systems!

$$\Rightarrow C \frac{1}{\delta M(\underline{r})} \int_{d\underline{r}} \nabla M(\underline{r}) \cdot \nabla \delta M(\underline{r})$$

$$= -C \frac{1}{\delta M(\underline{r})} \int_{d\underline{r}} \delta M(\underline{r}) \Delta M(\underline{r}) \quad \text{Laplace}$$

$$= -C \int_{d\underline{r}} \frac{\delta M(\underline{r})}{\delta M(\underline{r})} \Delta M(\underline{r})$$

$$= -C \Delta M(\underline{r})$$

$$\frac{\delta F[H]}{\delta H(x)} \stackrel{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow a(T-T_c) H(x) + b (H(x))^3$$

$$- c \Delta H(x) - h(x) = 0$$