Statistische Physik II

VL : Mo $10^{15} - 11^{45}$ EW 202
Do $14^{15} - 15^{45}$ EW 202

UE : Helge Neitsch
Mi 10-12 EW 229

11 ECTS Leistungspunkte (4 + 2 SWS)
oder als Wahlpflichtfach:
zusammen mit dem Seminar „Statistische Physik komplexer Fluide"
Mo 14-16
⟹ insgesamt 8 SWS / 12 ECTS

Informationen zur VL im Internet

~~http~~ ITP → Lehre
→ Lehrveranstaltungen

Inhalte + Fokus der VL

bisher in der statistische Physik (I)
→ Systeme im thermodynamischen / statistischen Gleichgewicht

$$\frac{\partial}{\partial t}\, \rho(\Gamma, t) = 0$$

klassische Phasenraumdichte

$$\Gamma = (\{\underline{r}_N\}, \{p_N\})$$

Parameter von $\rho(\Gamma)$:

makroskop. Variablen, z.B. T, V, N

$\longrightarrow$ kanon. Verteilung (Ensemble)

$$\rho(\Gamma) = \frac{e^{-\beta H(\Gamma)}}{Z} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

daraus: Mittelwerte: $\langle A \rangle = \int d\Gamma\, \rho(\Gamma)\, A(\Gamma)$

Ensemblemittelwert

Anschluss an die Thermodynamik: $F = -k_B T \ln Z$

Jetzt:

Konzentration auf Systeme

im Nichtgleichgewicht

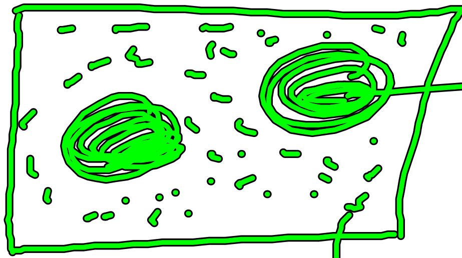
$\Rightarrow \rho(\Gamma, t)$ ist zeitabhängig

z.B. „getriebene" Systeme:
Zeitabhängigkeit (Dynamik) wird erzwungen durch äußere Kräfte

Außerdem:
zeitliche Fluktuationen des Systems im Gleichgewicht)
(↳ die aus der mikroskop. Dynamik resultieren)

Dabei:
Fokus auf Systeme der weichen kondensierten Materie

klassisch beschreibbar
z.B. - Flüssigkeiten (atomare, molekulare Fluide)
- Kolloidale Systeme



Brown'sche Bewegung

- Polymere
- Flüssigkristalle, biologische Membranen ....

- "weich" ≙ verformbar / elastisch

generell:

Systeme der weichen Materie reagieren sehr sensitiv auf äußere Kräfte

- „Kondensiert": Wechselwirkungen zw. den Teilchen sind wichtig
  → Phasenübergänge etc.

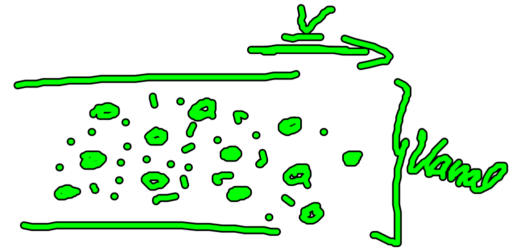
<u>Situationen von besonderem Interesse in dieser VL</u>

- <u>„getriebene" weiche Materie</u>

Beispiele:

– Strömungssituationen

z.B. Scherströmung



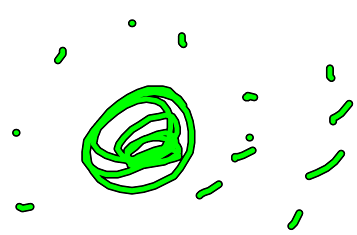
Mikro- und Nanofluidik
(Manipulation von Flüssigkeiten durch Nanostrukturen)

– Zeitabhängige Felder

z.B. magnet. Fluid in rotierenden Magnetfeldern

– Fluktuationen „um das Gleichgewicht herum"

Klassisches Beispiel: Bewegung eines Kolloidteilchens im Lösungsmittel

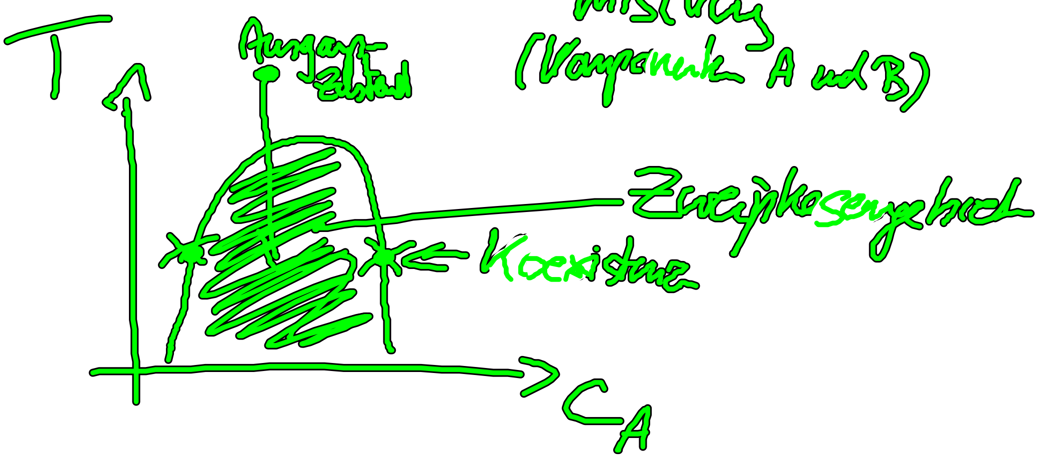


zufällige Stöße mit Lösungsmittelteilchen

→ Brown'sche Bewegung

- Relaxationsphänomene: Endzustand ist ein Gleichgewichtszustand

z.B. Entmischungsübergang einer binären Flüssigkeitsmischung (Komponenten A und B)



Frage: Was passiert bei einem "Quench" (sehr schnell) in das Zweiphasengebiet?
„spinodale Entmischung"

Theoret. Konzepte und Methoden, um solche Situationen zu beschreiben?

1) <u>Theorie der Brown'schen Bewegung</u>

- Stochast. Prozesse

(da z.B. zufällige Stöße mit Lösungsmittelteilchen → stochast. Kräfte)

– Fokker-Planck-Gleichung

→ Bewegungsgleichung für die zeitabhängige Vielteilchen-Verteilungsfunktion!
(involviert alle Koordinaten und Geschw.)

– Langevin-Gleichung

Effektive BWGL für die Bewegung eines Teilchens im Bad der anderen Teilchen bzw. des Lösungsmittels

Beachte: In all diese BWGL können auch äußere, treibende Kräfte (z.B. Scherung) aufgenommen werden

Wegbereiter:

Brown: ca. 1827
Einstein: ca. 1905
Fokker: ca. 1914, Planck ca. 1917

2) Theorie der linearen Antwort

(Linear-Response theory)

→ behandelt (zeitl.) Fluktuationen im Gleichgewicht

„Brücke" zum Nichtgleichgewicht durch sogenannten Green-Kubo-Relationen

$$D \sim \int_0^\infty dt \, \langle \underline{v}(t) \cdot \underline{v}(0) \rangle$$

Diffusionskoeff. (allg.: Transportkoeff.)

Geschwindigkeits-Autokorrelationsfkt. im Gleichgewicht

Beachte:

Linear-Response Ansatz funktioniert nur dicht am Gleichgewicht

(d.h. kleine treibende Kräfte)

Wegbereiter: Kubo ca. 1957

Mori ca. 1965

3) Dynamische Dichtefunktionaltheorie

„Feldtheorie" für die ~~Ze~~ zeitabhängige Einteilchendichte in einem Vielteilchensystem

→ Erweiterung der statischen, klassischen Dichtefunktionaltheorie:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\underline{r},t) = D \, \nabla \underbrace{\left(\rho(\underline{r},t) \nabla \frac{\delta F}{\delta \rho} \right)}_{j}$$

D: Diffusionskoeff.

j: effektiver Strom

$F[\rho]$: Freie Energie

Sehr ~~neue~~ moderne Theorie:

Tarazona ca 1990

4) Computersimulationsmethoden

- Brownian Dynamics
- Dissipative Particle Dynamics