

# Anwendung der Dynamische Dichtefunktionaltheorie

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\rho(\mathbf{r}, t)) + \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho}$$

(Funktional der  
Dichtefunktionaltheorie)

$$\begin{aligned} & F[\rho] = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \left( \frac{1}{2} m v^2(\mathbf{r}) - \mu \right) \quad \text{ideal} \\ & + F^{\text{ex}}[\rho] \quad \text{Wechselwirkung} \\ & + \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \Phi^{\text{ext}}(\mathbf{r}) \quad \text{externer Potential} \end{aligned}$$

Wichtig:

instabile Dichtefunktionaltheorie in Zusammenhang mit "spinodale Entmischung"

Problemskizze:

Betrachte System mit Phasenseparation.  
(Phasenübergang 1. Ordnung)

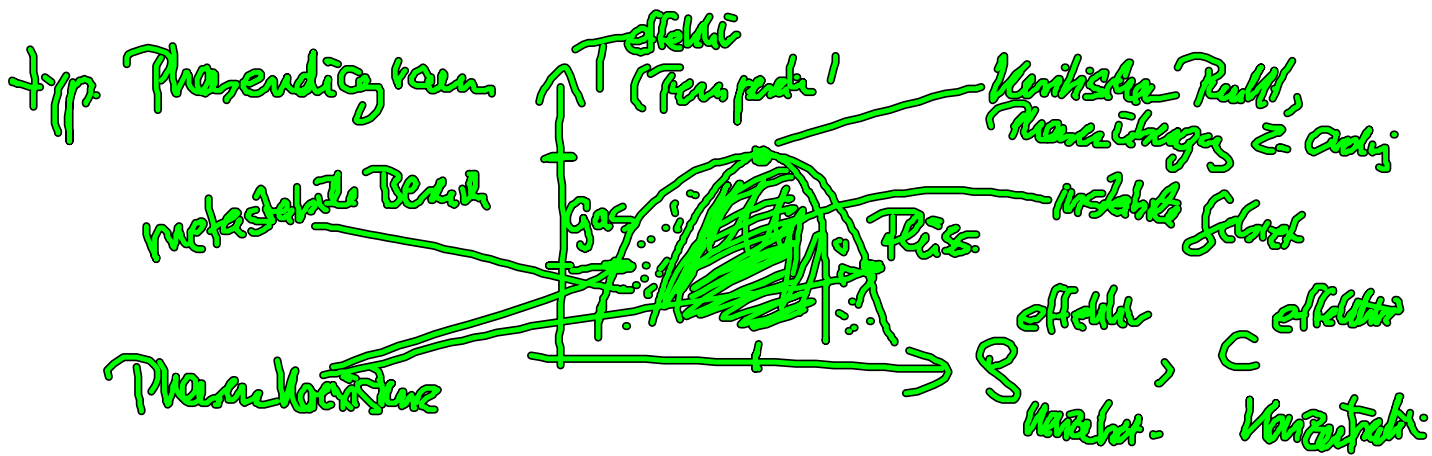
typ. Beispiel: ..

Phasenübergang Gas  $\leftrightarrow$  Flüssigkeit (Kondensation)

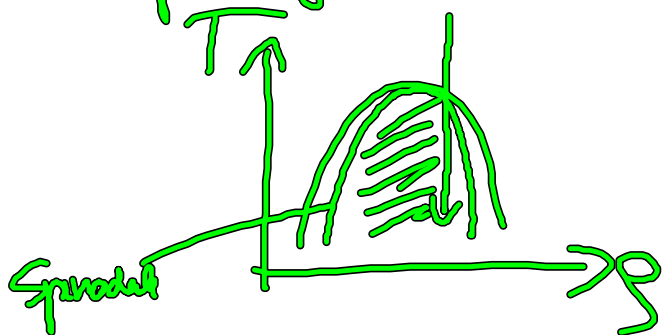
"

A-reich  $\leftrightarrow$  B-reich

(binäre Mischung) (Einhoch)



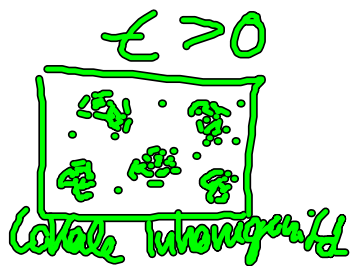
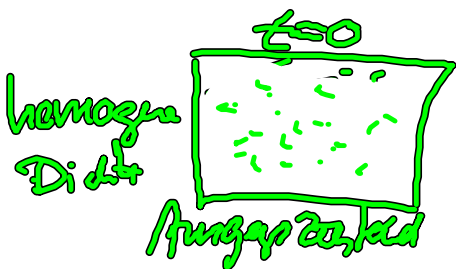
Reaktion nur "Quench" in das Zweiphasengebiet



Sprunghaftes (schnelles) Abkühlen auf einer Zeitskala kleiner als die typ. Relaxationszeit

⇒ Nichtgleichgewichtssituation!

Die im Ausgangszustand homogene Dichte wird inhomogen !!



Es nun:

- Beschreibung der Erzeugung kollektiver  
Dichte - Kohärenzfaktoren

- (nicht: Beschreibung Laserkollektive)

Theoret. Beschreibung via Dyn. Dichtekontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left( \rho(\mathbf{r}, t) \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)} \right) \quad (*)$$

Setze in  $F[\rho]$  das externe Potential  $\phi^{\text{ext}} = 0$

$$\Rightarrow \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)} = \frac{1}{\rho(\mathbf{r}, t)} \nabla \rho(\mathbf{r}, t) \quad \text{Aus dem idealen Gasgesetz}$$

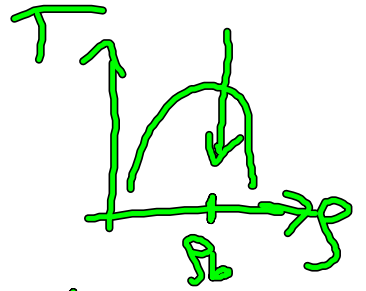
$$+ \nabla \frac{\delta F^{\text{ex}}}{\delta \rho(\mathbf{r}, t)}$$

$$- c^{\text{ex}}(\mathbf{r}, t)$$

Erstter - direkter Kondensationskern

Wende  $\otimes$  nicht auf die Dichte an sich,  
sondern auf eine Dichtekontinuität:

$$\hat{\rho}(r, t) = \rho(r, t) - \rho_b \text{ an}$$



Idee:  $\rho_b \hat{=}$  Dichte des homogenen Fluids, aus dem  
heraus "ge-quants" wurde (also  $\rho_b = \text{const}$ )

$\rho(r, t)$ : exak, inhomogene  
Verteilung, mit  
Zerplatzgebiet

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \frac{\partial \hat{\rho}(r, t)}{\partial t} &= D \nabla^2 \hat{\rho}(r, t) \\ &\quad - D \nabla \cdot \underbrace{(\rho_b + \rho(r, t))}_{\rho(r, t)} \nabla c^{(A)}(r, t) \end{aligned}$$

$$= D \nabla^2 \hat{\rho}(r, t)$$

$$- D \rho_b \nabla^2 c^{(A)}(r, t)$$

$$- D \nabla \hat{\rho}(r, t) \nabla c^{(A)}(r, t)$$

$\otimes \otimes$

Frage: Was ist  $c^{(A)}(r, t)$ ?

Näherung: Entwickle  $c^{(1)}$  um seinen Wert bei  $g(z,t) = \beta_b = \text{const}$

Ans.

$$c^{(1)}(z,t) \approx c^{(1)}(z, \beta_b) + \int_{\beta_b}^{\hat{\beta}(z,t)} \frac{dc^{(1)}(z, \beta)}{d\beta(z)} (\hat{\beta}(z,t) - \beta_b) + O(\hat{\beta}^2)$$

Zum 1. Term: (0.te Ordnung-Term)

- $c^{(1)}(z, \beta_b)$  ist nicht nur zeitlich, sondern auch räumlich konstant!

Begründung (klassische Maxwell-Gleichungen im Feldgleichung gilt)

$$\int \vec{\rho}_{\text{eq}}(z) = e + \beta \mu - \beta \phi^{\text{ext}}(z) + \frac{\partial F^{\text{ext}}(\beta)}{\partial \beta(z)} \frac{1}{c^4(z, \beta)}$$

hier:  $\phi^{\text{ext}} = 0$ ,  $\rho_{\text{eq}}(\underline{x}) = \text{const} \Rightarrow C^{(0)}$  ist dabei  
minimale Kosten!

o Zum zweiten Teil.

$$\frac{\delta C^{(0)}(\underline{x})}{\delta \rho(\underline{x}')} = C^{(0)}(\underline{x}, \underline{x}', [\rho])$$

Zweitorden-  
direkte Korrelationsfunktion

hier-  
von Interesse:

$$\sim \frac{\delta^2 T^{\text{ex}}[\rho]}{\delta \rho(\underline{x}) \delta \rho(\underline{x}')}$$

$$C^{(2)}(\underline{x}, \underline{x}', \rho_0) \\ = C^{(2)}(\underline{x} - \underline{x}', \rho_0) \text{ im homogenen System!}$$

insgesamt:

$$C^{(0)}(\underline{x}, \underline{x}') \approx C^{(0)}(\rho_0)$$

$$+ \int dx' c^{(2)}(x-x', \beta_0) \hat{\psi}(x', \epsilon) + O(\beta^2)$$

Gleichgewichts-  
größe

+  $O(\beta^2)$   
vernachlässigbar

Einsetzen in (\*\*)

$$\frac{\partial \hat{\psi}(x, \epsilon)}{\partial \epsilon} = D \nabla^2 \hat{\psi}(x, \epsilon)$$

Linearisiert man  
in  $\hat{\psi}$  !!

~~$$= D \beta_0 \nabla^2 c^{(2)}(\beta_0)$$~~

~~$$- D \beta_0 \nabla^2 \int dx' c^{(2)}(x-x', \beta_0) \hat{\psi}(x', \epsilon)$$~~

~~$$- D \nabla^2 \hat{\psi}(x, \epsilon) \nabla^2 c^{(2)}(\beta_0)$$~~

~~$$- D \nabla^2 \hat{\psi}(x, \epsilon) \nabla^2 \int dx' c^{(2)}(x-x', \beta_0) \hat{\psi}(x', \epsilon)$$~~

produkt in  $\hat{\psi}$  !!

benutzt  
 $\nabla^2 c^{(2)}(\beta_0) = 0$

$$\frac{\partial \hat{\psi}(x, \epsilon)}{\partial \epsilon} = D \nabla^2 \hat{\psi}(x, \epsilon)$$

$$- D \beta_0 \nabla^2 \int dx' c^{(2)}(x-x', \beta_0) \hat{\psi}(x', \epsilon)$$

Linearisiert Gleichung für die  
zeitl. Entwicklung der Dichtefluktuation:

Vereinfachung durch Fouriertransformation:

$$\tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{k} e^{-i\underline{k} \cdot \underline{x}} \overbrace{\tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon)}^{\text{Fourier-Transform}}$$

$$\tilde{\epsilon}^0(\underline{k} - \underline{k}'; \varrho_b) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\underline{k}' e^{-i\underline{k}' \cdot (\underline{x} - \underline{x}')} \tilde{\epsilon}^0(\underline{k}')$$

Einsetzen und Benutzen des  
Parseval-Theorems beim Integral

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial \epsilon} \tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon) = D(-k^2 \tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon)) + D \varrho_b k^2 \tilde{\epsilon}^0(\underline{k}) \tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon)$$

Dies ist eine <sup>(homogen)</sup> lineare Differentialgleichung in der Zeit

Lösung:  $\tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon) = \tilde{\varphi}(\underline{k}, 0) e^{R(\underline{k}) \epsilon}$

mit  $R(\underline{k}) = -D k^2 (1 - \varrho_b \tilde{\epsilon}^0(\underline{k}))$

Interpretation des Ergebnisses für  $\tilde{\varphi}(\underline{k}, \epsilon)$ :



•  $\Re(\lambda) < 0$

→ Exponent verschwindet mit  $t$

→ <sup>Inhomogen</sup> Di-Differentialgleichung zerfallen mit der Zeit

(Erinnerung:  $\tilde{y}(k, t)$ ;  $\bar{y}(k, t)$ )

beschreiben Abweichungen  
von homogenem Zustand!!

→ charakteristisch kein stabiles System!

•  $\Re(\lambda) > 0$

⇒ Inhomogene Differentialgleichung wachsen  
exponentiell

⇒ Instabilität!

charakterist. Größe:  $\omega = \frac{\Im(\lambda)}{\Re(\lambda)}$

Wurde suche also nach Vorzeichenwechsel in  
 $\Re(\lambda)$  !!

Beachte: Die in  $\Re(\lambda)$  verbleibende Funktion  
 $1 - S_b \bar{C}^*(s)$  entspricht dem  
inversen Strukturtransfer!

es gilt:

Ensemble - Mittelwert in  
geplanten Ensemble

$$S(\underline{k}) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\underline{k} \cdot (\underline{r}_i - \underline{r}_j)} \right\rangle$$

statist. Definition des statischen  
Strukturfaktors

im Rahmen der Mass. Dichtefunktionaltheorie findet man

$$S(\underline{k}) \approx \frac{1}{1 - g_b \bar{c}^{(2)}(\underline{k})}$$

Damit folgt

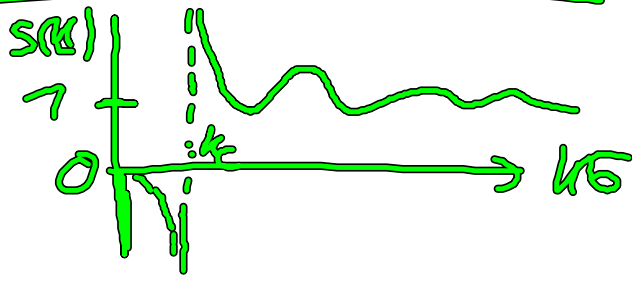
$$\mathcal{R}(\underline{k}) = -D k^2 \frac{1}{S(\underline{k})}$$

Aufbehalt des instabilen Zweiphasenlicht

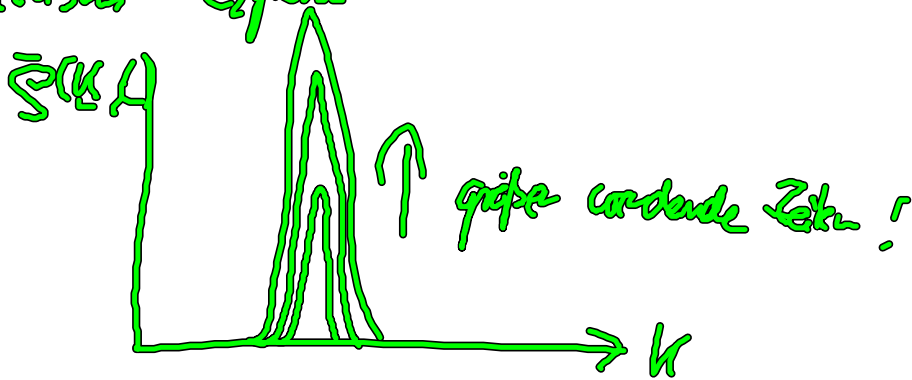
gilt immer  $S(\underline{k}) > 0 \Rightarrow \mathcal{R}(\underline{k}) < 0$



Idee für Verlauf im instabilen Gebiet



⇒ Dichtefluktuation mit  $k = |k_1| < k_2$   
wachsen exponentiell an



Beachte:

Dieses Verhalten wurde aus einer linearisierten Steady  
Quanta

— beschreibt nur das Antipositive der  
periodische Schwingung

Zusammenhang mit Cole-Hillel-Theorie

(1959)

# Traditioneller Weg zur spinorale Erbinde

Kontinuitätsgleichung

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

Ansatz für den Strom.

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -M \nabla \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho}$$

wobei  $M$ : Magnetisierbarkeit

$$F[\rho] = \int d\mathbf{r} \left( f_0(\rho) + \frac{k}{2} |\nabla \rho(\mathbf{r}, t)|^2 \right)$$

freie Energie

Polynom  
in  $\rho$

$k > 0$   
elastische Konstante

Ginzburg-Landau - Ansatz für  $F$

(kann hergeleitet werden aus mikroskopischen Ansatz für  $F[\rho]$  im Rahmen der klass DFT)

Vergleich mit dem DFT

Calculation

$$Dg(k, \epsilon) \longrightarrow M$$

$$\nabla \frac{dF[\xi]}{d\xi} \longrightarrow \nabla \frac{dF[\xi]}{d\xi}$$

mit  $F$  "mikroskopische"  
Funktion

mit  $F$  : Gütefunktions-Land