

- Organisatorisches

---

## 1. Einführung

**Fazit** der LV *Nichtlineare Dynamik und Musterbildung* WS 17/18:

Die spontane Strukturbildung in makroskopischen Systemen ist Ergebnis von Selbstorganisationsprozessen fernab vom thermodynamischen Gleichgewicht (offene, gepumpte Systeme). Sie wird durch nichtlineare Gleichungen für makroskopische Größen (Ordnungsparameter) beschrieben. Typisch ist kooperatives (kollektives) Verhalten der mikroskopischen Bausteine des betrachteten Systems (Atome, Moleküle, *self-propelled particles*, Passanten, ...) auf selektierten makroskopischen Längen- und Zeitskalen.

### 1.1 Zustand physikalischer Systeme

In den Teildisziplinen der Physik wird der Zustand eines physikalischen Systems unterschiedlich definiert.

- Mechanik:

Hamilton-Funktion  $H(p, q, t)$ , abhängig von (verallgemeinerten) Koordinaten und Impulsen aller Teilchen. Aus den Hamilton'schen Gleichungen oder der Hamilton-Jakobi-Gleichung werden die Bahnkurven im Phasenraum bestimmt. Das klappt z.B. für wenige wechselwirkende Punktmassen in äußeren Feldern.

- Elektrodynamik: Zustand durch  $\underline{E}(\underline{r}, t)$ ,  $\underline{B}(\underline{r}, t)$  aus den Maxwell'schen Gleichungen; i.a. wenige Punktladungen.

- Thermodynamik

Im thermodynamischen Gleichgewicht (TDG) wird der Zustand durch makroskopische Größen wie Druck, Temperatur, Entropie usw. bestimmt. Alle thermodynamischen Aussagen sind mathematische Konsequenzen der Hauptsätze, die unabhängig vom mikroskopischen Aufbau der Systeme gelten.

- („Ein-Teilchen“) Quantenmechanik: Zustandsvektor Hilbert-Raum  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ,  $i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\psi\rangle$ .

Ortsdarstellung:

$\psi(\underline{r}, t) \cdot \psi^*(\underline{r}, t)$  - Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte in  $d^3r$  und  $dt \rightarrow$  statistische Interpretation der Wellenfunktion. Der quantenmechanische Erwartungswert für eine Observable  $F(\underline{p}, \underline{q}, t)$  ergibt sich aus  $\langle F(\underline{p}, \underline{q}, t) \rangle = \int d^3r \psi^*(\underline{r}, t) F(\underline{p}, \underline{q}, t) \psi(\underline{r}, t)$ .

- Statistische Physik / Statistische Mechanik:

Viele wechselwirkende (i.a.) Teilchen: Atome, Moleküle, Autos (Verkehr), Menschen (Panik), aktive Teilchen, vernetzte Neuronen, ... .

- Statistische Thermodynamik

Die Statistische Physik makroskopischer Systeme im TDG beruht auf den Gibbs'schen Verteilungen (vgl. Kap. 2). Sie liefert eine statistische Deutung der thermodynamischen Größen und eine statistische Begründung der Gibbs'schen Fundamentalgleichung  $dU = T dS - p dV$ , die das thermodynamische Potenzial (die extensive Zustandsgröße) innere Energie  $U(S, V)$  definiert (I. + II. Hauptsatz der Thermodynamik). Daraus lassen sich über Legendre-Transformation weitere thermodynamische Potenziale, wie freie Energie u.a., einführen.

Im Nichtgleichgewicht sind entsprechende Verteilungen i.a. nicht bekannt. Die statistische Begründung der Nichtgleichgewichtsthermodynamik ist Gegenstand aktueller Forschung, vgl. z.B. Tim Herpich, Juzar Thingna, and Massimiliano Esposito, *Collective power: Minimal model for thermodynamics of non-equilibrium phase transitions*, arXiv:1802.00461v1 [cond-mat.stat-mech], 1 Feb 2018.

- diskutiere

### 1) Einteilchen- ↔ Vielteilchen-Systeme

- deterministisches Chaos mit eingeschränkter Vorhersagbarkeit der Bahnkurven
- konservative Systeme: Drei-Körper-Problem, KAM-Theorem
- dissipative Systeme: Lorenz-Attraktor

2) reversible ↔ irreversible Prozesse

- Mikrozustand mit reversibler Dynamik

- Makrozustand beschrieben durch kollektive/makroskopische Größen, die Grundgleichungen beschreiben irreversible Prozesse

3) diskrete Wahrscheinlichkeiten und Entropie

H. Schulz, Statistische Physik beruhend auf Quantentheorie, Vorwort: „*Es ist dem Siegeszug der Quantenmechanik anzurechnen, dass Quantenstatistik konsequent durchführbar ist. ... Die sogenannte klassische Statistische Physik hingegen, die geht gar nicht. Meist bleibt sie nur unvollständig, aber bei manchen Systemen versagt sie völlig.*“

Kittel/Krömer, Physik der Wärme, Vorwort: ... *ohne Quanten-Begriffe keine diskreten und damit abzählbaren Zustände.*

Bem.: Über **3)** werden wir im WS 18/19 nachdenken.

4) Unterscheide Statistische Physik im thermodynamischen Gleichgewicht (TDG) und im Nichtgleichgewicht (NGW):

- TDG: konzeptionell klar; „lediglich“ Probleme bei der Berechnung der Zustandssumme, also der korrekten Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen.

- NGW: konzeptionell weniger klar. Große Fortschritte bei der Modellierung der spontanen Strukturbildung fernab vom TDG (→ dissipative Strukturen) mit Methoden entwickelt von Hermann Haken (Synergetik), Glansdorff/Prigogine (Thermodynamik), Klimontovich/Ebeling (Selbstorganisation) und anderen.

- WS 17/18: Deterministische Beschreibung der Strukturbildung im NGW

- SS 18: Theorie stochastischer Prozesse: Berücksichtige vernachlässigte mikroskopische Freiheitsgrade als Fluktuationen makroskopischer Größen.

•• Motivation: Hat die StatPhys ihre besten Jahre hinter sich? [Nein!!](#)

Interview mit Kurt Binder anlässlich der Verleihung der Boltzmann-Medaille (Physik-Journal, Juli 2007). StatPhys strahlt aus auf neue Gebiete mit großer Eigendynamik, wie granulare Medien, Risikobewertung von Finanzprodukten (*Statistical Mechanics of Financial Markets*), Simulation von Verkehrsströmen („Stau aus dem Nichts“), u.v.a.m.  
StatPhys und Nichtlineare Dynamik eröffnen neue Einblicke in zelluläre Prozesse (Biophysik).

## Literatur

- A. S. Mikhailov, Foundations of Synergetics I. Distributed Active Systems. Springer, 1990.
- J. L. Klimontovich, Statistical Physics. Harwood Academic Publishers, 1986.
- G. Nicolis, I. Prigogine, Selforganization in Non-Equilibrium Systems. Wiley, 1977.
- J. D. Murray, Mathematical Biology. Springer, 1989.
- R.L. Stratonovich, Topics in the Theory of Random Noise, Vols. I and II, Gordon and Breach, 1963.
- W. Horsthemke, R. Lefever, Noise-Induced Transitions. Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology. Springer, 1984.
- H. Haken, Synergetics. Introduction and Advanced Topics, Springer, 2004.
- H. Risken, The Fokker-Planck-Equation, Springer, Berlin, 1989.
- C.W. Gardiner, Handbook of Stochastic Methods, Springer, Berlin, 1983, 1985.
- N.G. van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry, North-Holland, Amsterdam, 1981.
- L. Arnold, Stochastische Differentialgleichungen – Theorie und Anwendungen, Oldenbourg, München, Wien, 1973.