

klh:



quasi ebene Elastizität

(Dicke konstant,  $\tilde{\varphi}(x, t) = \varphi(x, t) - s_b$ )

aus der Abweichung

DFT:

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}(k, t)}{\partial t} = R(k) \tilde{\varphi}(k, t)$$

mit  $\tilde{\varphi}(k, t)$  Fouriersymmetrisch  
von  $\varphi(x, t)$

und  $R(k) = -Dk^2 (1 - \beta_c C(k))$

$$\Rightarrow \tilde{\varphi}(k, t) = e^{R(k)t} \tilde{\varphi}(k, 0)$$

$$R(k) = -Dk^2 \left( S(k) \right)^{-1} \quad \left( \text{mit } S(k) = \frac{1}{1 - \beta_c C(k)} \right)$$

(Strukturfaktor)

im thermodynamisch stabilen

Gebiet gilt  $S(k) > 0 \rightarrow R(k) < 0 \forall k$

# Bemerkung zur Berechnung von $C(k)$ (und damit $S(k)$ )

Ansatz ("random phase approximation")

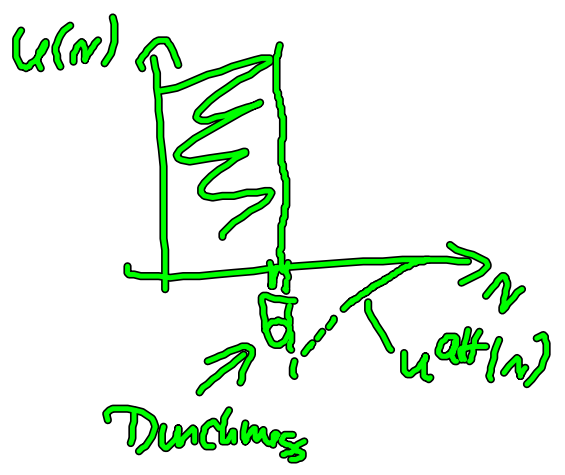
$$C(N) = C^{HS}(N) - \beta u^{att}(N)$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

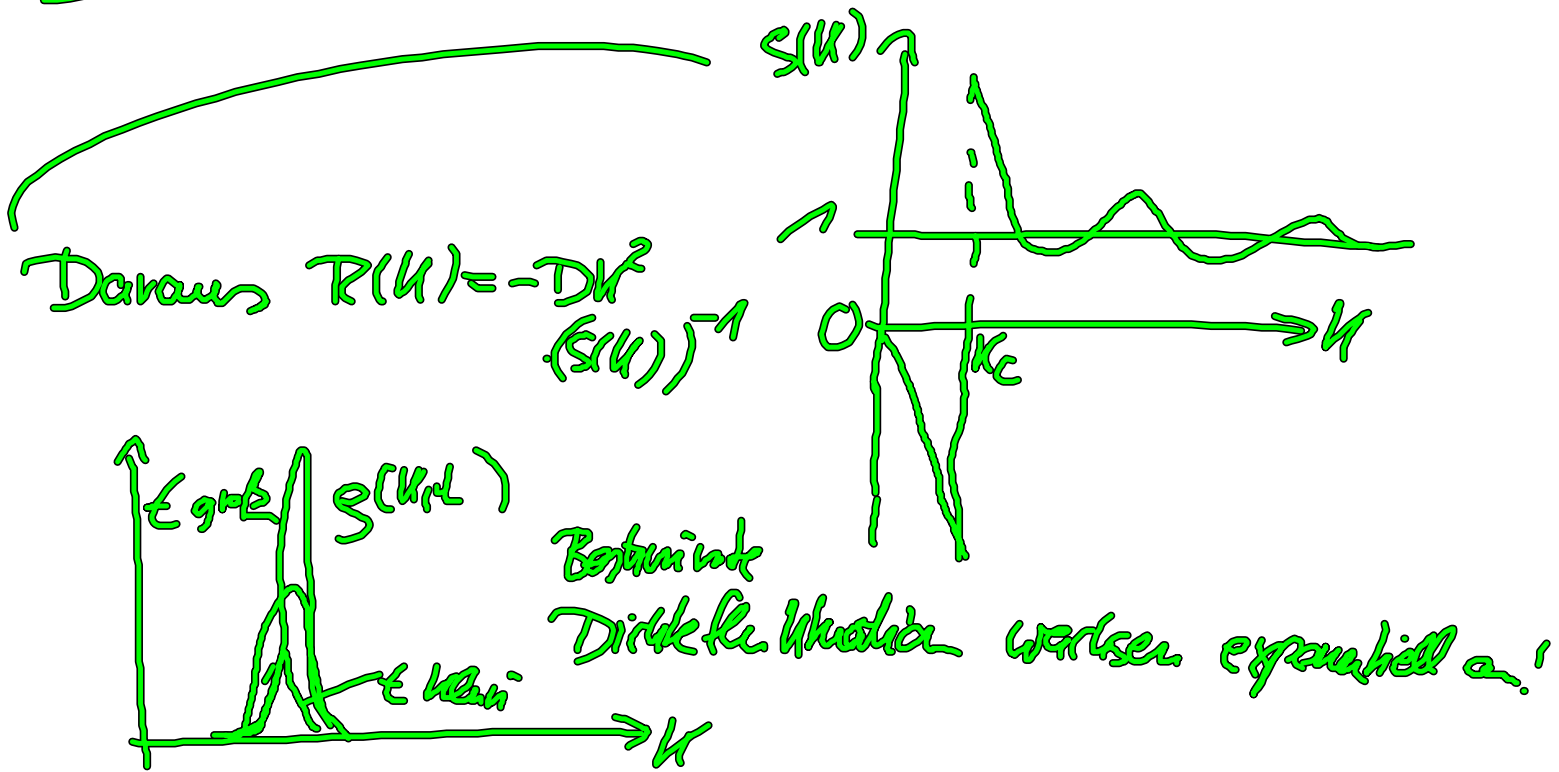
direkte Kondensationsfunktion eines Systems aus Hard-Kugel (analytisch lösbar aus dem Percus-Yevick-Theorem)

attraktive Anteil des Paarpotentials

Idee dahinter: Das Paarpotential zu den Teilchen besteht aus einem Hard-Kugel-Beitrag (Republik) und einem attraktiven Teil ( $u^{att}(r)$ ), der den Phasenübergang treibt



Mit diesem Ansatz kann  $C(k)$   
 und damit  $R(k)$  analytisch für  
alle Temperaturen bestimmt werden!



## II.3. Zusammenhang mit der Cahn-Hilliard-Theorie

J.W. Cahn and J.E. Hilliard  
 J. Chem. Phys. 31, 688 (1959)

⇒ Traditioneller (und sehr bekannter)  
 Zugang zur spinodalen Entmischung!

Startpunkt:

Erhaltung der  
Dichte:

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

mit folgendem Ansatz für den Strom:

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

mit  $M$ : Mobilitätskonstante

und  $F[\rho]$ : Funktional der freien (Helmholtz-)  
Energie

(Beach: Bei der DDFT ~~wird~~ steht für  $M$   
die Größe  $D$   $\rho(\underline{r}, t)$ )

Konkretisierung von  $F[\rho]$ :

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

Pfeiler in  $\rho$   
„Grüneberg-Landau-Ansatz“

Landau-Free Energie:



Betrachte statt  $\rho(\underline{r}, t)$  wieder die Dichtedifferenz

$$\tilde{\rho}(\underline{r}, t) = \rho(\underline{r}, t) - \rho_b$$

Dichtedifferenz des Herkennungs-  
zustands, aus dem heraus  
'gequencit' wird

$$\frac{\partial \Delta_0(\rho(\underline{r}, t))}{\partial \rho(\underline{r}, t)} = g_0(\rho(\underline{r}, t))$$

$$\begin{aligned} &= g_0(\rho_b) + \underbrace{\frac{\partial g_0}{\partial \rho}}_{\substack{\text{entwickle um } \rho_b \\ \frac{\partial^2 \Delta_0}{\partial \rho^2}}} \bigg|_{\rho_b} (\underbrace{\rho(\underline{r}, t) - \rho_b}_{\tilde{\rho}(\underline{r}, t)}) + o(\tilde{\rho}^2) \end{aligned}$$

Einsetzen

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(\underline{r}, t) = M \nabla^2 \left( \frac{\partial^2 \Delta_0}{\partial \rho^2} \bigg|_{\rho_b} - k \nabla^2 \right) \tilde{\rho}(\underline{r}, t)$$

Linearisierte Gln-Hilfsgleichung im Ortsraum!

Fourier-Transformation

Elastizitätszustand

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}(\underline{k}, t) = -M \underline{k}^2 \left( \underline{k}^2 \underline{k}^2 + \frac{\partial^2 \Delta_0}{\partial \rho^2} \bigg|_{\rho_b} \right) \tilde{\rho}(\underline{k}, t)$$

Fourier-Komponent  
von  $\bar{\rho}(k, \epsilon)$

Calderbank

Umformen:

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} \bar{\rho}(k, \epsilon) = R^{CH}(k) \bar{\rho}(k, \epsilon)$$

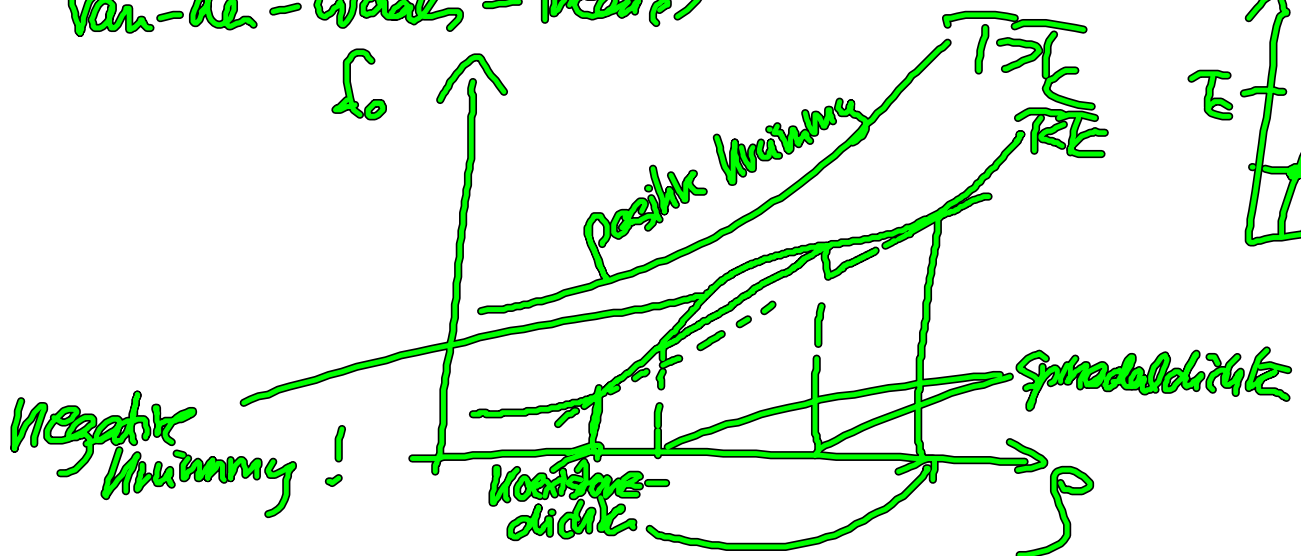
mit  $R^{CH}(k) = -M k^2 \left( k^* k^2 + \frac{\partial f_0}{\partial \rho^2} \Big|_{\rho_0} \right)$

Beachte:

Die Größe  $\frac{\partial f_0}{\partial \rho^2}$  ist positiv

aufserhalb des Thomas-Fermi-Gebiets,  
aber negativ innerhalb der Spinodel!

(betrachte  $f_0(\rho)$  z.B. im Rahmen der  
Van-der-Waals-Theorie)



Physikalisch.  $\frac{\partial \rho}{\partial \rho^2} \sim \frac{\partial p}{\partial \rho} \sim \chi_T$  isothermale Kompressibilität

Die Ginzburg-Landau-Theorie liefert also innerhalb der Ginzburg-Landau

Werte von  $k$ , bei denen  $R^{CH}(k)$  positiv wird

→ expandiert an wachsende  
Fenstergrenze  $\bar{f}(k, t)$  !

## II.4. Allgemeiner Modelle für die Dynamik von Ordnungsparametern

bisher haben wir die Dynamik von  $f(x, t)$ , d.h. der  
Einkristalldichte im Rahmen der DDT und der  
Ginzburg-Landau-Theorie behandelt.

$\rho(x, t)$  ist nichts anderes als ein  
spezieller Ordnungsparameter (OP),  
nämlich der OP, der den  
Phasenübergang Gas-Flüssig beschreibt!



# Generelle Eigenstoffe von OP's :

- Der OP beschreibt den Unterschied zw. 2 Phasen an einem Phasenübergang

z.B. paramagnetisch  $\rightarrow$  ferromagnetisch

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

Magnetisierung Spin auf einem Gitter

- parallelisch  $\rightarrow$  ferroelektrisch


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


Polarisation

permanente molekulare Dipolmomente

- Flüssigkristall.

$$S = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \left( \frac{3(\underline{u}_i \cdot \underline{z})^2 - 1}{2} \right) \right\rangle$$

isotrop 

homotisch 

Orientierung der Teilchen

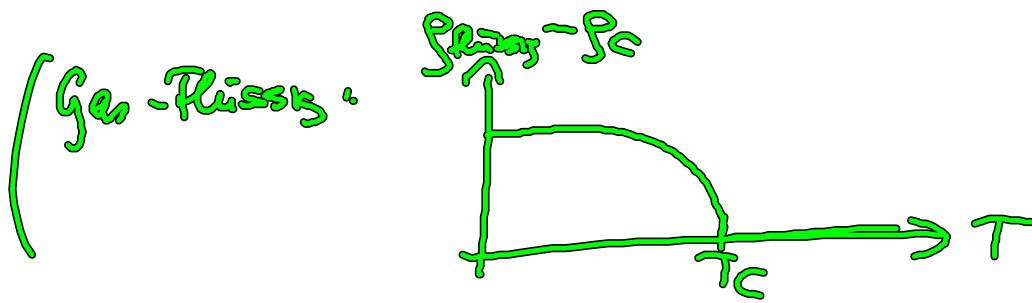
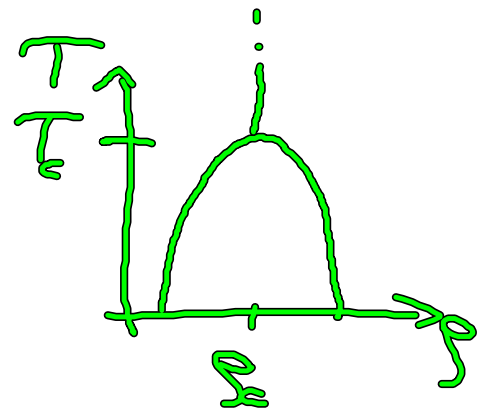
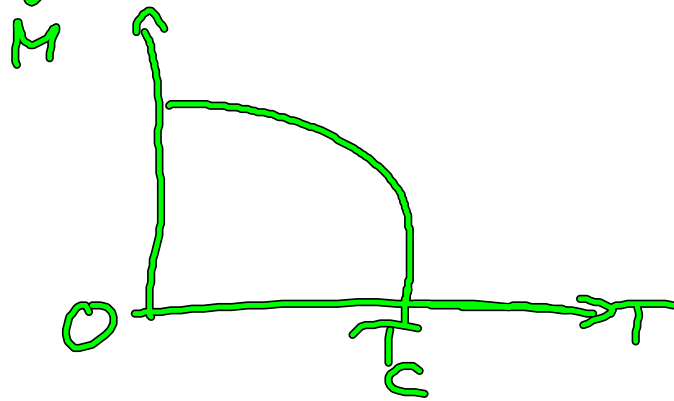
Dichte  $z$

Man sieht: OP's sind (meistens!) Erdbildungsgröße

- Ein "ordentliches" OP ist

# Null in der ungedrehten Phase  
(Hochtemperatur-)

und ungleich Null in der gedrehten Phase



Frage nun:

Wie sieht die Dynamik bei den  
OP's im Nichtgleichgewicht aus?

Meistens stellt man hierzu zunächst  
heuristische Überlegungen an  $\rightarrow$  „mesoskopische“ oder  
„phänomenologische“  
Gleichungen

Generelle Überlegungen bei  
der Aufstellung solcher Gleichungen

- Ist der OP eine Erhaltungsgröße (haben wir eine  
Auf Kontinuitätsgleichung)?
- Welche Symmetrie gibt es im System?  $\rightarrow$  Ist der OP  
erhalten?
- Gibt es in der mesoskopischen  
Gleichung ~~Reine~~ Reibströme?

Zu dieser Frage haben Hohenberg und Halperin  
bereits 1977 eine Klassifikation für Bewegungsgleichungen  
von OP's gemacht. Diese Klassifikation ist auch  
heute noch gültig!

P.C. Hohenberg und B.I. Halperin

„Theory of dynamic critical phenomena“

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

moderner: R.C. Desai, R. Kippl:

"Self-organized and self-assembled  
Structure" (Cambridge University,  
2009)

## Klassifikationschema

Modell A:

Wir nehmen den OP im  
folgenden  $\Phi = \Phi(\underline{r}, t)$

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

↑  
Multiplikationskoeffizient

Raumteil

mit  $F[\Phi] = \int d\underline{r} \left( \underbrace{f(\Phi)}_{\text{Polynom}} + (\nabla \Phi)^2 \right)$  Ginzburg-Landau-Funktion