Statistische Physik des Nichtgleichgewichts

Klapp@physik.tu-berlin.de

Di $12^{15} - 13^{00}$ Sprechstunde

Do $10^{15} - 11^{45}$ EW 203

Fr $10^{15} - 11^{45}$ EW 203

Übung: Mi $10^{15} - 11^{45}$ EW 731 Alice von der Heydt (Sprechstunde Do 14-16 EW [illegible])

Scheinkriterien

- 50 % Punkte Übungszettel
- mind. 1 × Vorrechnen

„Ausbau" zum Wahlpflichtfach

– Besuch Seminar "Statist. Physik komplexer Fluide"
(2 SWS)
Mo 14–16 EW 731

Inhalte, Fokus dieser Vorlesung

VL Statistische Physik: Fokus auf Systeme im thermodyn. Gleichgewicht

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

$\Gamma = (\{r_i\}, \{p_i\})$
$i = 1, \ldots, N$

Klass. Wahrscheinlichkeitsdichte

→ Def. von Ensembles, Zustandssumme, thermodyn. Potentiale etc. "thermodyn. Gleichgewicht"

Quantenstatistik: $\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho} = 0$

Hier in dieser VL:

- Konzentrieren auf Systeme im echten Nichtgleichgewicht

  - externen
    getriebene Systeme
  - intrinsisch getriebene Systeme (→ Biologie)

  - Relaxation in das thermodyn. Gleichgewicht (Streben ins Gleichgewicht)

Fokus

- Systeme aus der weichen kondensierten Materie (Flüssigkeiten, Membranen, weiche Kristalle)

  Wechselwirkungen relevant!

  'weich' ≙ verformbar, elastisch (kein atomarer Festkörper)

  thermische Fluktuationen sind wichtig
  ⟺ relevante Energieskala ist k_BT

- aber nicht ausschließlich!!

Theoretische Konzepte und Methoden:

- Stochastische Prozesse
  (insbes. Markov-Prozesse)

  z.B. zufällige Stöße auf Kolloide in der weichen Materie oder der Biologischen Physik

  allgemeiner: "Transport in Verrauschten" Systemen!

- Fokker-Planck-Gleichung
  → Bewegungsgleichung für die zeitabhängige Vielteilchenverteilungsfunktion

- <u>Langevin-Gleichung</u>
  (Effektive) Bewegungsgleichung für einzelne Zufallsvariable

  Spezialfall: Brown'sche Bewegung

Wegbereiter: Brown ca 1827
Einstein ca 1905
Fokker ca 1914
Planck 1917

• Theorie der linearen Antwort

Brücke zur Gleichgewicht und Systemen unter sehr kleinen äußeren Störung durch sogenannte Green-Kubo-Relation f. Transportkoeffizienten)

$$\eta \sim \int_{t_0}^{t} \overbrace{\langle \sigma_{xz}(t)\,\sigma_{xz}(0)\rangle_{eq}}^{\text{Autokorrelationsfunktion im Gleichgewicht:}}\, dt$$

Viskosität t_0 Scherspannung Gleichgewicht

• Dynamische Dichtefunktionaltheorie

(geht aus der Fokker-Planck-Gleichung hervor mit Annahme der adiabatische Approximation)

- Mori-Zwanzig Formalismus

Systeme mit viele Freiheitsgrade
Extrahiere die Dynamik relevanten, "langsamen" Variablen durch "Herausprojizieren" schnellen, irrelevante Variable !

- Computersimulationsmethoden im Nichtgleichgewicht

— H. Risken "The Fokker-Planck equation"
— F. Schwabl "Statist. Physik"
— Gardiner "Stochastic Methods"

I. Stochastische Prozesse

I.1. Wichtige Begriffe

- Zufällige (Stochast.) Prozesse:

  Kenntnis über ein System (Mikrozustand) bei allen vorhergehenden Zeiten reicht nicht aus, um seine zukünftige Entwicklung genau festzulegen!

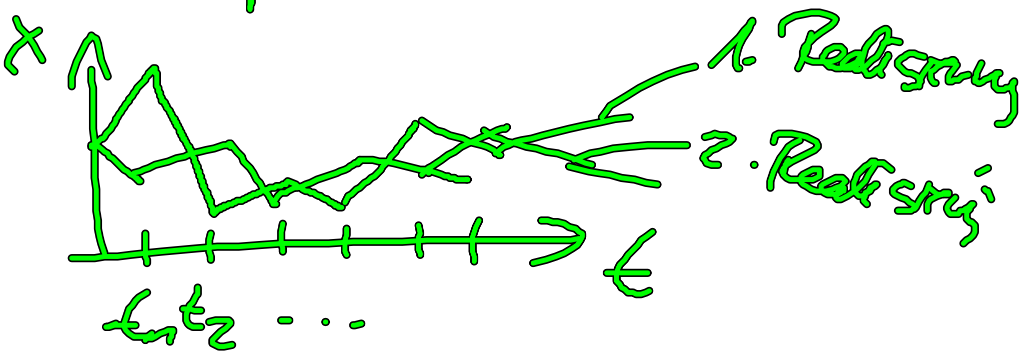
Beispiel: Zufallswanderer in einer Dimension

$$x(t) = n(t)\, d$$

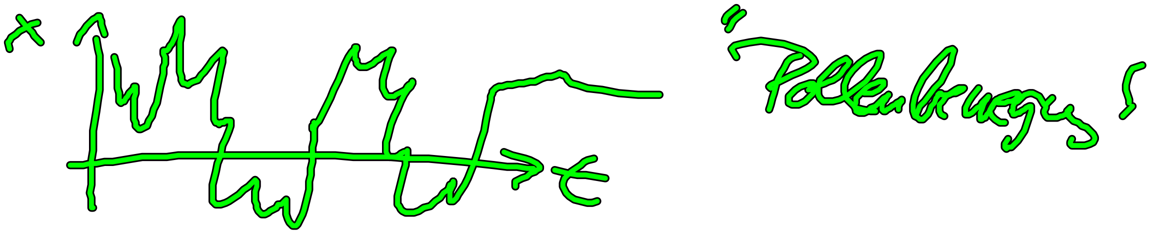
d — Schrittweite

$n(t)$ — zufällige ganze Zahl $n = \pm 1, \pm 2, \dots$

In jedem Zeitschritt geht der Zufallswanderer mit Wahrsch. $\frac{1}{2}$ in die positive oder negative Richtung



- Orte eines Brown'schen Teilchens



- Radioaktiver Zerfall, Münzenwurf

Wichtig: Wir sind immer nicht nur an einer einzelnen Realisierung, sondern an der Beschreibung der Gesamtheit von Realisierungen interessiert!

• Zufallsvariablen ("Ereignisse")

charakterisiert durch die Menge mögl. Zustände
so wie durch die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte

Beispiel

Kontinuierliche Zufallsvariable

$X \in \mathbb{R}$ (Ort eines Teilchens in einer Dimension)

Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P(x' \leq x \leq x' + dx') = g(x')\,dx'$$

Wahrsch., dass x im Intervall $[x', x'+dx']$ ist

Wahrscheinlichkeitsdichte mit $\int dx'\, g(x') = 1$

Falls die Ereignisse diskret verteilt sind:

$$\rho(x) = \sum_{i=1}^{n} \delta(x - x^{(i)})\, p_i$$

diskrete Werte, die von x angenommen werden können

Wahrscheinlichkeit für Eintreten von $x^{(i)}$

Beispiel Münzwurf:

$x^{(1)}$: Zahl, $x^{(2)}$: Kopf $\quad p^{(1)} = p^{(2)} = \frac{1}{2}$

Bemerkung:

Die Verteilung für n-faches Auftreten des Ereignisses "Zahl" bei N Würfen ist gegeben durch die Binomialverteilung:

$$p_N(n) = \frac{1}{2^N}\binom{N}{n}$$

Mittelwert:

$$\langle x \rangle = \int dx\, \rho(x)\, x$$

(ρ ist normiert!)

Für diskrete Variablen ergibt sich:

$$\langle x \rangle = \sum_i x^{(i)} p_i$$

allgemein: Mittelwert der Funktion $\varphi(x)$:

$$\langle \varphi \rangle = \int dx\, \rho(x)\, \varphi(x)$$

Betrachte System mit 2 Zufallsvariablen: x_1, x_2

speziell: x_1, x_2 heißen unkorreliert, falls

$$\rho(x_1, x_2) = \rho_1(x_1)\, \rho_2(x_2)$$

Faktorisierung der Verteilung!

Folgerung:

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int dx_1 \int dx_2\, \rho(x_1, x_2)\, x_1 x_2 =$$

$$\underset{\text{unkorreliert}}{=} \int dx_1\, \rho_1(x_1)\, x_1 \int dx_2\, \rho_2(x_2)\, x_2$$

$= \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle$!

Zurück zum Fall einer Variablen

Momente der Verteilung

$$M_\nu := \langle x^\nu \rangle$$ ν-tes Moment

Zugehörige erzeugende Funktion

$$Z(\alpha) := \langle e^{\alpha x} \rangle$$

$$= \int dx \, g(x) e^{\alpha x}$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \left\langle \frac{\alpha^\nu x^\nu}{\nu!} \right\rangle$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha^\nu}{\nu!} \langle x^\nu \rangle$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha^\nu}{\nu!} M_\nu$$

$$\rightarrow \left.\frac{\partial^\nu Z(\alpha)}{\partial \alpha^\nu}\right|_{\alpha=0} = M_\nu$$

$\rightarrow$ Erzeugende Funktion!

z.B. $\nu = 2$

$$\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} Z(\alpha) = \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha^\nu}{\nu!} M_\nu$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}\left(1 + \alpha M_1 + \frac{\alpha^2}{2} M_2 + \frac{\alpha^3}{3!} M_3 + \dots\right)$$

$$= \left(M_2 + \alpha M_3 + \mathcal{O}(\alpha^2)\right)$$

Setze $\alpha = 0$

$$\Rightarrow M_2 \quad !$$

<u>Zusammenhang zur Fouriertransformation</u>

Sei $\alpha = ik$ (k reell)

$$\Rightarrow Z(\alpha) = Z(ik) = \langle e^{ikx} \rangle = \int dx\, \rho(x)\, e^{ikx}$$

$\Rightarrow$ Fouriertransformierte der Wahrscheinlichkeitsdichte!

beachte:

$$Z(ik) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \int dx\, \rho(x)\, \frac{(ikx)^\nu}{\nu!}$$

$$= \sum_{\nu} \frac{(ik)^\nu}{\nu!} M_\nu$$

Kumulanten

Sie sind definiert durch die Kumulantenerzeugende

$$\Gamma(\alpha) = \ln Z(\alpha)$$

$$= \ln \langle e^{\alpha x} \rangle$$

$$= \ln \left(1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha^m}{m!} M_m \right)$$

$$\stackrel{!}{=} \sum_{\nu=1}^{\infty} \frac{\alpha^\nu}{\nu!} C_\nu$$

ν-te Kumulant

$C_\nu = \langle x^\nu \rangle_c$

es gilt:

$$\frac{\partial^\nu}{\partial \alpha^\nu} \Gamma(\alpha) \Big|_{\alpha=0} = C_\nu$$

man findet (hier ohne Beweis)

$$C_1 = M_1 \qquad \left(\langle x \rangle_c = \langle x \rangle \right)$$

$$C_2 = M_2 - (M_1)^2$$

$$\left(\langle x^2 \rangle_c = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \right)$$

speziell Gaußverteilung

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} e^{-\frac{(x-\langle x \rangle)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\langle x^2 \rangle_c = \sigma^2 \quad ; \quad \langle x^k \rangle_c = 0 \text{ für } k > 2 \,!!$$

Verallgemeinerung auf mehrere Zufallsvariablen

$X \longrightarrow \underline{x} = (x_1, \ldots, x_d)$

d: Zahl der Zufallsvariablen.

$$Z(\underline{\alpha}) = \langle e^{\underline{\alpha}\cdot\underline{x}} \rangle$$

$$= \sum_{\nu_1 \ldots \nu_d} \frac{\alpha_1^{\nu_1} \cdots \alpha_d^{\nu_d}}{\nu_1! \cdots \nu_d!} \underbrace{M_{\nu_1 \ldots \nu_d}}_{\langle x_1^{\nu_1} x_2^{\nu_2} \cdots x_d^{\nu_d} \rangle}$$

analog für $\Gamma(\underline{\alpha})$