Statistische Physik II

I. Wiederholung der Grundbegriffe der klassischen ~~Statist~~ Statist.-Physik

→ Ensembles, Zustandssumme

II. Phasenübergänge

- „mean field"- und Landau-Theorie

  Ferromagneten, Flüssigkristalle, Fluide

  (d.h. magnetische Systeme Spinmodelle, „soft matter")

- kritische Phänomene
- über „mean field" hinaus: Fluktuationen, Korrelation

III. Computersimulationen

- Monte-Carlo (MC)-Methode

  (Markov-Prozesse, detailed balance, Metropolis-Algorithmus)

- ~~Molekul~~ Molekulardynamik

(IV. Dichtefunktionaltheorie, ...)

also: Fokus liegt auf Gleichgewichtseigenschaften
und auf klassische Systeme

Bücher: • Schwabl, Nolting
• Plischke/Bergersen
"Equilibrium Statistical Physics"

Übung: Helge Neitsch

Übungszettel: Ausgabe Dienstag (1. Zettel 26.10.)
Abgabe 1 Woche später

Schein-Kriterium: 50 % der Punkte auf den Übungszettel

I. Grundbegriffe der klassischen Statistischen Physik

Zentrales Problem: Quantitative Beschreibung von Systemen mit sehr vielen Freiheitsgraden (z.B. $N \sim 10^{23}$)

Beispiele:
~~Ma~~ Magnetisierung eines Festkörpers
Druck in einem Gas
Ordnungsgrad in einem Flüssigkristall

Idee der Statist. Physik:

Berechnung solcher makroskopischer (meßbarer) Größen mit Hilfe von Informationen „aus der Mikrowelt"

„Brücke zw. Mikro- und Makrowelt"

dazu zunächst notwendig:

Beschreibung des <u>Mikrozustands</u>

— abhängig von der Art des Systems!

a) klassisches Gas aus wechselwirkenden Atomen (Zahl N)

einfachster Fall: keine inneren Freiheitsgrade, nur eine Teilchensorte

Mikrozustand: $\begin{cases} \{q^N\} = q_1, \dots, q_N & \text{Koordinaten} \\ \{p^N\} = p_1, \dots, p_N & \text{Impulse} \end{cases}$

häufig schreibt man:

$$\Gamma = \{q^N\}, \{p^N\}$$

Variable im Phasenraum

Verhalten des Systems:

$\rightarrow$ Hamiltonfunktion $H(\{q^N\}, \{p^N\}, t) = H(\Gamma, t)$

b) Spinsysteme

z.B. „Ising-Spins": Spin-Quantenzahl $s = \frac{1}{2}$ -Teilchen

$\Rightarrow$ 2 Einstellungen

$\uparrow \downarrow$

Mikrozustand: $\{s^N\} = s_1, \ldots, s_N$

$s_i = \pm 1$

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} \underbrace{J_{ij}}_{\text{Kopplungsmatrix}} s_i s_j$$

Ising-System: semiklassisches System:
H ist klassisch, Quantenmechanik steckt in der Diskretisierung der Spin-Einstellungen!

c) Quantenmechanische Systeme
(Fermi-Systeme, Bose-Einstein-Kondensate)

Mikrozustände: $|\psi^N\rangle$ im Hilbertraum

Vielteilchen-Wellenfunktion

alternativ: Besetzungszahldarstellung

Jetzt spezialisieren wir auf klass. Fluid mit Mikrozustand Γ

Frage: Wie würde man (kann man) eine makroskopische Größe bestimmen?

1. Möglichkeit

→ Zeitmittelwert

$$\langle A \rangle_t = \lim_{\tau \to \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt \; A(\{q^{\mu}\}, \{p^{\mu}\}, t)$$

mit A: interessierende Größe

τ: Zeitintervall, über das gemessen wird

τ sollte sehr groß sein, um das Ergebnis unabhängig vom Anfangszustand zu machen

Beachte:

Selbst wenn A nicht explizit von der Zeit abhängt, verändert sich A mit der Zeit t aufgrund der mikroskopischen Vorgänge im System

$q_i = q_i(t) \qquad i = 1, \dots, N$

$p_i = p_i(t)$

es gilt (Hamilton) $\quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$

Folgerung: $\quad \frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t}$

Poissonklammer

$\{A, H\} = \sum_{k=1}^{f} \left(\frac{\partial A}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right)$

$f = 3N$

<u>Problem</u>

Aus theoretischer Sicht ist die Ausführung des Zeitmittels praktisch unmöglich!

a) man hat <u>sehr viele</u> gekoppelte Bewegungsgleichungen!

↓

Kopplung durch Wechselwirkungen zw. den Teilchen

$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j \neq i} u(|r_i - r_j|)$

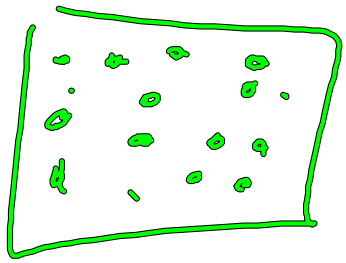
Paarpotential

b) Unvollständige Information über die Anfangsbedingungen! $\{q^N(t=0)\}, \{p^N(t=0)\}$

Lösung höchstens möglich in kleinen
Modellsystemen $N \sim 1000 - 10\,000$

→ Molekulardynamik - Computersimulationen

→ Lösung der gekoppelten BWGL
(Bewegungsgleichungen)



→ Trajektorien der Teilchen
→ Dynamik der Größe A

→ Zeitmittelwerte

I.1. Zur Idee des statistischen Ensembles

Betrachte Bewegung im Phasenraum
der Einfachheit halber in einer Dimension
(und 1 Freiheitsgrad)

$\Gamma = (q, p)$

Phasenraumtrajektorie: Beschreibt die zeitliche Veränderung von q und p

Zeitmittelwert

$$\langle A \rangle_t = \lim_{\tau \to \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt \; A(\Gamma(t))$$

approximiere Integral durch Summe

$$= \lim_{\tau \to \infty} \frac{1}{\tau} \Big(A(\Gamma(t_1)) + A(\Gamma(t_2)) + \dots A(\Gamma(t_\tau)) \Big)$$

Idee: Wenn man wüßte, wie häufig sich das System innerhalb des Intervals τ in einem bestimmten Segmente des Phasenraums $d\Gamma = dp\,dq$, dann könnte man den Mittelwert sofort angeben!

$\Rightarrow$ Interessant ist also die Verteilung der Mikrozustände als Funktion der Zeit!

<u>Zentrale Gedanke von Gibbs</u> (Arbeiten aus den Jahren 1870 – 1900)

Betrachte statt des einzelnen Systems und seine Zeitentwicklung eine Vielzahl gleichartiger, voneinander entkoppelter Systeme <u>zur selben Zeit</u>!

„gleichartig": Die Systeme gehorchen derselben mikroskopischen

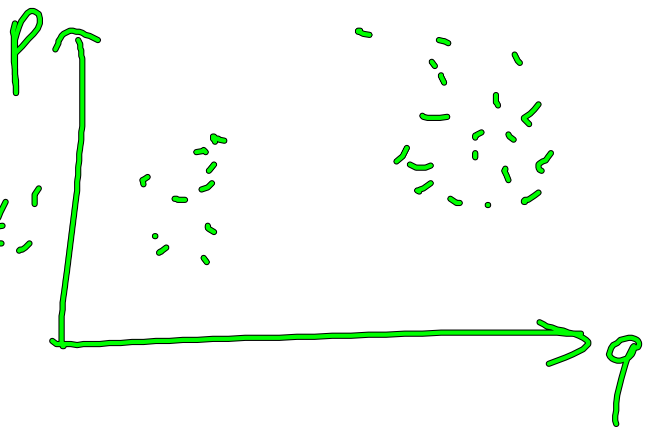
Bewegungsgleichungen (dasselbe H), und sie gehorchen denselben makroskopischen Bedingungen (z.B. gleiche T)

„entkoppelt": Mikrozustände sind verschieden

$\Longrightarrow$ „Statistisches Ensemble"

Veranschaulichung des Ensembles zu einer Zeit t

zu einer festen Zeit t!



„Punktschwarm im Phasenraum"

Idee dann:
Ersetze den Zeitmittelwert durch eine Mittelung über die Verteilung der Mikrozustände im Ensemble zur selben Zeit t!

$\longrightarrow$ definiere eine Verteilungsfunktion $\tilde{\rho}(\Gamma, t)$