

## Projekt A: Magnetische Systeme und Phasenübergänge I

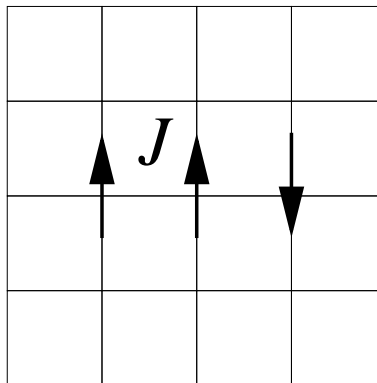
### Kurzbeschreibung

Viele Methoden der Statistischen Physik lassen sich gut an einfachen Modellsystemen illustrieren. Ein ganz besonders wichtiges Modell ist das sog. *Ising-Modell*. Ursprünglich als einfaches Modell eines Ferromagneten gedacht, spielt das Ising Modell insbesondere für die Theorie der Phasenübergänge eine unverzichtbare Rolle.

Das Ising-Modell ist wie folgt definiert: Man betrachte  $N$  (Ising-)Spins  $s_i = \pm 1$ , mit  $i = 1, \dots, N$  auf einem regulären, meist kubischen Gitter in  $d$  Dimensionen. Die Energie (Hamilton Funktion) des Systems ist gegeben durch

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (1)$$

wobei die erste Summation über alle Paare von nächsten Nachbarn auf dem Gitter auszuführen ist. Die Grösse  $h$  bezeichnet ein externes magnetisches Feld. Der Kopplungsparameter  $J$  gibt die Stärke der Wechselwirkung zweier Spins an. Ferromagnetische Ordnung erhält man für  $J > 0$ , während  $J < 0$  antiferromagnetische Ordnung hervorruft. Das 2-dimensionale Ising-Modell auf einem kubischen Gitter ist schematisch in der folgenden Skizze illustriert



Ziel dieses Projekts ist es, statistische Eigenschaften des Ising-Modells mit Hilfe *analytischer* Methoden zu berechnen. Dabei sollen sowohl exakte Verfahren als auch Näherungsmethoden zum Einsatz kommen. Ein besonderes Augenmerk soll dabei auf den Phasenübergang paramagnetisch-ferromagnetisch gelegt werden. Dieser Übergang ist ein schönes Beispiel für die allgemeine Landau Theorie der Phasenübergänge, die innerhalb des Projekts ebenfalls gestreift werden kann.

## Projekt B: Magnetische Systeme und Phasenübergänge II

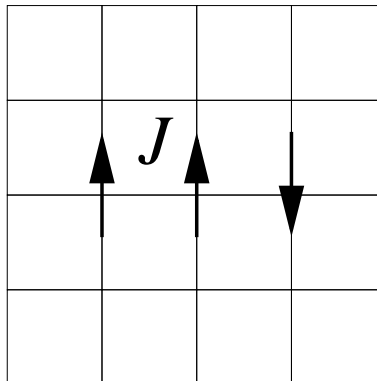
### Kurzbeschreibung

Viele Methoden der Statistischen Physik lassen sich gut an einfachen Modellsystemen illustrieren. Ein ganz besonders wichtiges Modell ist das sog. *Ising-Modell*. Ursprünglich als einfaches Modell eines Ferromagneten gedacht, spielt das Ising Modell insbesondere für die Theorie der Phasenübergänge eine unverzichtbare Rolle.

Das Ising-Modell ist wie folgt definiert: Man betrachte  $N$  (Ising-)Spins  $s_i = \pm 1$ , mit  $i = 1, \dots, N$  auf einem regulären, meist kubischen Gitter in  $d$  Dimensionen. Die Energie (Hamilton Funktion) des Systems ist gegeben durch

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i, \quad (2)$$

wobei die erste Summation über alle Paare von nächsten Nachbarn auf dem Gitter auszuführen ist. Die Grösse  $h$  bezeichnet ein externes magnetisches Feld. Der Kopplungsparameter  $J$  gibt die Stärke der Wechselwirkung zweier Spins an. Ferromagnetische Ordnung erhält man für  $J > 0$ , während  $J < 0$  antiferromagnetische Ordnung hervorruft. Das 2-dimensionale Ising-Modell auf einem kubischen Gitter ist schematisch in der folgenden Skizze illustriert



Ziel dieses Projekts ist es, statistische Eigenschaften des Ising-Modells mit Hilfe *numerischer* Methoden zu berechnen. Die Methode der Wahl ist dabei die sog. Monte-Carlo Simulation, die Mittelwerte statistischer Grössen mit Hilfe von Zufallszahlen (daher der Name: in Monte Carlo ist das Glücksspiel zuhause) auswertet. Monte-Carlo Simulationen haben eine breite Anwendung in vielen Bereichen der Physik und auch außerhalb der Physik gefunden.

Zunächst soll die Monte-Carlo Integration getestet werden, d.h. die Integration einer Funktion mit Hilfe von Zufallszahlen. Darauf aufbauend sollen die Grundlagen der Monte Carlo Simulation nachvollzogen werden, um dann eine Simulation des Ising Modells durchführen zu können.

## Projekt C: Struktur der Flüssigkeiten

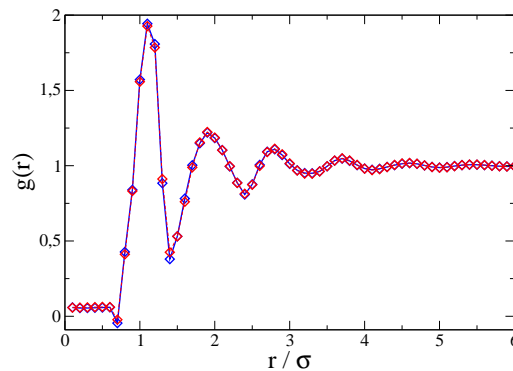
### Kurzbeschreibung

Im Gegensatz zu Festkörpern zeigen einfache Flüssigkeiten keine langreichweitige Ordnung. Nichtsdestotrotz existiert in diesen Fluiden eine charakteristische Nahordnung, die von der Dichte und dem Wechselwirkungspotential abhängt. Da die Struktur experimentell mit Hilfe von Streuexperimenten gemessen werden kann, ist die Vorhersage der Nahordnung ein guter Test der Theorie.

Die zentrale Größe ist die sog. *Paarverteilungsfunktion*  $g(r)$ , die die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte angibt, ein zweites Teilchen im Abstand  $r$  zu finden, falls sich das erste Teilchen am Ursprung befindet. Ein Beispiel einer Paarverteilungsfunktion einer Lennard-Jones Flüssigkeit ist in der Abbildung unten gezeigt. Ziel dieses Projekts ist es, eine analytische Näherung für  $g(r)$  zu finden und diese mit Computersimulationen zu vergleichen. Je nach Interesse kann der Schwerpunkt dabei eher auf die analytische Rechnung oder auf die Simulation gelegt werden.

Im analytischen Teil soll ein formal exakter Ausdruck für  $g(r)$  aus der BBGKY-Hierarchie hergeleitet werden. Zwar formal exakt, ist dieser Ausdruck keine geschlossene Gleichung zur Berechnung von  $g(r)$ . Mit Hilfe der Kirkwoodschen Superpositionsapproximation, kann die Born-Green Gleichung für  $g(r)$  hergeleitet werden. Diese nichtlineare Integro-Differentialgleichung erweist sich als nicht sonderlich geeignet, insbesondere für hohe Dichten. Einen alternativen Zugang stellt die Ornstein-Zernike Gleichung dar, die beispielsweise mit Hilfe der Percus-Yevick, MSA oder hypernetted chain Approximation gelöst werden kann.

Die analytische Näherung soll mit den Resultaten einer Molekulardynamik (MD) Computersimulation verglichen werden. Für ein gegebenes Wechselwirkungspotential  $U$  werden innerhalb der MD Simulation die Newtonschen Bewegungsgleichungen  $m\ddot{\mathbf{r}}_j = -\nabla_j U$ , mit  $j = 1, \dots, N$  eines klassischen Vielteilchen-Systems numerisch integriert. Mit Hilfe der Positionen der Teilchen  $\mathbf{r}_j$  kann dann die Paarverteilungsfunktion ausgerechnet und mit der analytischen Näherung verglichen werden.



## Projekt E: Lineare Antworttheorie und Fluktuations-Dissipations Theorem

### Kurzbeschreibung

Eine sehr nützliche und weit verbreitete Methode, Informationen über ein physikalisches System zu gewinnen ist, die Antwort des Systems auf kleine Störungen zu untersuchen. Die lineare Antworttheorie sagt voraus, dass sich die Antwort auf hinreichend kleine Störungen durch Gleichgewichtseigenschaften ausdrücken lässt. Das Fluktuations-Dissipations Theorem (FDT) ist ein zentrales Ergebnis der linearen Antworttheorie mit weitreichenden Konsequenzen in vielen Bereichen der Physik.

Ziel dieses Projekts ist es, die lineare Antworttheorie und das FDT genauer kennen zu lernen. Dazu soll erst ein einfaches Modellsystem (gestörter harmonischer Oszillator) exakt berechnet werden, bevor die allgemeine Form des FDT hergeleitet wird,

$$R_{AB}(t) = -\frac{1}{k_B T} \frac{d}{dt} C_{AB}(t) \quad (3)$$

Dabei bezeichnet  $R_{AB}(t)$  die Abweichung des Mittelwerts von  $A$  durch eine Störung die an die Variable  $B$  ankoppelt. Die Korrelationsfunktion  $C_{AB}(t) = \langle A(t)B(0) \rangle - \langle A(t) \rangle \langle B(0) \rangle$  dagegen enthält nur Mittelwerte in der Abwesenheit der Störung. Beispiele des FDT für spezielle Modellsysteme und die Auswertung der zugehörigen Antwortfunktionen sollen dessen Inhalt besser verständlich machen.

Einen etwas makroskopischeren Zugang zu kleinen Störungen um das Gleichgewicht stellt Einsteins Theorie der Fluktuationen im Zusammenhang mit Onsagers Symmetriebeziehungen zwischen Transportkoeffizienten dar. Dieser Zugang soll ebenfalls, wenn auch nur kurz, behandelt werden.

## Projekt F: Diffusion und Fokker-Planck Gleichung

### Kurzbeschreibung

Diffusion ist ein alltägliches Phänomen, das nicht zeit-umkehr invariant ist: Wärme fließt spontan von warmen zu kalten Gebieten, Milchtropfen lösen sich im Kaffee auf, etc. Phänomenologisch können diese Prozesse durch makroskopische Bilanzgleichungen beschrieben werden. Für die eben genannten Beispiele sind das die Wärmeleitungsgleichung, Diffusionsgleichung, etc.

Innerhalb dieses Projekts, soll die Diffusion von Teilchen etwas näher untersucht werden. Die Bewegungsgleichung eines diffundierenden Teilchens lautet

$$m\dot{v} = -\nabla U - \xi v + F^B. \quad (4)$$

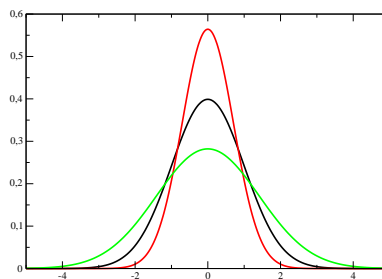
Dabei bezeichnet  $x$  den Ort,  $v = \dot{x}$  die Geschwindigkeit und  $m$  die Masse des Teilchens. Der Einfachheit halber ist hier nur die Bewegung in einer Dimension betrachtet. Der Einfluß der Umgebung wird einerseits durch die Reibung mit dem Reibungskoeffizienten  $\xi$  modelliert, andererseits durch Zufallskräfte  $F^B$ . Zusätzlich ist das Teilchen systematischen Kräften  $F = -\nabla U$  ausgesetzt die vom Potential  $U = U(x)$  herrühren.

Gleichung (4) wird als Langevin Gleichung bezeichnet. Statistische Eigenschaften des Systems lassen sich häufig einfacher durch die zugehörige *Fokker-Planck* Gleichung berechnen. Dazu betrachtet man ein Ensemble aus vielen diffundierenden Teilchen und bezeichnet mit  $f(x; t)$  die Wahrscheinlichkeitsdichte, ein Teilchen am Ort  $x$  zur Zeit  $t$  zu finden. Im überdämpften Grenzfall lautet die zu (4) zugehörige Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\nabla \{af\} + D\nabla^2 f. \quad (5)$$

Die Abbildung unten zeigt den zeitlichen Verlauf von  $f(x; t)$  für eine freie Diffusion, falls alle Teilchen ursprünglich bei  $x = 0$  waren.

Ziel dieses Projekts ist es, die Diffusion von Teilchen mit Hilfe der Langevin und vor allem der Fokker-Planck Gleichung zu untersuchen. Dabei sollen einerseits allgemeine Eigenschaften der Fokker-Planck Gleichung (Erhaltung der Norm, Momentengleichungen, H-Theorem) studiert werden. Andererseits sollen exakte und Näherungslösungen der Gleichung für spezielle Potentiale berechnet werden. Dabei kann man die Verwandtschaft der Fokker-Planck zur Schrödingergleichung ausnutzen.



## Projekt G: Statistische Eigenschaften der Polymere

### Kurzbeschreibung

Viele Methoden der Statistischen Physik können erfolgreich auf Polymere angewandt werden. Polymere sind Makromoleküle, deren Eigenschaften, dank Ihrer außerordentlichen Länge, von vielen mikroskopischen Details unabhängig sind. Daher können statistische Eigenschaften der Polymere sehr häufig durch einfache Modelle beschrieben werden.

Eine wichtige Größe ist die Ausdehnung eines Polymerknäuls, die beispielsweise durch den End-zu-End Vektor  $\mathbf{R} = \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j$  definiert werden kann, wobei  $\mathbf{r}_j$  die Positionen der insgesamt  $N$  Monomere bezeichnet (siehe linker Teil der Skizze unten). Mit Hilfe einfacher Modelle soll das Verhalten von  $\langle \mathbf{R}^2 \rangle$  als Funktion der Anzahl Monomere  $N$  berechnet werden. Für das Irrflugsmodell und die sog. Gaussche Kette kann  $\langle \mathbf{R}^2 \rangle$  exakt berechnet werden. Während das Irrflugsmodell und die Gaussche Kette sogenannte Phantom-Polymere modellieren, die sich beliebig durchdringen können, spielt das ausgeschlossene Volumen bei realen Polymeren eine wichtige Rolle. Der Einfluß des ausgeschlossenen Volumens auf die Ausdehnung des Polymerknäuls soll näherungsweise mit Hilfe der Idee von Flory berechnet werden. Diese Näherung soll dann verglichen werden mit numerischen Berechnungen des End-zu-End Abstands eines 'Gitterpolymers' (siehe rechter Teil der Skizze unten). Wahlweise kann der Effekt des ausgeschlossenen Volumens auch mit Hilfe der Störungstheorie berechnet werden. Dazu ist es zweckmäßig, zu einer kontinuierlichen Beschreibung überzugehen: die Pfadintegral-Formulierung.

