

## Vorbereitung

VL : Di 10<sup>00</sup> - 11<sup>45</sup> / 12<sup>00</sup>  
(Sabine Klapp) Do 14<sup>15</sup> - 15<sup>45</sup> / 16<sup>00</sup> } im EW 202

UE : Di 16<sup>00</sup> - 18<sup>00</sup> im EB 133C  
(Alice von der Heydt) erste Übr: 26.9.

Schwerpunktklausur: 50% der Punkte auf  
Zettel  
+ Altklausur

Anmeldung bei Moses bis Mittwoch 18<sup>00</sup>  
20.09.2016

Die Veranstaltung ist ein Vertiefungsstudium mit 10 ECTS  
(VL/UE)

Durch Kombination mit Seminar Mi 16<sup>00</sup> - 18<sup>00</sup> }  $\Rightarrow$  Wahlmöglichkeit  
(Statist. Physik Komplexer Fluide) } Statist. Physik  
12 ECTS

Information: [itp.tu-berlin.de/menue/lehre](http://tu-berlin.de/menue/lehre)

UE-Zettel: Aus- und Abgabe jeweils Donnerstags  
zu Beginn der VL

angest. 2-3 er Gruppe

## Inhalte der VL (Übersicht)

### Zentrale Aufgabe der Statist. Physik

Quantitative Beschreibung von Systemen mit sehr vielen Freiheitsgrade ( $N$ )

z.B.  $N \sim 10^{23}$  Zahl von Teilchen in einem Mol eines Stoffes  
↳ 12g Kohlenstoff des Isotops  $^{12}\text{C}$

meistens sind diese Korrelierter  
(in allen interessanten Fällen)

Beispiele für Größen, die man berechnen möchte

- Magnetisierung / Polarisation eines Festkörpers (als Funktion der Temperatur  $T$ , des äußeren Feldes...)
- Druck in einem Gas / Flüssigkeit
- spezifische Wärme eines Festkörpers
- Ordnungsgrad eines Flüssigkristalls
- Transportkoeffizienten (z.B. Scherviskosität, Leitfähigkeit)
- Antwortfunktionen (Response-Funktion)  
Drehviskositätskonstante bzw. Drehviskosität:

## Ziel der Statist. Physik

Berechnung solcher makroskopischer Meßgröße  
mit Hilfe von Information aus der "Mikrowelt"

(mikroskop. Hamiltonian,  
Verteilung der Mikrozustände  
im Phasenraum)

Problem: Umgang mit der Unmenge an Information,  
die die Mikrozustände (als Fkt. der Zeit)  
enthalten

Strategie: Statistische Beschreibung,  
Fokus auf Mittelwerte und Schwankungen um diese  
(benutzt Konzepte aus der Wahrsch. Theorie) Mittelwert

Hoffnung dabei: Schwankungen um die Mittelwerte sind  
klein !!

Für sehr große Systeme ist diese Annahme meist  
richtig !!

## Beispiel

Bsp. Relative Schwankung der Energie um  
ihren Mittelwert (in einem System bei konstanter  
Temperatur, Volumen, Teilchenzahl)

$$\frac{\sqrt{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}}{\langle E \rangle} = \frac{\sqrt{\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle}}{\langle E \rangle} \sim \sqrt{\frac{1}{N}}$$

Wurzel aus  
Quadrat.  
Abwärts

Mittelwert  $\rightarrow$

wird klein in sehr große  
Systeme mit vielen Freiheitsgraden

## Taken dieser Vorlesung

- Systemen im oder sehr dicht am thermischen Gleichgewicht  $\rightarrow$  Observablen laufen für große Zeiten auf konstante Werte zu  
(abgeschlossene Systeme)  
keine beobachtbaren Kräfte
- Familien/Beispiele in der Mehrheit klassischer Materie  
Materialsysteme:
  - klass. Spinmodelle
  - kondensierte Flüssigkeiten
  - Polymere

## (Großes) Quantenrechnen

### I. Wiederholung von Grundbegriffe

(Phasenraum dicht, stat. Operatoren, Dynamik  
Zustandssumme / Ensemble)

### II. Phasentransport

- "meanfield" - einfache Zugänge, Landau-Theorie
- Krit. Phänomene
- Fluktuation, Korrekturen zu "meanfield", Goldstone-Modell
- (entw. : Einfluss eingeborener Unordnung)
- Spinmodelle
  - eigentlich
  - Erkunden als Modelle für magnet. Festkörper
  - generische Modelle für Phasentransition
- Kerr-Flüssigkeiten (z.B. Ethylalkohol)
  - ⋮

als hier: ~~zwei~~ variable Parameter

III. Elemente der Wass. Dichtekontinuumstheorie  
für wechselwirkende Flüssigkeit

IV. Theorie der linearen Antwort  
→ Berechnung von Transportkoeff., Antwortfunkt.  
(Systeme drehen am Gleichgewicht)

(V. Kinetische Gastheorie)  
Relaxation ins Gleichgewicht

Literatur: → UdSatz

- F. Schwabl "Statist. Mechanik"
- H. Plischke / B. Bergersen  
"Equilibrium Statistical Physics"

• E. Stanley, N. Goldenfeld <sup>Übersicht:</sup> - zum Thema Phasenzustände

• Negele / Orland „Quantum Many-Particle-Systems“  
 → sehr gute Zusammenfassung über  
 Adressparameter, gebrochene Symmetrien,  
 Kenta-Phänomene

## I. Grundbegriffe (Wk.)

### I.1. Begriffe

#### Beschreibung des Mikrozustandes

— abhängig von der Art des Systems

### Beispiel

a) klass. Gas aus wechselwirkenden Atomen,  
 im einfachsten Fall keine innere Freiheitsgrade und  
 nur eine Teilchenart

$$\text{Mikrozustand: } \left\{ \begin{array}{l} \{q^N\} = q_1, \dots, q_N \quad \text{Verallgemeinerte} \\ \{p^N\} = p_1, \dots, p_N \quad \text{Koordinaten} \end{array} \right.$$

$$\text{Mikroij: } \Gamma = \{q^N\}, \{p^N\} = \Gamma(\epsilon)$$

↳ Konfiguration im Phasenraum  
 zur Zeit  $\epsilon$

Klass  
Hamilton Funktion:  $H(\Gamma, t)$   
 $= H(\{q^N\}, \{p^N\}, t)$

b) Spinsysteme

z.B. Ising-Spins

$S_i = \pm \frac{1}{2} \Rightarrow$  zwei Einstellmöglichkeiten  
 $\uparrow$   
 Spin-Quantenzahl

Mikrozustand  $\{S^N\} = S_1, \dots, S_N$

$S_i = \pm 1$

Hamiltonian:  $H = - \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} J_{ij} S_i S_j$   
 (Kopplungsmatrix)

(z.B.  $J_{ij} = \frac{J}{N} \rightarrow$  Ising-Modell)

Beispiel für ein semiklass. System.

$H$  ist klassisch, Quantenmechanik setzt in der  
 Distribution der Spineinsätze!

c) Quantenmechanisches System

Fermionische oder Bosonische Systeme!  
(Pauli-Prinzip)

Mikrozustände:  $|\psi^N\rangle$  N-Teilchen-Zustand im Hilbertraum  
 (Symmetrie hängt ab davon, (gegebene Vertauschung)  
 ob man Fermionen oder Bosonen behandelt.

alternativ: Permutation Zahl darstellen

Für das Folgende (Def. von Mittelwert)  
 spezifizieren wir auf klass. Fluid, Mikrozustand  $\Gamma$

Wie würde man eine makroskopische Größe bestimmen?

Naheliegender Weg: Zeitmittel

$$\langle A \rangle_t = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} dt A(q^N, p^N, t)$$

(intensivierende Größe)

$T$  sollte groß sein, damit das Ergebnis unabhängig vom Anfangszustand zu Zeit  $t_0$  ist



Berechnung?

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

es gilt (Hamilton)

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Folgerung:  $\frac{dH}{dt} = \underbrace{[A, H]}_{\text{Poissonklammer}} + \frac{\partial H}{\partial t}$

$$\left( \sum_{i=1}^N \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right)$$

Aus theoret. Sicht ist aber die Auslösung des Zeitmittel für ein großes System praktisch unmöglich!

a) man hat sehr viele gekoppelte Bewegungsgleichungen!!

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u(N_i, N_j) \quad \text{Körperpotential}$$

$\Rightarrow$  Kopplung!

b) Unvollständige Informationen über die Anfangsbedingungen!!  $(q_i(t=0), p_i(t=0))$

Lösung ist höchstens numerisch mögl. für Modellsysteme

<sup>Netzwerke</sup>  
(Computersimulation)  
Molekulardynamik

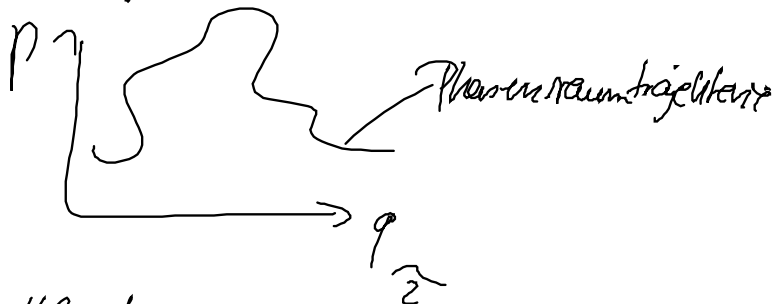
z.B.  $N \sim 1000 - 10000$

Thermodyn. Comes nicht immer gut gedeutet!

## I.2. Idee des statist. Ensembles (Gibbs)

Betrachte Bewegung im Phasenraum,  
der Entfaltung halte in einer Dimension: (1 Freiheitsgrad)

$$\Gamma = (q, p)$$



Zeitmittelwert

$$\langle A \rangle_{\Gamma} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt A(\Gamma(t))$$

approximieren das  
Integral durch  
Summe

$$= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} (A(\Gamma(t_1)) + A(\Gamma(t_2)) + \dots + A(\Gamma(t_n)))$$

Idee: Wenn man weiß, wie häufig sich das System  
in einem Segment des Phasenraums  $d\Gamma = dq dp$   
aufhält, dann könnte man die Mittelwert selbst  
angeben

$\Rightarrow$  interessant ist die Verteilung der Mikrozustände

Zentraler Gedanke von Gibbs (<sup>Arbeit</sup> 1870-1900)

Betrachte statt des einzelnen Systems und seiner  
Zustandsmittelwerte eine Vielzahl gleichartiger, entkoppelter  
Systeme zur selben Zeit!