Index

θ-Bedingungen, 326
ϵ-Entwicklung, 240
λ-Punkt, 140

adiabatisch, 3
Adsorption
    surface excess, 163
Adsorptions
    -gleichgewicht, 161
    -isotherme, 164
    -wärme, 161, 167
Aggregationszahl, 36
Aktivität, 28, 267
Aktivitätskoeffizient, 28
Amphiphile, 35
Attraktor, 250
    seltsamer, 253
Ausdehnungskoeffizient
    thermischer, 10
ausgeschlossenes Volumen, 84

Besetzungszahl, 72
bifurcation, 250
Binodale, 46
Boltzmann-
    Konstante, 57
    Transportgleichung, 61
Born-Haber-Zyklen, 55
Born-Oppenheimer-Näherung, 156
Bose-Einstein-Kondensation, 138
Bosonen, 72, 131
Boyle-Temperatur, 86
bulk, 104

Chaos, 249
    deterministisches, 253
charakteristisches Verhältnis, 290, 312
chemisches Potenzial, 23–26, 28, 29, 31, 35, 41, 51, 53, 84, 85, 154, 177, 178, 180–182, 184, 185, 267, 335
    chemische Stabilität, 45
    Computersimulation, 177, 335
    Kopplungsparameter-Methode, 178
    Widom-Methode, 178
Clapeyronsche Gleichung, 41, 42
Clausiussche Ungleichung, 15
Cluster, 244
    -entwicklung, 82
coarse graining, 235, 237
Computersimulation
    Abschneideradius, 103
    Barostaten für MD, 120
    coarse graining, 100
    Doppelradienmethode, 125
    empirische Kraftfelder, 124
    Ensemble für MD
        kanonisches, 119
        mikrokanonisches, 119
    Ergodizität, 61
    Ewald-Summation, 127
    finite size effects, 107
    Kontinuumskorrektur, 104
    Korrelations
        -funktion und Standardfehler in Computersimulationen, 113
        -zeit, 113
    minimum image, 104
    Molekulardynamik, 60, 61, 88, 90, 163, 177, 178, 181, 186, 188, 265, 269
    Monte Carlo, 61, 100, 114, 164, 177, 221, 255, 332
        μVT-Ensemble, 267
        NPT-Ensemble, 266
        NVT-Ensemble, 255, 263

Akzeptanzkriterium, 259
Akzeptanzrate, 265, 266
biased, 264, 270
detailed balance, 260, 262, 264, 265
Ergodizität, 223, 264, 265
Hysterese, 223
Integration, 178
Metropolis-Algorithmus, 222
Metropolis-Kriterium, 261
non Boltzmann sampling, 271, 333
preferential sampling, 264
Rosenbluth-Faktor, 334
Rosenbluth-Methode, 271, 332
Rosenbluth-sampling, 332
umbrella sampling, 271, 272
Nachbarliste, 125
Relaxationszeit, 116
Thermostaten
Berendsen, 115
Nosé-Hoover, 116
Thermostaten für MD, 115
united atom-Modell, 100, 299
Valenzpotenzial, 99
Verlet-Algorithmus, 101
leap frog-Version, 102
velocity-Version, 103
Zellmultipol-Methode, 126
critical micelle concentration, 36
cummunal entropy, 176

Daltonsches Gesetz, 26
deBroglie-Wellenlänge, 66
Debye
-Modell, 147
-Temperatur, 148
Destillation, 47
Dichteoperator, 60, 68, 92
Diffusion
ballistisches Regime, 186
Diffusionsgleichung, 186, 323
Einstein-Relation, 185, 289
Green-Kubo-Beziehungen, 188
Selbstdiffusionskoeffizient, 185
Dimensionsanalyse, 231
Dispersionsrelation, 149
akustischer Zweig, 151
optischer Zweig, 151
Domänenwand, 239
Dulong und Petit
Regel von, 147

Einstein
-Modell, 147
-Relation, 185
empirische Potenzialfunktionen, 299
Ensemble, 178
-mittelwert, 59
kanonischer, 94
mikrokanonischer, 94
großkanonisches, 130, 131, 165, 207
kanonisches, 60, 62, 63, 128, 131, 223
mikrokanonisches, 63, 64, 131, 256
verallgemeinertes, 128
Verknüpfung von *NVE* mit *NVT*, 95
Verknüpfung von *NVT* mit *NPT*, 96
Enthalpie, 5, 6
Entropie, 14
Konfigurationsentropie, 83, 314
mikroskopische Definition, 57
Schwankung, 44
thermodynamische Definition, 15
und Informationsdefizit, 81
Ergodenhypothese
Quasi-, 60
Ergodentheorie, 61
Ergodizität, 223
Euler-Theorem, 24
extensiv, 3, 25, 37, 128, 328
Exzessgrößen, 27

Faltungssatz, 173
Fehler
-balken, 178
statistischer, 107
systematischer, 107
Feigenbaum-Zahl, 251
Fermi
-Energie, 133, 153
-Kante, 154
-Niveau, 153
-Oberfläche, 153
Fermionen, 72, 131
-gas
ideales, 132
finite size
effects, 224, 247
scaling, 247
Fixpunkt, 236, 250

Flory-Huggins-Gleichung, 319
Fluktuationen, 191
Fluktuationskorrelationen, 228
Flüssigkristalle
    lyotrope, 210
    Polymer-, 331
    thermotrope, 210
Formfaktor
    atomarer, 175
Fraktal, 248, 253
    fraktale Dimension, 248, 253
freie Energie, 17
freie Enthalpie, 17
freies Volumen, 176
Freiheitsgrade
    in der Mechanik, 90
    in der Thermodynamik, 40
Frequenzspektrum, 254
Fugazität, 28, 133
Fugazitätskoeffizient, 28
Fundamentalgleichung, 17
Funktionalintegral, 197

Gas
    ideales, 10, 19, 23, 26, 50, 80, 81, 89, 90, 136, 202
        Quanteneffekte, 75
    reales, 28, 29, 51, 81, 84, 85, 89, 155
        Quanteneffekte, 77
Gefrierpunktserniedrigung, 31
Gesetz der korrespondierenden Zustände, 54
Gibbs-Duhem-Gleichung, 25, 182, 184
Gibbs-Entropie-Gleichung, 129
Gibbs-Helmholtz-Gleichung, 31
Gibbs-Paradox, 71
Ginzburg-Kriterium, 229
Ginzburg-Landau-Entwicklung, 218
Gittergas, 83, 216, 314
Gleichgewicht, 2, 3, 15, 16, 36, 44, 56, 58, 60, 64, 107, 128, 176, 178, 191, 209, 216, 223, 262, 264, 270, 322
    chemisches, 26
Gleichgewichtskonstante, 35
Gleichverteilungssatz, 90, 103, 199
    verallgemeinerter, 87
Green-Kubo-Beziehungen, 188
Grenzverteilung, 258
Grenzzyklen, 250

H
    -Funktion, 111
    -Theorem, 61, 112
Hamiltonsche Gleichungen, 60, 88, 117
Hauptträgheitsmomente, 156
Hebelgesetz, 46
Hellmann-Feynman-Elektrostatik-Theorem, 123
Henry-Konstante, 29, 166
Henrysches Gesetz, 29
homogene Funktion, 24
    verallgemeinerte, 231

Impulsdarstellung, 66
innere Energie, 5
integrierender Faktor, 16
intensiv, 3, 25
Inversionstemperatur, 9
irreversibler Prozess, 3
isenthalpisch, 8
Ising-Modell
    1D-, 237, 272, 291
    2D-, 221, 239, 314
    3D-, 231
isochor, 3
isotherm, 3

Jellium-Modell, 153
Joule-Thompson
    -Effekt, 8
    -Koeffizient, 8

kanonische Transformation, 90
Komponente, 1
Kompressibilität, 220
    isentropische, 19
    isotherme, 10, 229
    mechanische Stabilität, 45
konforme
    Abbildung, 241
    Invarianz, 241
Kontaktenthalpie, 318
Kontinuumsgrenzfall, 201, 229, 233, 240, 246, 327
Koordinationszahl, 316
Kopplungskonstanten, 234, 235
Korrelationsfunktion
    und Polymerkonformation, 298
    1D-Ising-Modell, 294

der Dichtefluktuationen, 169
der Fluktuationen des Ordnungsparameters, 228
Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion, 169, 170
direkte Korrelationsfunktion, 173
Geschwindigkeitsauto-, 187
Paarkorrelationsfunktion, 172
Selbstkorrelation, 170
Korrelationslänge
1D-Ising-Modell, 295
der Fluktuationen des Ordnungsparameters, 229, 231, 233, 236, 247
kosmische Hintergrundstrahlung, 144
Kreisel
linearer, 156
sphärischer, 156
symmetrischer, 156
kritische
Phänomene, 203
Temperatur, 206
kritischer
Exponent, 206, 231
Punkt, 216, 233, 236, 240, 241, 243
binäre Mischung, 46
van der Waals-Gleichung, 51
Kryopumpen, 163
kumulativer Mittelwert, 178, 249, 274
Kältemaschine, 9

Lagrangescher
Multiplikator, 208, 330
Langevin-Funktion, 209
Laplacetransformation, 92
Legendretransformation, 98, 129
Lennard-Jones
-Einheiten, 178
-Potenzial, 85
Liouvillesches Theorem, 60, 116
logistic map, 249, 251, 253, 254
Lyapunov-Exponent, 253
lyotrop, 210
Löslichkeit, 32

Makrozustand, 2, 191
Maple, 91
Markov-Ketten, 259
Massenwirkungsgesetz, 35
Mathematica, 38, 54, 86, 87, 91, 138, 160, 212, 223, 224, 228, 244, 245, 251, 252, 262, 275, 292, 301
Maxwell
-Konstruktion, 53
-Relationen, 18, 24
-Verteilung, 61, 111
mean field-Näherung, 53, 203, 204, 211, 217, 219, 220, 230, 240, 243, 316
Membran, 196
Metastabilität, 46
Mikrozustand, 2, 56, 59, 62, 128, 191
Mischung
binäre, 46
ideale, 27
reale, 28
von Gasen, 84
Mizelle, 35
Multipolentwicklung, 126

nematisch, 210
Nernstscher Verteilungssatz, 33
Normalmoden, 146
-analyse, 146

obere kritische Dimension, 230, 240
Oberflächenspannung, 5, 197
Ordnungsparameter, 109, 216
-fluktuationen, 228
Ornstein-Zernike-Integralgleichung, 173
Ortsdarstellung, 66
osmotischer Druck, 31

Paarkorrelationsfunktion
radiale, 104
paarweise
additive Kräfte, 124
Additivität, 91
Pauli-Ausschließungsprinzip, 73
Peierls-Instabilität, 200
Perkolation, 244
bond, 244
kritischer Exponent, 247, 248
site, 244
Perkolationsschwelle, 246
Perpetuum Mobile, 5
Perron-Frobenius
Theorem von, 292
Persistenzlänge, 290, 331
Phase, 1

Phasen
-diagramm, 40
-diagramm einer binären Mischung, 47
-entmischung, 46
-grenzlinie, 41
-koexistenz, 40
-regel, 40
-übergang, 41, 203
Ordnung, 42
Phasenraum, 2, 60, 86, 99, 255
-dichte, 60, 116
Phonon, 146
Photon, 141
Plancksche Strahlungsformel, 144
Polymer, 36, 289, 331
-konformation, 289
End-zu-End-Vektor, 290
frei rotierende Kette, 313
ideales, 290
Kontinuumsmodell, 332
Mischungsenthalpie, 318
Mischungsentropie, 317
Netzwerke, 321
Netzwerkelastizität, 321
Selbstwechselwirkung, 324
potential of mean force, 177

Raoultsches Gesetz, 26
Rayleigh und Jeans
Gesetz von, 144
Reaktionsgleichung, 35
Reibungskraft, 115
Relaxationszeit, 107, 189
Renormierungsgruppe, 233, 235
reversibler Prozess, 3
Reynolds-Zahl, 254
rotational isomeric state, 296

Sackur-Tetrode-Gleichung, 81
scaled particle theory, 185
scaling fields, 236, 241
Schrödinger-Gleichung, 2, 65, 327, 328
schwarzer Körper, 141
Selbstähnlichkeit, 246, 253
self consistent field-Methode, 291
Siedepunktserhöhung, 30
Skalen
-gesetz, 229, 231, 232, 247, 249
-hypothese, 230
-invarianz, 233, 243
-transformationen
homogene, 240
konforme, 241
Spin-Statistik-Theorem, 73
Spinodale, 46
spontane Symmetriebrechung, 223
Spur, 68
Stabilität
chemische, 45
mechanische, 45, 51
thermische, 45
thermodynamische, 41, 44
Standardfehler des Mittelwerts, 113, 178
Stefansches Gesetz, 144
Stirling-Approximation, 80
stochastische Matrix, 260
Streu
-amplitude, 174
-vektor, 174
Struktur-Eigenschaft-Beziehung, 99
Strukturfaktor, 175
stöchiometrischer Koeffizient, 35
Suprafluidität, 140
Suszeptibilität
isotherme, 220, 232
System, 1
geschlossen, 1
isoliert, 1
offen, 1
Subsystem, 1

Tenside, 36
thermische Wellenlänge, 70
thermodynamische Variablen, 2
thermodynamischer Limes, 2, 131
thermodynamisches Potenzial, 2
thermotrop, 210
Torsionswinkel, 296, 332
Transfermatrix, 291
Transportkoeffizient, 188
trial function-Methode, 208
Tripelpunkt, 41

Übergangs
-temperatur, 204
-wahrscheinlichkeiten, 257
unbinding transition, 202
Universalität, 222, 289

-sklasse, 222, 247
ununterscheidbar, 71, 81, 84, 207, 315

van der Waals
-Zustandsgleichung, 50
kritische Exponenten, 211
kritischer Punkt, 51
van't Hoffsche Gleichung, 31, 34
Virial, 89
-entwicklung, 29, 83
-koeffizient
dritter, 83
harte Kugeln, 183, 185
zweiter, 10, 83
-satz, 88
Vollständigkeitsrelation, 66
Volumenbruch, 184

Wasser
auf Calcit, 269
Diffusionskoeffizient, 188
Phasendiagramm, 41
Wellen
-funktion, 65
-vektor, 66
Widom-Methode, 177, 335
Wiensches Verschiebungsgesetz, 144
Wirkungsgrad, 13
Carnotscher, 16
Wärmekapazität, 219
isobar, 6
isochor, 6
thermische Stabilität, 45

Zelltheorie, 176
Zustand
Gemisch, 67
reiner, 67
Zustandsdichte, 65
Zustandsfunktion, 3, 5, 6
und vollständiges Differenzial, 3
Zustandsgleichung, 10
scaled particle theory, 181
und Cluster-Entwicklung, 82
van der Waals, 50
Zustandssumme, 234, 292
N-Teilchen, 70
1-Teilchen, 70, 155
Bosonen, 131
Fermionen, 131
großkanonische, 130
kanonische, 63, 95
Quantenkorrekturen, 75
mikrokanonische, 92, 95
orientierbarer Teilchen, 203, 207
und Transfermatrix, 291
und Zelltheorie, 176
und *SCF*-Methode, 326