

Inhaltsverzeichnis

1	Thermodynamische Grundlagen	1
1.1	Einige Variablen und Begriffe	1
1.2	Konstanten, Einheiten, Konventionen und Tabellen	4
1.3	Erster Hauptsatz	4
1.4	Zweiter Hauptsatz	14
1.5	Dritter Hauptsatz	55
1.6	Eine Brücke zur Statistischen Mechanik	56
2	Ensembles der Statistischen Mechanik	59
2.1	Kanonisches Ensemble	62
2.2	Mikrokanonisches Ensemble	92
2.3	Verknüpfung verschiedener Ensembles	95
2.4	Molekulardynamik-Simulation	99
2.5	Verallgemeinerte Ensembles	128
3	Systeme ohne direkte Wechselwirkung	141
3.1	Photonengas	141
3.2	Phononengas	146
3.3	Elektronengas	153
3.4	Verdünnte atomare und molekulare Gase	155
3.5	Adsorptionsgleichgewicht verdünnter Gase	161
4	Klassische Fluide	169
4.1	Struktur	169
4.2	Streuung	173
4.3	Spezielle Konzepte	176
4.4	Molekulare Dynamik	185
5	Fluktuationen	191
5.1	Einstein-Fluktuationstheorie	191
5.2	Thermisch fluktuierende Membran	196
5.3	Entropische Kräfte durch räumliche Beschränkung	201
6	Phasenübergänge und kritische Phänomene	203
6.1	<i>Mean field</i> -Orientierungsphasenübergänge	203

6.2	Der Ordnungsparameter	216
6.3	Ginzburg-Landau-Entwicklung der freien Energie	217
6.4	Ordnungsparameterentwicklung in homogenen Systemen	218
6.5	Fluktuationskorrelationen nahe T_c	228
6.6	Die Skalenhypothese	230
6.7	Die Renormierungsgruppe	233
6.8	Konforme Invarianz	240
6.9	Skaleninvarianz ohne Hamilton-Funktion	243
7	Monte Carlo-Methoden in der Statistischen Mechanik	255
7.1	Markov-Ketten und Metropolis-Algorithmus	256
7.2	Metropolis-Algorithmus im NVT -Ensemble	263
7.3	Simulation von atomaren Systemen	264
7.4	Monte Carlo-Schritte im NPT -Ensemble	266
7.5	Monte Carlo-Schritte im μVT -Ensemble	267
7.6	<i>Bias</i> -Monte Carlo und <i>non Boltzmann sampling</i>	270
8	Konformationen linearer Polymere	289
8.1	Transfermatrix und <i>RIS</i> -Approximation	291
8.2	Gitterstatistik von Polymersystemen	314
8.3	Elastizität von Polymernetzwerken	321
8.4	Die Flory-Berechnung des Exponenten ν	324
8.5	Die <i>self consistent field</i> -Methode	326
8.6	Rosenbluth-Monte Carlo für Oligomere	332
	Literaturverzeichnis	337
	Index	343