

Pressemitteilung**Universität Bayreuth****Christian Wißler**

30.03.2022

<http://idw-online.de/de/news791050>Forschungsergebnisse, Wissenschaftliche Publikationen
Physik / Astronomie
überregional**Lottoglück im Licht der Physik: Bayreuther Forscher*innen präsentieren Theorie zur Dynamik von Vielteilchensystemen**

Physiker*innen der Universität Bayreuth zählen international zu den Pionieren der Powerfunktionaltheorie. Durch diesen neuen Ansatz wird es erstmals möglich, die Dynamik von Vielteilchensystemen im Zeitverlauf präzise zu beschreiben. Bei den Teilchen kann es sich um Atome, Moleküle oder größere für den Menschen unsichtbare Teilchen handeln. Die neue Theorie verallgemeinert die klassische Dichtefunktionaltheorie, die nur für Vielteilchensysteme im thermischen Gleichgewicht gilt. In den „Reviews of Modern Physics“ präsentiert ein Forschungsteam unter der Leitung von Prof. Dr. Matthias Schmidt die Grundzüge der maßgeblich in Bayreuth entwickelten und ausgearbeiteten Theorie.

Ein Vielteilchensystem befindet sich im thermischen Gleichgewicht, wenn die Temperatur in seinem Inneren ausgeglichen ist und keine Wärmeflüsse stattfinden. Dies bedeutet nicht notwendigerweise, dass sich das System in einem starren Ruhezustand befindet. Manche Vielteilchensysteme lassen sich auch mit einer Lottotrommel vergleichen, die mit konstanter Geschwindigkeit rotiert. Die Kugeln haben darin viel Bewegungsfreiheit und springen ungeordnet hin- und her. In einem flüssigen Vielteilchensystem sind die Teilchen erheblich dichter als in der Trommel gepackt, weshalb sie in kurzen Entfernungen und Zeitabständen ständig aneinanderstoßen. Wesentliche Eigenschaften solcher Systeme lassen sich mit der Dichtefunktionaltheorie lückenlos und präzise beschreiben – vorausgesetzt, ein thermisches Gleichgewicht des Systems ist gegeben.

Im Fall der Lottotrommel geht dieses Gleichgewicht verloren, sobald sich die gleichmäßige Rotation allmählich verlangsamt und die Trommel den Rückwärtsgang einlegt. Dann rollen die Kugeln mit den Gewinnzahlen auf eine Schiene im Inneren der Trommel und werden schließlich ausgeworfen. Um solche Prozesse exakt und lückenlos erfassen zu können, bedarf es der Powerfunktionaltheorie: Sie übersetzt das Glück der Gewinner*innen in die Sprache der Physik.

„Die klassische Dichtefunktionaltheorie ist eine sehr in die Tiefe gehende und zugleich ästhetisch ansprechende Theorie. Sie ist in der Lage, die oftmals sehr komplexen Prozesse zu beschreiben und aufeinander zu beziehen, die sich in einem System während seines thermischen Gleichgewichts abspielen. Dazu zählen beispielsweise Phasenübergänge, Kristallisationen oder auch Phänomene wie die Hydrophobie, die immer dann vorliegt, wenn bestimmte Teilchen den Kontakt mit Wasser meiden. Häufig sind solche Prozesse von großer technologischer oder biologischer Relevanz. Die Eleganz und Leistungsfähigkeit der Dichtefunktionaltheorie hat uns in Bayreuth seit zehn Jahren angespornt, nach Wegen zu suchen, um Vielteilchensysteme im thermischen Ungleichgewicht einer ebenso präzisen und eleganten physikalischen Beschreibung zugänglich zu machen. Forschungspartner an der Universität Fribourg in der Schweiz haben sich mit wichtigen Studien an dieser Suche beteiligt. So ist aus unseren gemeinsamen Anstrengungen die Powerfunktionaltheorie hervorgegangen, mit der die Dichtefunktionaltheorie auf zeitabhängige Prozesse ausgeweitet wird“, berichtet Prof. Dr. Matthias Schmidt, der an der Universität Bayreuth einen Lehrstuhl für Theoretische Physik innehat.

In die jetzt veröffentlichte Präsentation der Powerfunktionaltheorie (PFT) sind Forschungsarbeiten eingeflossen, die vor allem in zwei Profildfeldern der Universität Bayreuth angesiedelt waren: die Nichtlineare Dynamik und die Polymer- und

Kolloidforschung. Das Forschungszentrum für Wissenschaftliches Rechnen an der Universität Bayreuth hat viele dieser Studien wesentlich unterstützt und gefördert. Darin wurde die im Jahr 2013 erstmals vorgeschlagene Powerfunktionaltheorie getestet, weiterentwickelt und auf konkrete physikalische Probleme angewendet. Die Untersuchungen befassten sich unter anderem mit aktiven Teilchen, die sich aus eigenem Antrieb fortbewegen können, mit Scher- und Fließphänomenen in Kolloiden und Flüssigkeiten oder mit der mikroskopischen Struktur von Flüssigkeiten. Entscheidend für die erfolgreiche Entwicklung der PFT war, dass auf diese Weise die in Vielkörpersystemen wirkenden Kräfte und ihre Zusammenhänge mit beobachtbaren Phänomenen überzeugend hergeleitet werden können. Hierbei erwiesen sich Methoden der Computersimulation und Anwendungen der Statistischen Mechanik oft als unentbehrlich.

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Prof. Dr. Matthias Schmidt
Theoretische Physik II
Universität Bayreuth
Telefon: +49 (0)921 55-3313
E-Mail: matthias.schmidt@uni-bayreuth.de
Web: www.mschmidt.uni-bayreuth.de

Originalpublikation:

Matthias Schmidt: Power functional theory for many-body dynamics. *Reviews of Modern Physics* 94, 015007 (2022). DOI: <https://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.94.015007>

URL zur Pressemitteilung: <https://www.mschmidt.uni-bayreuth.de/powerfunctional.html> - weitere Informationen zur Powerfunktionaltheorie



Das Bayreuther Forschungsteam: Sabrina Süß, Sophie Hermann, Tobias Eckert, Florian Sammüller, Nico Stuhlmüller, Daniel de las Heras und Matthias Schmidt (v.l.n.r., nicht im Bild: Johannes Renner).
(c) Daniel de las Heras.