

Theoriekolloquium

Am **19. Mai 2011** um **14.15 Uhr** in **W2 1-143** hält

Herr Dr. Werner Krauth (Paris)

einen Vortrag mit dem Titel

Der Schmelzübergang in harten Scheiben

Das Modell der harten Kugeln (in zwei Dimensionen: der harten Scheiben) hat die Entwicklung der statistischen Mechanik und der "computational physics" nachhaltig beeinflusst. Nach grundlegenden Arbeiten von Daniel Bernoulli bis zu Ludwig Boltzmann wurde sowohl die Monte Carlo Simulation als auch die Molekulardynamik zuerst im Modell der harten Scheiben angewandt. Numerische Simulationen für harte Scheiben erlaubten auch zum ersten Mal, einen zweidimensionalen Schmelzübergang nachzuweisen, obwohl diese Systeme keine kristalline Phase besitzen können. Hunderte theoretischer, experimenteller und numerischer Arbeiten vermochten allerdings nicht, die Natur des Schmelzübergangs in diesen Systemen zu ergründen: Der Phasenübergang erster Ordnung zwischen der Flüssigkeit und dem Festkörper (wie in drei Dimensionen) und das Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson, Young (KTHNY) Szenario mit kontinuierlichen Übergängen zwischen einer flüssigen, einer hexatischen und einer festen Phase wurden hauptsächlich diskutiert. Im Laufe der letzten Jahre haben wir uns intensiv mit der Entwicklung neuer Computeralgorithmen für harte Kugeln und ähnliche Systeme beschäftigt. Einer der Algorithmen hat nun ermöglicht nachzuweisen, dass harte Scheiben tatsächlich eine hexatische Phase besitzen, aber dass der Übergang von der Flüssigkeit in diese hexatische Phase erster Ordnung ist.

In diesem Vortrag führe ich in die allgemeine Thematik ein, präsentiere neue (und alte) Monte Carlo Algorithmen, und diskutiere Ergebnisse, Einsichten, und mögliche Verallgemeinerungen.

Interessierte sind herzlich eingeladen.

gez. Prof. Dr. Alexander Hartmann