

Der Faktor Zeit

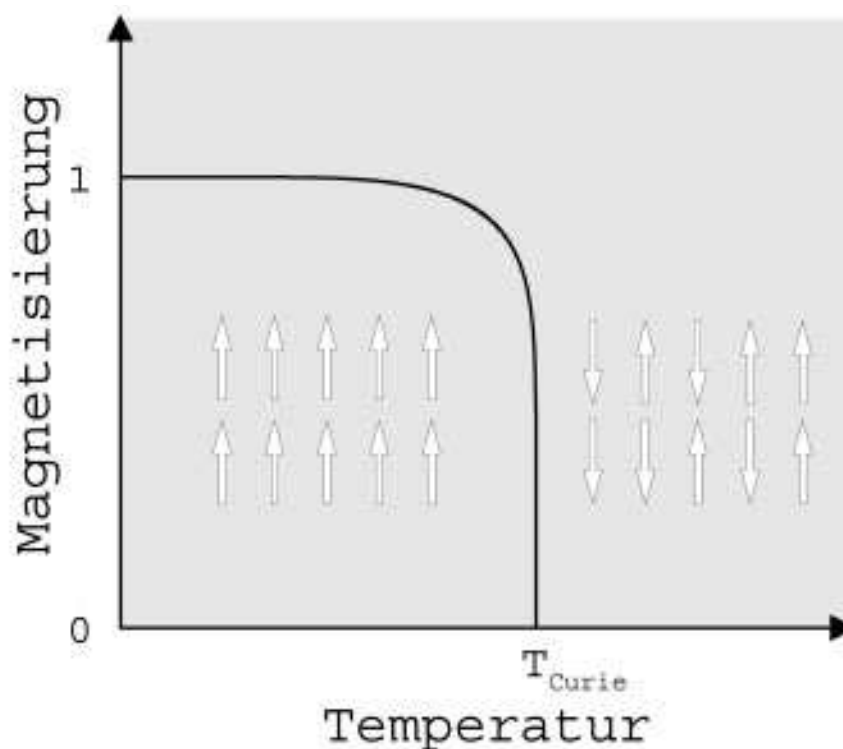
Theoretische Physiker interessieren sich für alternde Materialien

Von Prof. Dr. Wolfhard Janke, Institut für Theoretische Physik

„Anti-Aging“-Programme sind in aller Munde, und tatsächlich betrifft das Altern des biologischen Gewebes uns alle. Altern spielt aber auch eine wichtige Rolle in anorganischen Materialien. Prototypen dafür sind strukturelle Gläser und andere glasartige Stoffe wie Fenstergläser und Spingläser. Technologisch überaus relevant sind mit fortschreitendem Altern auftretende Materialfehler, die oft als „Materialermüdung“ umschrieben werden und zum Beispiel bei Flugzeugen zu fatalen Fehlfunktionen führen können.

Diese Problematik ist sicher eher ein wichtiges Teilgebiet der Ingenieurwissenschaften, aber auch viele der physikalischen Grundlagen sind noch nicht sehr gut verstanden. Dies gilt selbst für Alterungsphänomene in vergleichsweise einfachen magnetischen Substanzen. Die mit dem Altern verbundenen Fragestellungen bilden ein Teilgebiet der Nichtgleichgewichtsthermodynamik, die zur Zeit von Physikern weltweit intensiv erforscht wird. Dabei spielen Experimente, theoretische Modelle und Computersimulationen eine wichtige Rolle und ergänzen sich gegenseitig.

Bei der theoretischen Beschreibung reichen die mathematischen Methoden von allgemeinen feldtheoretischen Ansätzen bis hin zu speziellen Symmetriebetrachtungen. Selbst für die einfachsten Modelle sind diese theoretischen Überlegungen jedoch nicht exakt. Um ihre Genauigkeit zu überprüfen, werden deshalb numerische Computerexperimente durchgeführt. Gegenüber „richtigen“ Experimenten im Labor, wo in aller Regel viele komplexe Vorgänge berücksichtigt werden müssen, hat dies einen entscheidenden Vorteil: Es können genau dieselben strukturell einfachen Modelle der theoretischen Beschreibung untersucht werden, was gezielte Tests der Zuverlässigkeit der mathematischen Näherungsverfahren erlaubt.



Magnetisierungskurve als Funktion der Temperatur. In der ferromagnetischen Phase für Temperaturen unterhalb der Curietemperatur T_{Curie} zeigen alle Spins tendenziell in dieselbe Richtung, während für hohe Temperaturen die Spinrichtungen zufällig verteilt sind.
Abbildung: Institut für Theoretische Physik

Bei Modellen für magnetische Substanzen geht man von der Vorstellung aus, dass miteinander wechselwirkende magnetische Momente („Elementarmagnete“) an den Gitterplätzen eines Festkörpers lokalisiert sind. Im einfachsten Fall werden die magnetischen Momente durch klassische, eindimensionale Spins oder Pfeile mit zwei entgegengesetzten Einstellungsmöglichkeiten (Spinrichtung nach oben oder unten) simuliert – das Ising-Spinmodell (s. Abb. oben).

Im Computerexperiment präpariert man nun ein solches Spinmodell zunächst für hohe Temperaturen in einem vollkommen

ungeordneten nichtmagnetischen Zustand, wo die Spinrichtungen vollkommen zufällig verteilt sind, und schreckt es dann plötzlich auf eine tiefe Temperatur ab. Die qualitative Bedeutung von „warm“ und „kalt“ wird dabei durch die sogenannte Curietemperatur festgelegt, unterhalb derer die Spins eine der beiden Pfeilrichtungen bevorzugen und so die Magnetisierung erzeugen.

Bei dieser speziellen Temperatur findet also die Phasenumwandlung in einen Ferromagneten statt. In der Natur und auch in Computersimulationen wird der ferromagnetische Gleichgewichtszustand aber nicht

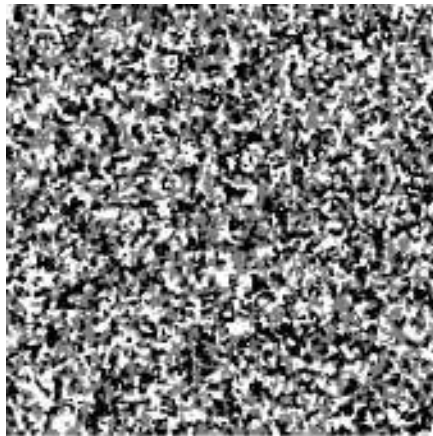
sofort angenommen, sondern erst nach einer u.U. sehr langen Relaxationszeit. Kurz gesagt ist die Fragestellung nun, aufgrund welcher Mechanismen und auf welchen Zeitskalen dieser Gleichgewichtszustand angestrebt wird.

In Computersimulationen wird der zeitliche Verlauf oft durch eine vereinfachte, sogenannte „Monte-Carlo“-Dynamik modelliert, bei der die Richtungen der Spins nach bestimmten Regeln hin und her geflippt werden. Diese Regeln sind so konstruiert, dass bei sehr tiefen Temperaturen alle Spins möglichst in dieselbe Richtung zeigen möchten. Mit ansteigender Temperatur lässt die Tendenz der Spins, sich ihrer lokalen Umgebung anzupassen, immer mehr nach und ihre Richtungen flippen schließlich vollkommen unabhängig voneinander hin und her.

Auch wenn diese Dynamik stark vereinfacht ist (und deshalb oft als Pseudodynamik bezeichnet wird), kann sie doch viele realistische Prozesse in ihrem qualitativen Verhalten beschreiben. Dabei nutzen die numerisch arbeitenden Physiker eine wichtige Gesetzmäßigkeit aus, die besagt, dass viele qualitative Eigenschaften eines statistischen Systems nicht von den Details der Wechselwirkungen und der verwendeten Dynamik abhängen. In der Nähe der Curie-Temperatur ist diese Eigenschaft unter dem Stichwort Universalität bekannt, die unter anderem dafür verantwortlich ist, dass Phasenumwandlungen in vollkommen verschiedenen physikalischen Systemen (zum Beispiel die Phasenumwandlung von flüssig nach gasförmig und der eben skizzierte Magnetisierungsübergang) sehr ähnliche Eigenschaften aufweisen.

Dies ist auch genau der Grund dafür, warum man sich oft mit den einfachsten Modellen begnügen kann. Für die zeitliche Entwicklung des Zustands eines Systems spielt seine Größe eine ganz wesentliche Rolle, denn für ein unendlich gedachtes System wird der idealisierte Gleichgewichtszustand in keiner endlichen Zeit erreicht.

Was passiert nach dem Abschrecken? Die anfangs noch in zufällig verteilte Richtungen zeigenden Spins fangen zunächst an, sich in Clustern anzuordnen, in denen eine bestimmte Spinrichtung dominiert. Diese Cluster wachsen dann im Laufe der Zeit, was die Nichtgleichgewichtsdynamik auf dem Wege zum Gleichgewichtszustand bestimmt (siehe Abbildungen). Die damit verbundenen Alterungseigenschaften sind am deutlichsten in Größen zu beobachten,



Zeitliche Entwicklung (von oben nach unten) der Clusterbildung nach dem Abschrecken eines vollständig ungeordneten Zustands auf eine Temperatur deutlich unterhalb der Curietemperatur ($T \sim \frac{T_{\text{Curie}}}{2}$).

Die drei Farben weiß, grau und schwarz visualisieren die drei erlaubten Spinrichtungen im 3-Zustand Potts-Spinmodell.

Institut für Theoretische Physik

bei denen Eigenschaften zu zwei verschiedenen Zeiten miteinander korreliert werden.

Im Gleichgewicht hängen derartige Größen nur von der Zeitdifferenz ab. Während der Alterungsphase hingegen ist dies nicht der Fall. Hier ist insbesondere der zeitliche Verlauf dieser Größen als Funktion der (späteren) Zeit t langsamer für größere „Wartezeiten“ s nach dem Abkühlen. Dieses Phänomen wird gewöhnlich als „Alterung“ bezeichnet: Ältere Proben reagieren langsamer. Die Wartezeit s wird deshalb oft auch als das „Alter“ der Probe seit seiner Präparation bezeichnet. Diese Abhängigkeiten von den beiden Zeiten s und t wurden auch in Leipzig im Rahmen der Diplomarbeit von Eric Lorenz in der Arbeitsgruppe CQT des Instituts für Theoretische Physik umfangreich numerisch untersucht. Dabei konnten die auf Symmetrieüberlegungen beruhenden theoretischen Ansätze zunächst für das Ising-Spinmodell reproduziert und dann der Alterungsprozess auch für allgemeinere (Potts-)Spinmodelle erstmals beobachtet werden. Während der Alterungsphase sind grundlegende Theoreme (z.B. das Fluktuations-Dissipations-Theorem) der Gleichgewichtsthermodynamik verletzt.

Diese Beobachtungen haben zu fruchtbaren neuen theoretischen Ideen geführt, die in Computersimulationen verifiziert werden konnten und zur Zeit in glasartigen und granularen Materialien experimentell untersucht werden. Auf diese Weise kann man also hoffen, dass ein besseres Verständnis des Alterns strukturell einfacher Modelle zu neuen Einsichten in die Phänomenologie von glasartigen Materialien beitragen wird – auch wenn nicht unbedingt mit einem neuen revolutionären „Anti-Aging“-Programm zu rechnen ist.

Das physikalische Problem des Alterns von Materialien war auch eine der zentralen Fragestellungen des 6. NTZ-Workshop on Computational Physics CompPhys05, der am 1. und 2. Dezember 2005 am Institut für Theoretische Physik stattfand.

Weitere Informationen im Internet:
www.physik.uni-leipzig.de/~janke