

# A U S H A N G

---

## FREIE UNIVERSITÄT BERLIN Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

## D I S P U T A T I O N

**Donnerstag, 22. September 2016, 10.00 Uhr**

**Ort: Raum 108/109, Institut für Mathematik  
Arnimallee 6, 14195 Berlin**

**Disputation über die Doktorarbeit von**

**Herrn Animesh Agarwal**

**Thema der Dissertation:  
Path Integral Techniques in Molecular Dynamics Simulations  
of Open Boundary Systems**

**Thema der Disputation:  
Nanothermodynamics:  
A formal approach to study small systems**

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. Chr. Schütte** durchgeführt.

**Abstract:** Thermodynamics of small systems was introduced by Terrell L. Hill, who later coined the term "nanothermodynamics". In nanothermodynamics, the laws of macroscopic thermodynamics are extended to incorporate finite size effects in systems with dimensions in the order of nanometers. The basic idea is to consider "N" replicas of small systems and the ensemble formed by these "N" replicas is assumed to be large enough such that the standard laws of macroscopic thermodynamics hold for the total system. This hypothesis allows for the derivation of "statistical" corrections to the standard equations of thermodynamics for studying small systems.

Die Disputation besteht aus dem o. g. Vortrag, danach der Vorstellung der Dissertation einschließlich jeweils anschließenden Aussprachen.

**Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen**

Der Vorsitzende der Promotionskommission  
Prof. Dr. Chr. Schütte