Dr. M. Bier (bier@is.mpg.de)
M.Sc. H. Bartsch

**Physik der Flüssigkeiten I** **WiSe 2017/18**

---

**5. Übungsblatt** (`http://www.is.mpg.de/dietrich/lehre/PdF`) **19. Dezember 2017**

12. *Struktur eines eindimensionalen Fluids I: Test-Teilchen-Methode*

Betrachten Sie ein eindimensionales Fluid (d.h. $d = 1$), dessen Teilchen über das Square-Shoulder-Potential

$$\beta U(x) = \begin{cases} \beta U_0 & , |x| < \lambda \\ 0 & , |x| \geq \lambda \end{cases} \tag{1}$$

mit $\beta U_0, \lambda \geq 0$ wechselwirken.

Das zugehörige Dichtefunktional sei im Rahmen der 2. Virialnäherung durch

$$\beta\Omega[\varrho] = \int \mathrm{d}x\, \varrho(x)\,(\ln(\varrho(x)\Lambda) - 1 - \beta\mu + \beta V(x)) - \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x'\, f(x-x')\varrho(x)\varrho(x') \tag{2}$$

mit der Mayer-$f$-Funktion $f(x) := \exp(-\beta U(x)) - 1$ approximiert.

(a) Skizzieren Sie $U(x)$ und $f(x)$ als Funktionen von $|x|$.

(b) Leiten Sie die Euler-Lagrange-Gleichung

$$\left.\frac{\delta\beta\Omega[\varrho]}{\delta\varrho(x)}\right|_{\varrho=\varrho_0} = 0 \tag{3}$$

für die Gleichgewichtsdichte $\varrho_0(x)$ her.

(c) Betrachten Sie zunächst den Fall $\beta V(x) := 0$, für den die Gleichgewichtsdichte räumlich konstant ist: $\varrho_0(x) = \bar{\varrho}$. Zeigen Sie, dass dann für jedes chemische Potential $\beta\mu \in \mathbb{R}$ genau eine Lösung $\varrho_0(x) = \bar{\varrho}$ der Euler-Lagrange-Gleichung (3) existiert und bestimmen Sie $\beta\mu$ als Funktion von $\bar{\varrho}$.

(d) Betrachten Sie nun für beliebiges aber festes $x' \in \mathbb{R}$ das externe Potential $\beta V(x) := \beta U(x - x')$ und leiten Sie damit mit Hilfe von Gl. (3) eine Gleichung für die Paarverteilungsfunktion $g(x - x')$ her.

Diese Methode, die Paarverteilungsfunktion aus der Dichteverteilung um ein fixiertes Teilchen zu bestimmen, wird manchmal “Test-Teilchen-Methode” genannt.

(e) Welche Kurvenverläufe von $g(x)$ erwarten Sie für $\beta U_0 \in \{0, 1, \infty\}$?

**Fortsetzung auf Seite 2**

(f) Lösen Sie die Gleichung in Aufgabenteil (d) für die Fälle in Aufgabenteil (e) numerisch.

Anleitung: Bringen Sie zunächst die Gleichung in Aufgabenteil (d) auf die Fixpunktform $g(x) = R(x, [g])$, wobei $R$ eine *Funktion* der Position $x$ und ein *Funktional* der Paarverteilungsfunktion $g$ ist. Bestimmen Sie nun $g(x)$ auf einem $x$-Gitter mittels sogenannter unterrelaxierter Picard-Iteration

$$g^{(0)}(x) := 1, \tag{4}$$

$$g^{(n)}(x) := \alpha R(x, [g^{(n-1)}]) + (1-\alpha) g^{(n-1)}(x), n \geq 1, \tag{5}$$

für einen genügend kleinen Mixing-Parameter $\alpha \in (0, 1]$ als Grenzfunktion $g(x) := \lim\limits_{n\to\infty} g^{(n)}(x)$.

Anmerkung: Je kleiner der Mixing-Parameter $\alpha$ ist, desto effektiver werden numerische Instabilitäten, wie sie z.B. durch Rundungsfehler entstehen können, gedämpft und so oftmals eine Konvergenz der Iteration erst ermöglicht; allerdings nimmt mit abnehmendem Mixing-Parameter $\alpha$ auch die Konvergenzgeschwindigkeit ab.

13. *Struktur eines eindimensionalen Fluids II: Ornstein-Zernike-Methode*

Betrachten Sie wieder das eindimensionale Fluid aus der vorherigen Aufgabe 12.

(a) Bestimmen Sie für das homogene Fluid mit Dichte $\bar{\varrho}$ die direkte Korrelationsfunktion $c(x - x', \bar{\varrho})$ und deren Fourier-Transformierte $\widehat{c}(q, \bar{\varrho})$.

(b) Zeigen Sie durch Einsetzen von $\widehat{c}(q, \bar{\varrho})$ in die Fourier-transformierte Ornstein-Zernike-Gleichung (OZG), dass sich die Paarkorrelationsfunktion schreiben lässt als

$$h(x - x', \bar{\varrho}) = \frac{2f_0}{\pi} \int\limits_0^\infty \mathrm{d}y \, \frac{\sin(y) \cos\left(y \dfrac{|x - x'|}{\lambda}\right)}{y - 2f_0 \bar{\varrho} \lambda \sin(y)}, \tag{6}$$

wobei $f_0 = \exp(-\beta U_0) - 1$.

(c) Berechnen Sie das Integral in Gl. (6) numerisch für verschiedene Parameter $f_0 \in [-1, 0]$ und $\bar{\varrho}\lambda \in [0, 1]$ als Funktion von $|x - x'|/\lambda$ und vergleichen Sie die daraus resultierenden Werte für die Paarverteilungsfunktion $g(x - x', \bar{\varrho})$ mit denen aus Aufgabe 12(f). Wie hängen die Abweichungen von der Packungsdichte $\eta := \bar{\varrho}\lambda$ ab?

(d) Zeigen Sie mit Hilfe der Aufgabe 12(d) und Gl. (6), dass für das betrachtete Dichtefunktional $\beta\Omega[\varrho]$ die Paarverteilungsfunktionen $g(x - x', \bar{\varrho})$ nach der Test-Teilchen-Methode bzw. durch Lösen der OZG im Limes $\eta = \bar{\varrho}\lambda \to 0$ übereinstimmen, und begründen Sie, warum im Fall $\eta = \bar{\varrho}\lambda > 0$ Abweichungen möglich sind.