

Soft Matter Theory

3. Übungsblatt

Abgabetermin: Donnerstag, 24. November 2011, bis 11:00, Briefkasten

5. Dichtefunktionaltheorie (4 Punkte + 4 Zusatzpunkte)

a) Direkte Korrelationsfunktion

Leiten Sie aus der Definition

$$c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{n(\mathbf{r})} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \beta \frac{\delta\mu(\mathbf{r})}{\delta n(\mathbf{r}')}$$

für die direkte Korrelationsfunktion die Ornstein–Zernicke Gleichung ab. *Hinweis:* Benutzen Sie $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n(\mathbf{r})h(\mathbf{r}, \mathbf{r}')n(\mathbf{r}') + n(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, die Verallgemeinerung des bekannten Zusammenhangs $g(r) = h(r) + 1$ der entsprechenden Größen in homogenen Fluiden.

b) Barometrische Höhenformel

Berechnen Sie für die Randbedingung $n(0) = n_0$ das chemische Potential μ und die ortsabhängige Dichte $n(\mathbf{r})$ eines inhomogenen thermostatierten idealen Gases im Einteilchenpotential $\mu(\mathbf{r}) = \mu - u(\mathbf{r})$ mit $u(0) = 0$. Gehen Sie dazu vom bekannten Dichtefunktional für die freie Energie eines inhomogenen idealen Gases und der Minimalbedingung an das großkanonische Potential aus.

c*) Mikrophasenseparation in “Random Phase Approximation” (RPA)

In der sogenannten RPA–Näherung ergänzt man die freie Energie $F^{(0)}$ des den kurzreichweitigen Anteil ($r \simeq \sigma$) der Wechselwirkung beinhaltenden Referenzsystems um einen Term

$$F_{\text{ex}}[\delta n(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \int d^3r \, d^3r' \, \nu_1(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta n(\mathbf{r}) \delta n(\mathbf{r}')$$

mit dem als Störung behandelten schwachen langreichweitigen Anteil ν_1 des Paarpotentials.

- i) Zeigen Sie für ein homogenes Fluid, dass $S_q^{-1} = S_q^{(0)-1} + n\beta\nu_{1q}$ gilt. *Hinweis:* $c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ über Funktionalableitung von F ausdrücken
- ii) Zeigen Sie mittels i) außerdem, dass für das Störpotential

$$\nu_1(r) = u_1 e^{-\kappa_1 r} - u_2 e^{-\kappa_2 r} \quad (\kappa_1 < \kappa_2 \ll \sigma^{-1}, 0 < \beta u_1 < \beta u_2 \ll 1)$$

der Strukturfaktor einen Kleinwinkelpeak

$$S_{q \rightarrow 0}^{-1} = a + b(q^2/q_0^2 - 1)^2$$

entwickelt (*Hinweis:* Fourier-Transformation von $\nu_1(r)$ und Entwicklung für $q \rightarrow 0$). Diskutieren Sie dessen physikalische Bedeutung, sowie die der Parameter a , b , q_0 und den Beitrag der langreichweitigen Wechselwirkung zur isothermen Kompressibilität als Funktion der Potentialparameter. Wann ist die RPA für dieses System asymptotisch exakt?