

• radiale Verteilung fkt.:

(5) kleine Dichten.

$$g(r) = e^{-\beta u(r)} + O(\rho) \quad (6.41)$$

Beweis:

$$\rightarrow g(r) := e^{-\beta w(r)}$$

$$\text{mit: } w(r_{12}) = -k_B T \ln g(r_{12})$$

$$\stackrel{N \gg 1}{=} -k_B T \left[\ln \int d^3 r_3 \dots d^3 r_N e^{-\beta U_N(r^N)} + \ln \frac{V^2}{N! Q_N} \right] \quad (6.42)$$

... Potential der mittleren Kraft

= direkte & indirekte Ww von Teilchen 1,2

$$\left[\text{Erinnerung: } g(r) = \frac{N(N-1)}{\rho^2} \int d^3 r_3 \dots d^3 r_N \frac{e^{-\beta U_N}}{N! Q_N} \right]$$

mittlere Kraft auf Teilchen 1:

$$-\nabla_1 w(r_{12}) = \frac{\int d^3 r_3 \dots d^3 r_N -\nabla_1 U_N e^{-\beta U_N}}{\int d^3 r_3 \dots d^3 r_N e^{-\beta U_N}}$$

$$[U_N = \frac{1}{2} \sum_{ij} v(r_{ij})]$$

$$= -\nabla_1 v(r_{12}) - \frac{\int d^3 r_3 (N-2) \nabla_1 v(r_{13}) g^{(3)}(r_1, r_2, r_3) N! Q_N}{N! Q_N g(r_{12}) / V^2} \quad \left| \frac{\text{von } \frac{V^3}{N(N-1)(N-2)} \right.$$

$r_{13} \dots r_{1N}$

$$\rightarrow -\nabla_1 w(r_{12}) = -\nabla_1 v(r_{12}) - \underbrace{\rho \int d^3 r_3 \frac{g^{(3)}(r_1, r_2, r_3)}{g(r_{12})} \nabla_1 v(r_{13})}_{\text{indirekte Kraft von Teilchen 3}}$$

indirekte Kraft von Teilchen 3

gerichtet mit Wahrscheinlichkeit
für Ort x_3 , wenn x_1, x_2 mit Sicher-
heit vorliegen

$$\rightarrow \omega(r_{12}) = v(r_{12}) + O(g) \quad \text{ged}$$

- Beispiele: aus (1) G. Nägele, Theories of Fluid Microstructures
(2) Hansen, Mc Donald

(i) $g(r)$ für „weiche“ Paarpotentiale
 ↑
 kein „hard core“

(ii) $g(r)$ für Harte-Kugel-Dispersion

(iii) $g(r)$ für flüssiges Argon

(iv) $g(r)$ für Lennard-Jones-System

b) Messung von $g(r)$:

• Methoden:

(i) „Messung“ in Simulationen [MC-Simulationen]

(ii) für Kolloidsuspensionen: durch Auswertung von
Mikroskopiebildern

(iii) Streuexperimente: Neutronen, Licht, ...

• Meßgröße in elastischen Streuexperimenten:

$$S(k) = 1 + \rho \int d^3r [g(r) - 1] e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (6.43)$$

$$\stackrel{\text{ab.}}{=} 1 + 4\pi\rho \int_0^\infty r^2 dr [g(r) - 1] \frac{\sin kr}{kr}$$

$h(r)$... totale Paar-Korrelationsfkt.

... statischer Strukturfaktor
[Fouriertransf. von $g(r), h(r)$]

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kr \cos\vartheta$
 $d^3r = r^2 dr d\cos\vartheta d\varphi$

$\sin\vartheta d\vartheta d\varphi$

mit $g(r) \stackrel{(6.35)}{=} \frac{1}{g^2} \langle \sum_{i \neq j} \delta(r_1 - r_i) \delta(r_2 - r_j) \rangle$ (6.44)

s. Übung $S(k) = \frac{1}{N} \langle \sum_{i,j=1}^N e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \rangle = \langle \left| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \rangle \geq 0$

Umkehrung: $g(r) = 1 + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{S(k)-1}{S} e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ (6.45)
 $\stackrel{\text{o.B.}}{=} 1 + \frac{1}{2\pi^2 g r} \int_0^\infty k dk \sin(kr) [S(k)-1]$

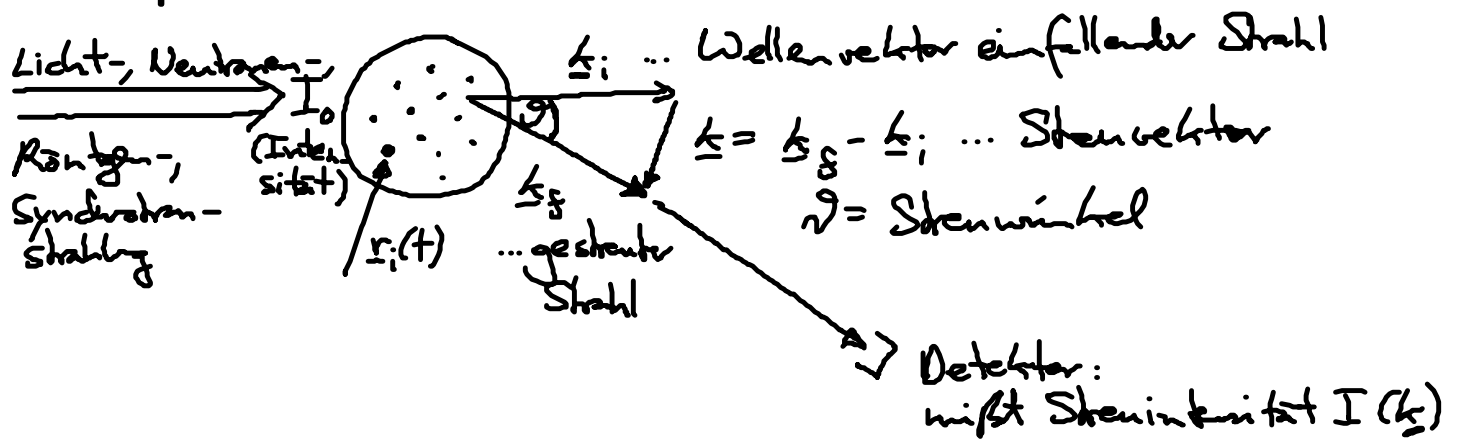
Bemerkungen:

(i) Messe $S(k)$ für $k=0 \dots \infty \rightarrow g(r)!$

(ii) $S(k) \rightarrow 1, k \rightarrow \infty$

(iii) $S(k \rightarrow 0) = 1 + g \int d^3r [g(r) - 1]$ (6.46)

• Streuexperiment:



elastischer Streuung:

$|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_s| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$\mathbf{k} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\vartheta}{2}$ (6.47)

$\sin \frac{\vartheta}{2} = \frac{\frac{\lambda}{2}}{\lambda}$

o.B.: $I(k) \sim \langle N \rangle F(k) S(k)$ (6.48)