

Prof. Dr. Sabine Klapp
M. Sc. Alexander Kraft

3. Übungsblatt – Theoretische Physik VI: Kolloidsysteme

Abgabe: Di. 04.11.2014 in der Vorlesung

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es die Punkte. Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 6 (6 Punkte): Funktionalableitungen

Für ein Funktional $F[\rho]$ betrachten wir eine Variation $\delta\rho(x)$ der Funktion $\rho(x)$ und taylor-expandieren $F[\rho + \delta\rho]$:

$$F[\rho + \delta\rho] = F[\rho] + \frac{1}{1!} \int \frac{\delta F[\rho]}{\delta\rho(x)} \delta\rho(x) dx + \frac{1}{2!} \iint \frac{\delta^2 F[\rho]}{\delta\rho(x)\delta\rho(x')} \delta\rho(x) \delta\rho(x') dx dx' + \dots$$

Die Koeffizienten $\frac{\delta F[\rho]}{\delta\rho(x)}$, $\frac{\delta^2 F[\rho]}{\delta\rho(x)\delta\rho(x')}$, usw. sind die Funktionalableitungen von $F[\rho]$. Berechnen Sie durch Identifikation die Ableitungen $\frac{\delta F[\rho]}{\delta\rho(x)}$. Nehmen Sie an, dass die Variation auf dem Rand verschwindet.

- a) $F[\rho] = \int_a^b \left(\frac{d\rho}{dx}\right)^2 dx'$
- b) $F[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(x')\rho(x'')}{|x' - x''|} dx' dx''$
- c) $F[\rho] = \rho(x')$

Man kann zeigen, dass sich die bekannten Rechenregeln auf Funktionalableitungen verallgemeinern lassen. Berechnen Sie die Funktionalableitung von

- d) $F[\rho] = e^{\int_a^b \rho(x')V(x') dx'}$

Aufgabe 7 (8 Punkte): Korrelationsfunktionen und generierende Funktionale

Betrachten Sie den Vielteilchen-Hamiltonian eines klassischen Fluids, bestehend aus N Teilchen der Masse m :

$$H_N = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V_{\text{int}}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) + \sum_{i=1}^N V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i).$$

V_{int} bezeichnet das Gesamtpotential der Teilchenwechselwirkungen und V_{ext} ist hier ein beliebiges, externes (Einteilchen-)Potential sein.

Das Großkanonische Potential $\Omega = -k_B T \ln Z_{\text{GK}}$ ist eine Funktion vom chemischen Potential μ , der Temperatur T und dem Systemvolumen V . Aus der Tatsache, dass Ω zudem ein Funktional von $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ ist, folgt nun:

$$\Omega = \Omega[u(\mathbf{r})], \quad \text{wobei } u(\mathbf{r}) \equiv \mu - V_{\text{ext}}(\mathbf{r}).$$

Zeigen Sie, dass die erste Funktionalableitung von Ω nach der Funktion $u(\mathbf{r})$ der gemittelten Einteilchen-Dichte $\rho(\mathbf{r})$ entspricht:

$$\frac{\delta\Omega}{\delta u(\mathbf{r})} = -\rho(\mathbf{r}).$$

3. Übung TP VI WS14/15

Aufgabe 8 (6 Punkte): *Barometrische Höhenformel*

Ein ideales Gas aus N Atomen im Volumen V befinde sich bei der Temperatur T in einem äußeren Feld $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$:

$$H_N = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i).$$

- (i) Berechnen Sie die Ortsabhängigkeit der Einteilchendichte $\rho(\mathbf{r})$.
- (ii) V_{ext} sei das Schwerfeld der Erde. Berechnen Sie, wie sich der Gasdruck mit der Höhe über dem Erdboden ändert.

Vorlesung:	Dienstag 10:15 Uhr – 11:45 Uhr im EW 202 Donnerstag 14:15 Uhr – 15:45 Uhr im EW 202
Tutorium:	Do 12:15 Uhr – 13:45 Uhr im EW 733
Scheinkriterien:	Mindestens 50% der Übungspunkte Regelmäßige und aktive Teilnahme am Tutorium Bearbeitung und Vorstellung eines Projekts