

16. *Random phase approximation des Strukturfaktors*

Betrachten Sie die random phase approximation (RPA) eines Fluids mit Wechselwirkung  $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  bzgl. eines Referenz-Fluids mit Wechselwirkung  $U_{\text{ref}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ . Das RPA-Dichtefunktional lautet

$$\begin{aligned} \beta\Omega[\varrho] = & \int d^d r \varrho(\mathbf{r}) (\ln(\varrho(\mathbf{r})\Lambda^d) - 1 - \beta\mu - \beta V(\mathbf{r})) \\ & + \beta F_{\text{ref}}^{\text{ex}}[\varrho] + \frac{1}{2} \int d^d r \int d^d r' \beta \Delta U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varrho(\mathbf{r}) \varrho(\mathbf{r}') \end{aligned} \quad (1)$$

mit dem Referenz-Exzessfunktional  $\beta F_{\text{ref}}^{\text{ex}}[\varrho]$  der Referenz-Wechselwirkung  $U_{\text{ref}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  und der Differenz-Wechselwirkung  $\Delta U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') := U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - U_{\text{ref}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ .

- (a) Zeigen Sie, dass der Strukturfaktor  $S(\mathbf{q}, \varrho)$  des homogenen Fluids mit Dichte  $\varrho$  in RPA mit dem Strukturfaktor  $S_{\text{ref}}(\mathbf{q}, \varrho)$  des Referenz-Fluids mit Dichte  $\varrho$  durch die Beziehung

$$\frac{1}{S(\mathbf{q}, \varrho)} = \frac{1}{S_{\text{ref}}(\mathbf{q}, \varrho)} + \varrho \beta \Delta \hat{U}(\mathbf{q}) \quad (2)$$

verknüpft ist.

- (b) Drücken Sie die isotherme Kompressibilität des Fluids,  $\kappa_T$ , durch die des Referenz-Fluids,  $\kappa_{T\text{ref}}$ , aus.

17. *Strukturfaktor des Hartkugelfluids in Percus-Yevick-Näherung*

Betrachten Sie das homogene Fluid harter Kugeln mit Durchmesser  $\sigma$  in Percus-Yevick-Näherung aus Aufgabe 14 auf Übungsblatt 6.

- (a) Berechnen Sie den Strukturfaktor  $S(\mathbf{q}, \varrho)$ .
- (b) Stellen Sie  $S(\mathbf{q}, \varrho)$  als Funktion von  $|\mathbf{q}|\sigma$  für die Packungsdichten  $\eta = \frac{\pi}{6} \varrho \sigma^3 \in \{0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5\}$  graphisch dar.
- (c) Lesen Sie an  $S(\mathbf{q}, \varrho)$  den Abstand der nächsten Nachbarpartikel um ein fixiertes Teilchen sowie den Abstand zwischen aufeinanderfolgenden Schichten ab.
- (d) Überprüfen Sie Ihre Resultate aus Aufgabenteil (c) mit Hilfe der Paarverteilungsfunktion  $g(\mathbf{r}, \varrho)$  aus Aufgabenteil 14.(d) auf Übungsblatt 6.
- (e) Stellen Sie die isotherme Kompressibilität  $\kappa_T$  als Funktion der Packungsdichte  $\eta \in [0, 0.5]$  graphisch dar.

Fortsetzung auf Seite 2

18. *Strukturfaktor von flüssigem Argon*

In der in Aufgabe 8 auf Übungsblatt 3 zitierten Arbeit J.L. Yarnell, M.J. Katz, R.G. Wenzel und S.H. Koenig, Phys. Rev. A **7**, 2130 (1973) über die experimentelle Bestimmung der Struktur von flüssigem Argon bei einer Temperatur  $T = 85$  K mittels SANS (small-angle neutron scattering) ist in Tabelle I der gemessene Strukturfaktor  $S(Q)$  als Funktion der Wellenzahl  $Q = |\mathbf{q}|$  angegeben. Diese Werte finden sich auch in der Textdatei `S_Ar.txt` auf der Website zur Vorlesung.

- (a) Stellen Sie  $S(Q)$  als Funktion von  $Q$  graphisch dar.
- (b) Lesen Sie an  $S(Q)$  den Abstand der nächsten Nachbarpartikel um ein fixiertes Teilchen sowie den Abstand zwischen aufeinanderfolgenden Schichten ab.
- (c) Überprüfen Sie Ihre Resultate aus Aufgabenteil (b) mit Hilfe der Paarverteilungsfunktion  $g(r)$  aus Aufgabe 8 auf Übungsblatt 3.
- (d) Bestimmen Sie die isotherme Kompressibilität  $\kappa_T$ .  
(Hinweis: Im Artikel von Yarnell et al. wird die Dichte  $\rho = 0.02125 \text{ \AA}^{-3}$  angegeben.)