Prof. Dr. Sabine Klapp
Dr. Mohsen Khadem

3. Übungsblatt – Theoretische Physik VI: Kolloidsysteme

Abgabe: Di. 07.05.2019 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 $F[\rho+\delta\rho]$:

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

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 klassisches Fluids, bestehend aus N Teilchen der Masse m:

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

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:

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

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 Schwerefeld der Erde. Berechnen Sie, wie sich der Gasdruck mit der Höhe über dem Erdboden ändert.

Vorlesung:	Dienstag 08:15 Uhr – 09:45 Uhr im EW 203
	Donnerstag 08:15 Uhr – 09:45 Uhr im EW 203
Tutorium:	Mittwoch 12:00 Uhr – 14:00 Uhr EW731
Scheinkriterien:	Mindestens 50% der Übungspunkte
	Regelmäßige und aktive Teilnahme am Tutorium
	Bearbeitung und Vorstellung eines Projekts