

6. *Paarverteilungsfunktion eines idealen Gases*

Betrachten Sie ein ideales Gas aus nicht miteinander wechselwirkenden Teilchen der Masse m , d.h. es gilt $U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0$ in der Hamilton-Funktion des Standardmodells einer einfachen Flüssigkeit. Es soll im Folgenden von großkanonischer Kopplung des idealen Gases an ein Wärmebad mit Temperatur T und an ein Teilchenreservoir mit chemischem Potential μ ausgegangen werden.

- (a) Bestimmen Sie die Einteilchendichte $\varrho^{(1)}(\mathbf{r})$ als Funktional des externen Potentials $V(\mathbf{r})$.
- (b) Bestimmen Sie die Einteilchendichte $\varrho^{(1)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$ um ein an der Stelle \mathbf{r}' fixiertes Teilchen.
- (c) Bestimmen, skizzieren und diskutieren Sie die Paarverteilungsfunktion

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\varrho^{(1)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')}{\varrho^{(1)}(\mathbf{r})}. \quad (1)$$

7. *Paarverteilungsfunktion eines einfach-kubischen Kristalls*

Betrachten Sie einen freien ($V(\mathbf{r}) = 0$), dreidimensionalen, einfach-kubischen Kristall mit Gitterkonstante a , für den die Paarverteilungsfunktion die Form

$$g(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\ell=1}^{\infty} g_{\ell} \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| - r_{\ell}) \quad (2)$$

mit $g_{\ell}, r_{\ell} > 0$ und $r_{\ell+1} > r_{\ell}$ annimmt.

- (a) Warum hängt $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ nur vom Abstandsbetrag $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ab?
- (b) Bestimmen Sie die Amplituden g_{ℓ} und die Positionen r_{ℓ} der ersten zehn Peaks $\ell \in \{1, \dots, 10\}$.
- (c) Stellen Sie $g(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ als Funktion von $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ graphisch dar und diskutieren das Resultat.

8. *Paarverteilungsfunktion von flüssigem Argon*

In der Arbeit J.L. Yarnell, M.J. Katz, R.G. Wenzel und S.H. Koenig, Phys. Rev. A **7**, 2130 (1973) wurde die Struktur von flüssigem Argon bei einer Temperatur $T = 85$ K und einer Dichte $\varrho = 0.02125 \text{ \AA}^{-3}$ experimentell bestimmt. In Tabelle II dieser Arbeit ist die Paarverteilungsfunktion $g(r)$ angegeben; diese Werte finden sich auch in der Textdatei `g_Ar.txt` auf der Website zur Vorlesung.

- (a) Stellen Sie $g(r)$ als Funktion des Abstands r dar.
- (b) Bestimmen Sie die Positionen der Maxima $r_{\max,i}, i \in \{1, \dots, 4\}$, und der Minima $r_{\min,i}, i \in \{1, \dots, 4\}$, und interpretieren Sie diese.
- (c) Die “ i -te Schicht”, $i \in \{1, 2, \dots\}$, um ein Teilchen sei definiert als die Kugelschale $r \in [r_{\min,i-1}, r_{\min,i}]$ mit $r_{\min,0} := 0$. Bestimmen und diskutieren Sie die Teilchenzahlen $N_i, i \in \{1, \dots, 4\}$, in der “ i -ten Schicht”.