

20. Dichtefunktional des idealen Gitter-Gases

Im Gitter-Gas-Modell eines s -komponentigen Fluids sind die Positionen der Teilchen auf die Gitterplätze eines einfach kubischen Gitters in d Raumdimensionen mit Gitterkonstante a , $(a\mathbb{Z})^d$, beschränkt, und jeder Gitterplatz $\mathbf{r} \in \mathcal{V} \subseteq (a\mathbb{Z})^d$ ist mit höchstens einem Teilchen besetzt. Man kann daher die Mikrozustände \mathcal{C} des Fluids identifizieren mit den Funktionen $\mathcal{C} : \mathcal{V} \rightarrow \{0, 1, \dots, s\}$, $\mathbf{r} \mapsto \mathcal{C}(\mathbf{r})$, wobei $\mathcal{C}(\mathbf{r}) = 0$ falls Gitterplatz \mathbf{r} in Mikrozustand \mathcal{C} unbesetzt ist und $\mathcal{C}(\mathbf{r}) \in \{1, \dots, s\}$ falls Gitterplatz \mathbf{r} in Mikrozustand \mathcal{C} mit einem Teilchen der Sorte $\mathcal{C}(\mathbf{r})$ besetzt ist.

Zeigen Sie für den Fall eines idealen Gitter-Gases, d.h. wenn die Paarwechselwirkung U verschwindet, dass das *exakte* Dichtefunktional gegeben ist durch

$$\beta\Omega^{\text{id}}[\underline{\varrho}] = \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{V}} \left(\sum_{i=1}^s \phi_i(\mathbf{r}) (\ln \phi_i(\mathbf{r}) - \beta\mu_i + \beta V_i(\mathbf{r})) + (1 - \phi(\mathbf{r})) \ln(1 - \phi(\mathbf{r})) \right), \quad (1)$$

wobei $\phi_i(\mathbf{r}) = \varrho_i(\mathbf{r})a^d$ die Packungsdichte der Teilchensorte $i \in \{1, \dots, s\}$ an Gitterplatz $\mathbf{r} \in \mathcal{V}$, $\beta\mu_i$ das chemische Potential der Teilchensorte i , $V_i(\mathbf{r})$ das externe Potential auf Teilchen der Sorte i an Gitterplatz \mathbf{r} und $\phi(\mathbf{r}) := \sum_{i=1}^s \phi_i(\mathbf{r})$ die Gesamtpackungsdichte an Gitterplatz \mathbf{r} sind.

(Hinweis: Folgen Sie der Rechnung in §3.1.5.)

21. Direkte Korrelationsfunktionen in Gitter-Gas-Modellen

Wie in §3.1.8 führt man auch bei Gitter-Gas-Modellen für den allgemeinen Fall von miteinander wechselwirkenden Teilchen das Excessfunktional

$$\beta F^{\text{ex}}[\underline{\varrho}] := \beta\Omega[\underline{\varrho}] - \beta\Omega^{\text{id}}[\underline{\varrho}] \quad (2)$$

ein.

Zeigen Sie wie in §3.2.3, dass die direkten Korrelationsfunktionen in Gitter-Gas-Modellen (siehe vorherige Aufgabe)

$$c_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\underline{\varrho}]) := -\frac{\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}}{1 - \phi(\mathbf{r})} - \frac{\partial^2 \beta F^{\text{ex}}[\underline{\varrho}]}{\partial \phi_i(\mathbf{r}) \partial \phi_j(\mathbf{r}')} \quad (3)$$

der Gitter-Ornstein-Zernike-Gleichung

$$h_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\underline{\varrho}]) = c_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', [\underline{\varrho}]) + \sum_{\mathbf{r}'' \in \mathcal{V}} \sum_{k=1}^s c_{ik}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'', [\underline{\varrho}]) \phi_k(\mathbf{r}'') h_{kj}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', [\underline{\varrho}]) \quad (4)$$

genügen.