Dr. M. Bier (bier@is.mpg.de)
M.Sc. H. Bartsch

Physik der Flüssigkeiten I **WiSe 2017/18**

4. Übungsblatt (`http://www.is.mpg.de/dietrich/lehre/PdF`) **5. Dezember 2017**

9. *Lokale Dichtenäherung (LDA)*

   Betrachten Sie das Excessfunktional in lokaler Dichtenäherung (LDA)

$$\beta F^{\mathrm{ex,LDA}}[\varrho] = \int\limits_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\, \varrho(\mathbf{r}) \beta f^{\mathrm{ex}}(\varrho(\mathbf{r})). \tag{1}$$

   Bestimmen Sie die Funktion $\beta f^{\mathrm{ex}}(\varrho)$ für die folgenden Zustandsgleichungen:

   (a) 3. Virialnäherung

$$\beta p(\varrho) = \varrho + B_2(T)\varrho^2 + B_3(T)\varrho^3 \tag{2}$$

   mit dem 2. und 3. Virialkoeffizienten $B_2(T)$ bzw. $B_3(T)$,

   (b) Van-der-Waals-Zustandsgleichung

$$\beta p(\varrho) = \frac{\varrho}{1 - b\varrho} - \beta a \varrho^2 \tag{3}$$

   mit den Van-der-Waals-Parametern $a, b > 0$,

   (c) Carnahan-Starling-Zustandsgleichung für harte Kugeln mit Durchmesser σ

$$\beta p(\varrho) = \varrho \frac{1 + \eta + \eta^2 - \eta^3}{(1 - \eta)^3} \tag{4}$$

   mit der Packungsdichte $\eta = \frac{\pi}{6}\varrho\sigma^3$.

10. *Ein Fourier-Integral*

   Berechnen Sie das Integral

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int\limits_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3 q\, \frac{\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})}{\mathbf{q}^2 + 1/\xi^2} \tag{5}$$

   für $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$ und $\xi \in (0, \infty)$.
   Hinweis: Führen Sie Kugelkoordinaten ein, integrieren Sie über die Winkel und bestimmen Sie das Integral über die Radialkoordinate mit Hilfe des Residuensatzes.

Fortsetzung auf Seite 2

11. *Rotationsinvariante Bilinearformen*

Betrachten Sie für reelle d-dimensionale Spaltenvektoren $\underline{a}, \underline{b} \in \mathbb{R}^d$ und reelle $d \times d$-Matrizen $\underline{\underline{M}} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ die Bilinearformen

$$\langle \underline{a}, \underline{b} \rangle_{\underline{\underline{M}}} := \underline{a}^\top \underline{\underline{M}}\, \underline{b} \tag{6}$$

wobei $^\top$ Transposition bedeutet.

In der Vorlesung stellte sich die Frage nach denjenigen Matrizen $\underline{\underline{M}} \in \mathbb{R}^{d\times d}$, für die

$$\left\langle \underline{\underline{R}}\, \underline{a}, \underline{\underline{R}}\, \underline{b} \right\rangle_{\underline{\underline{M}}} = \langle \underline{a}, \underline{b} \rangle_{\underline{\underline{M}}} \tag{7}$$

gilt für alle Spaltenvektoren $\underline{a}, \underline{b} \in \mathbb{R}^d$ und alle orthogonalen Matrizen $\underline{\underline{R}} \in O(d)$, d.h. $\underline{\underline{R}} \in \mathbb{R}^{d\times d}$ mit $\underline{\underline{R}}^\top \underline{\underline{R}} = \underline{\underline{R}}\, \underline{\underline{R}}^\top = \underline{\underline{1}}$, wobei $\underline{\underline{1}}$ die d-dimensionale Einheitsmatrix ist.

(a) Nach Gl. (6) bestimmt die Matrix $\underline{\underline{M}}$ die Bilinearform $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\underline{\underline{M}}}$ vollständig. Zeigen Sie, wie man umgekehrt aus der Bilinearform $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\underline{\underline{M}}}$ die Matrix $\underline{\underline{M}}$ wiedergewinnen kann.

(b) Zeigen Sie, dass die Matrizen $\underline{\underline{N}}^{(r)} \in \mathbb{R}^{d\times d}, r \in \{1, \ldots, d\}$, mit

$$N_{ij}^{(r)} := \begin{cases} 1 & , i = j \neq r \\ -1 & , i = j = r \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \tag{8}$$

orthogonale Matrizen sind, d.h. $\underline{\underline{N}}^{(r)} \in O(d)$. Beschreiben Sie die Wirkung einer Matrix $\underline{\underline{N}}^{(r)}$ auf einen Spaltenvektor $\underline{a}$. Zeigen Sie mit Hilfe der Matrizen $\underline{\underline{N}}^{(r)}$ und mit Aufgabenteil (a), dass aus Gl. (7) $M_{ij} = 0$ für $i \neq j$ folgt.

(c) Zeigen Sie, dass die Matrizen $\underline{\underline{P}}^{(rs)} \in \mathbb{R}^{d\times d}, r, s \in \{1, \ldots, d\}, r \neq s$, mit

$$P_{ij}^{(rs)} := \begin{cases} 1 & , i = j \notin \{r, s\} \\ 1 & , (i,j) = (r,s) \\ 1 & , (i,j) = (s,r) \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases} \tag{9}$$

orthogonale Matrizen sind, d.h. $\underline{\underline{P}}^{(rs)} \in O(d)$. Beschreiben Sie die Wirkung einer Matrix $\underline{\underline{P}}^{(rs)}$ auf einen Spaltenvektor $\underline{a}$. Zeigen Sie mit Hilfe der Matrizen $\underline{\underline{P}}^{(rs)}$ und mit Aufgabenteil (a), dass aus Gl. (7) $M_{ii} = M_{jj}$ für alle $i, j \in \{1, \ldots, d\}$ folgt.

(d) Die Aufgabenteile (b) und (c) zeigen, dass Gl. (7) höchstens von Matrizen der Form $\underline{\underline{M}} = m\underline{\underline{1}}$ mit $m \in \mathbb{R}$ erfüllt werden kann. Zeigen Sie, dass tatsächlich alle Matrizen dieser Form Gl. (7) erfüllen.