

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Chemie

Fachgebiet: Chemie

Betreuer: Prof. Dr. Joachim Wagner

Markus Kulossa

(e-mail: markus.kulossa@uni-rostock.de)

Virial coefficients of hard, anisotropic particles in Euclidean spaces of various dimensionality

Englische Zusammenfassung

The virial series provides an *ab initio* approach to the equation of state of fluids, where the compressibility factor is expanded in powers of the particle number density. The expansion coefficients of this series are the virial coefficients, derived by means of statistical mechanics from the interactions in many-particle systems. Here, the virial coefficient of order n considers the deviation from the ideal gas resulting from interactions in clusters with n particles.

In this work, virial coefficients of hard bodies are calculated up to the eighth order. Applying graph theory, an efficient algorithm optimized for hard bodies is employed. Therefore, the focus lies on the comparison of virial coefficients of particles in two-, three-, and higher-dimensional Euclidean vector spaces, in particular for anisometric solids of revolution. For arbitrary convex geometries, the second virial coefficient is analytically accessible as the excluded volume of a convex particle by employing quermassintegrals. For solids of revolution and polytopes, the influence of singularities in their surface curvature is studied. The exact second virial coefficients serve as reference integrals for the numerical calculation of higher-order virial coefficients, enabling highly accurate numerical results for virial coefficients up to the eighth order. The obtained results contribute to an increased understanding of the self-organization and phase behavior of many-particle systems consisting of anisotropic solids, serving as model systems for liquid crystals and granular matter.

Deutsche Zusammenfassung

Die Virialreihe liefert einen *Ab-initio*-Zugang zur Zustandsgleichung von Fluiden, wobei der Realgasfaktor in Potenzen der Teilchenzahldichte entwickelt wird. Die Entwicklungskoeffizienten dieser Potenzreihe sind die Virialkoeffizienten, die mit Methoden der statistischen Mechanik aus den Wechselwirkungen in Vielteilchensystemen zugänglich sind. Hierbei beschreibt der Virialkoeffizient der Ordnung n Abweichungen vom Idealgasverhalten, die durch Wechselwirkungen in Clustern aus n Teilchen bedingt sind.

In der vorliegenden Arbeit werden Virialkoeffizienten harter Körper bis zur Ordnung acht berechnet. Dazu wird mit Hilfe der Graphentheorie ein für harte Körper optimierter Algorithmus verwendet. Der Fokus liegt in dem Vergleich von Virialkoeffizienten in zwei-, drei- und höherdimensionalen euklidischen Vektorräumen, wobei insbesondere anisometrische Rotationskörper betrachtet werden. Für beliebige konvexe Geometrien ist der zweite Virialkoeffizient als Ausschlussvolumen eines konvexen Körpers analytisch über Quermaßintegrale zugänglich. Für Rotationskörper und Polytope wird der Einfluss von Singularitäten in ihrer Oberflächenkrümmung untersucht. Die exakten zweiten Virialkoeffizienten dienen als Referenzintegrale für die numerische Berechnung von Virialkoeffizienten höherer Ordnung, woraus hochgenaue Daten für Virialkoeffizienten bis zur achten Ordnung resultieren. Die Ergebnisse tragen zum Verständnis der Selbstorganisation und des Phasenverhaltens von Vielteilchensystemen anisotroper Körper bei, die als Modellsysteme für Flüssigkristalle oder granularer Materie dienen.