

*Berechnung von zweiten Virialkoeffizienten konvexer Körper
im D -dimensionalen Vektorraum mittels der Brunn-Minkowski-Theorie*

Markus Kulossa, Joachim Wagner
Institut für Chemie, Universität Rostock

Die Virialreihe ist eine mittels statistischer Mechanik abgeleitete Reihenentwicklung für thermische Zustandsgleichungen realer Gase in Potenzen der Teilchenzahldichte. Die hierbei auftretenden Virialkoeffizienten der Ordnung i quantifizieren den Einfluss von interpartikulären Wechselwirkungen in Clustern von i Teilchen auf das nichtideale Verhalten von Gasen. Der auf Paarwechselwirkungen beruhende zweite Virialkoeffizient ist damit im Niedrigdichtelimit der führende Beitrag für Abweichungen vom Idealgasverhalten.

Im Falle harter Körper ist die Paarwechselwirkung eine Stufenfunktion mit unendlicher Energie im Falle einer Überlappung und andernfalls Null. Damit ist für harte Körper der zweite Virialkoeffizient das orientierungsgemittelte Ausschlussvolumen bezogen auf ein Teilchen. Für konvexe Körper ist das orientierungsgemittelte Ausschlussvolumen analytisch über die Brunn-Minkowski-Theorie zugänglich, wenn die Minkowski-Funktionale oder Quermaßintegrale W_j mit $0 \leq j \leq D$ im D -dimensionalen euklidischen Raum bekannt sind.

Im dem Vortrag werden Methoden zur analytischen Berechnung von Quermaßintegralen konvexer, uniaxialer Rotationskörper im drei- und vierdimensionalen Vektorraum vorgestellt.