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

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

2. Übungsblatt (`http://www.is.mpg.de/dietrich/lehre/PdF`) **7. November 2017**

4. *Variation und Funktionalableitung*

Mit $\mathcal{F}$ sei eine Menge reellwertiger Funktionen auf $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{R}^d$ bezeichnet, d.h. jedes $f \in \mathcal{F}$ ist eine Funktion $f : \mathcal{V} \to \mathbb{R}$. Beispiele solcher Mengen $\mathcal{F}$ sind die Menge $C(\mathcal{V})$ aller stetiger Funktionen auf $\mathcal{V}$, die Menge $C^1(\mathcal{V})$ aller stetig differenzierbarer Funktionen auf $\mathcal{V}$ und die Menge $L(\mathcal{V})$ aller integrierbarer Funktionen auf $\mathcal{V}$.

Ein reellwertiges *Funktional* $F : \mathcal{F} \to \mathbb{R}$ auf der Funktionenmenge $\mathcal{F}$ ist eine Abbildung, die jeder Funktion $f \in \mathcal{F}$ eine reelle Zahl $F[f] \in \mathbb{R}$ zuordnet. Beispielsweise sind für $\mathcal{F} = L(\mathcal{V})$ das Integral über $\mathcal{V}$,

$$F[f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\ f(\mathbf{r}), \tag{1}$$

und für $\mathcal{F} = C(\mathcal{V})$ der Funktionswert an einer beliebigen aber festen Stelle $\mathbf{r}_0 \in \mathcal{V}$,

$$F[f] = f(\mathbf{r}_0), \tag{2}$$

reellwertige Funktionale auf $\mathcal{F}$.

Für ein reellwertiges Funktional $F : \mathcal{F} \to \mathbb{R}$ und eine Funktion $f \in \mathcal{F}$ interessiert oftmals nicht nur der Wert $F[f]$, sondern auch die Änderung von F in einer Umgebung von f. Diese lässt sich durch die *Variation* $\delta F[f, \delta f]$ beschreiben, wobei $\delta f : \mathcal{V} \to \mathbb{R}$ eine beliebige Funktion mit $f + \delta f \in \mathcal{F}$ ist und $\delta F[f, \delta f]$ als dasjenige Funktional in f und δf definiert ist, das linear in δf ist und für das

$$F[f + \delta f] = F[f] + \delta F[f, \delta f] + \mathcal{O}(\delta f^2) \tag{3}$$

gilt. Beispielsweise ist die Variation des Funktionals

$$F[f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\ f(\mathbf{t})^3 \tag{4}$$

wegen

$$\begin{aligned} F[f + \delta f] &= \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\ (f(\mathbf{r}) + \delta f(\mathbf{r}))^3 && (5) \\ &= \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\ (f(\mathbf{r})^3 + 3f(\mathbf{r})^2 \delta f(\mathbf{r}) + \mathcal{O}(\delta f(\mathbf{r})^2)) && (6) \\ &= F[f] + \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\ 3f(\mathbf{r})^2 \delta f(\mathbf{r}) + \mathcal{O}(\delta f^2) && (7) \end{aligned}$$

gegeben durch

$$\delta F[f, \delta f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r\ 3f(\mathbf{r})^2 \delta f(\mathbf{r}). \tag{8}$$

Fortsetzung auf Seite 2

Lässt sich die Variation $\delta F[f, \delta f]$ in der Form

$$\delta F[f, \delta f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r \; A(\mathbf{r}, [f]) \delta f(\mathbf{r}) \tag{9}$$

darstellen mit einer Abbildung $A : \mathcal{V} \times \mathcal{F} \to \mathbb{R}$, d.h. $A(\mathbf{r}, [f])$ ist eine Funktion in $\mathbf{r}$ und ein Funktional in f, so nennt man $A(\mathbf{r}, [f])$ die *Funktionalableitung* des Funktionals F nach f an der Stelle $\mathbf{r}$. Man schreibt dafür gewöhnlich

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f(\mathbf{r})} := A(\mathbf{r}, [f]). \tag{10}$$

Beispielsweise ist die Funktionalableitung von Gl. (4) wegen Gl. (8) gegeben durch

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f(\mathbf{r})} := 3 f(\mathbf{r})^2. \tag{11}$$

(a) Bestimmen Sie die Variationen und die Funktionalableitungen der folgenden Funktionale:

   i. $F[f] = f(\mathbf{r}_0)$ mit $\mathbf{r}_0 \in \mathcal{V}$ beliebig aber fest,

   ii. $F[f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r \; \Phi(f(\mathbf{r}))$ mit einer Funktion $\Phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$,

   iii. $F[f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r' \; K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}')$ mit einer Funktion $K : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathbb{R}$,

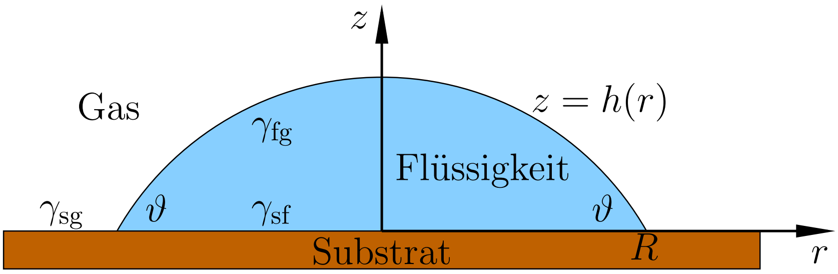
   iv. $F[f] = \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r \;\; \Phi(g(\mathbf{r}, [f]))$ mit einer Funktion $\Phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und $g(\mathbf{r}, [f]) := \int_{\mathcal{V}} \mathrm{d}^d r' \; K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}')$ für eine Funktion $K : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathbb{R}$.

(b) Betrachten Sie ein Funktional $F : \mathcal{F} \to \mathbb{R}$ auf einer Menge $\mathcal{F}$ der Funktionen $f : \mathcal{V} \to \mathbb{R}$ auf einer Menge $\mathcal{V}$. Mit $\{x\}$ sei die Dimension der physikalischen Größe x bezeichnet, also z.B. für die Lichtgeschwindigkeit $\{c\} = \frac{\text{Länge}}{\text{Zeit}}$. Drücken Sie $\left\{ \frac{\delta F[f]}{\delta f(\mathbf{r})} \right\}$ durch $\{F[f]\}$, $\{f(\mathbf{r})\}$ und $\{\mathbf{r}\}$ aus.

Fortsetzung auf Seite 3

5. *Flüssigkeitstropfen auf Substrat*

Betrachten Sie im dreidimensionalen Raum ohne Gravitation einen inkompressiblen Flüssigkeitstropfen, der in einer Gasatmosphäre auf einem Substrat aufgebracht wurde:



Aus Symmetriegründen ist die Tropfenoberfläche rotationssymmetrisch um eine z-Achse senkrecht zum Substrat und die Verhältnisse seien so, dass sie in Zylinderkoordinaten (r, z) durch eine Gleichung der Form $z = h(r)$ beschrieben wird. Die Kontaktfläche zwischen Substrat und Flüssigkeit ist somit ein Kreis mit Radius R und das Höhenprofil $h : [0, R] \to [0, \infty)$ ist eine Funktion der Radiuskoordinate r. Die freie Energie pro Kontaktfläche zwischen dem Substrat und der Gasatmosphäre sei durch die Oberflächenspannung γ_{sg}, die zwischen dem Substrat und dem Flüssigkeitstropfen durch die Grenzflächenspannung γ_{sf} und die zwischen Flüssigkeit und Gas durch die Oberflächenspannung γ_{fg} beschrieben. Im thermodynamischen Gleichgewicht nimmt dann

$$F(R, [h]) = (\gamma_{\mathrm{sf}} - \gamma_{\mathrm{sg}})A_{\mathrm{sf}}(R) + \gamma_{\mathrm{fg}}A_{\mathrm{fg}}(R, [h]) \tag{12}$$

sein Minimum an, wobei die Größe der Kontaktfläche zwischen Substrat und Flüssigkeitstropfen mit $A_{\mathrm{sf}}(R)$ und die zwischen Flüssigkeit und Gas mit $A_{\mathrm{fg}}(R, [h])$ bezeichnet ist.

(a) Formulieren Sie die Ausdrücke für $A_{\mathrm{sf}}(R)$, $A_{\mathrm{fg}}(R, [h])$ und das Flüssigkeitsvolumen $V_{\mathrm{f}}(R, [h])$ explizit als Funktionen von R und ggf. als Funktionale von h.

(b) Formulieren Sie durch Variation nach dem Höhenprofil h, d.h. bei festgehaltenem Radius R, die Stationaritätsbedingung für h,

$$\delta(F(R, [h]) - \lambda V_{\mathrm{f}}(R, [h])) = 0, \tag{13}$$

wobei λ der Lagrange-Multiplikator der Inkompressibilitäts-Nebenbedingung $V_{\mathrm{f}}(R, [h]) =$ const ist. Beachten Sie ferner die Randbedingungen $h(R) = 0$, d.h. $\delta h(R) = 0$, und $h'(0) = 0$.

(c) Leiten Sie aus der Stationaritätsbedingung Gl. (13) eine Differentialgleichung für das Höhenprofil h her und zeigen Sie, dass diese durch eine Kugelkappe der Form

$$h_0(r) = C + \sqrt{K^2 - r^2} \tag{14}$$

mit geeigneten Konstanten $C < 0$, $K > R$ gelöst wird.

(d) Bestimmen Sie die Funktion $F_0(R) := F(R, [h_0]) - \lambda V_{\mathrm{f}}(R, [h_0])$.

(e) Zeigen Sie, dass die Stationaritätsbedingung für R, $F_0'(R) = 0$, äquivalent ist zur Youngschen Gleichung

$$\gamma_{\mathrm{sg}} = \gamma_{\mathrm{sf}} + \gamma_{\mathrm{fg}} \cos\vartheta \tag{15}$$

für den Kontaktwinkel ϑ.

(f) Bestimmen Sie aus dem Flüssigkeitsvolumen V_{f} und dem Kontaktwinkel ϑ die Größen R, λ, K und C im thermodynamischen Gleichgewicht.