

Mean-Field Approaches in Liquid-State Theory

Salomé TSCHOPP

Master thesis in Physics

De nos jours, plusieurs modèles de modélisations des liquides sont connus. La plupart d'entre eux utilise un potentiel d'énergie du même type que celui de Lennard-Jones : un potentiel fait d'une partie attractive stabilisée par une partie infiniment répulsive. L'étude de ce type de potentiel est motivée par le fait que l'interaction entre une paire d'atomes ou de molécules peut être décrite de la sorte.

Dans cette thèse de Master, nous avons étudié un potentiel composé d'une partie attractive et d'une partie répulsive finie. Cette forme de potentiel est plus proche de celle observée dans le domaine de la matière molle, par exemple dans le cas de bobine de polymères ou de suspensions colloïdales stabilisées par des surfactants.

A l'aide de la DFT, nous avons pu montrer que notre modèle comprenant des interactions triples donnait également une phase de transition stable et nous avons pu calculer des profils de densité inhomogène pour différentes situations.

Prof. Joseph Brader