Übungsblatt Nr.13

Diskussionsthema: Das klassische ideale Gas (Annahmen des Modells und deren Gültigkeit, kanonische Zustandssumme, Zustandsgleichung. . .).

38. Molekularer Reißverschluss

Einige Kettenmoleküle wie die DNA kann man in grober Näherung als einen Reißverschluss mit N Gliedern modellieren. Ein geschlossenes Glied habe die Energie 0, und ein geöffnetes Glied die Energie $\varepsilon > 0$ mit dem Entartungsgrad $g \gg 1$. Die Öffnung des Reißverschlusses kann nur von einem Ende stattfinden, ab dem die Glieder nummeriert werden: das s-te Glied kann nur geöffnet werden, wenn alle Glieder $(1, 2, \ldots, s-1)$ bereits geöffnet sind.

i. Zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme des Reißverschlusses durch

$$Z_N(\beta) = \frac{1 - x^{N+1}}{1 - x} \quad \text{mit} \quad x \equiv g\,\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon} \tag{1}$$

gegeben ist. Dabei ist die Größe x ein Maß für die Temperatur T: Wie verhält sie sich in den Grenzfällen $T \to 0$ und $T \to \infty$?

ii. **a)** Berechnen Sie mithilfe des Ergebnisses aus **i.** die mittlere Anzahl $\langle n\rangle$ geöffneter Glieder als Funktion von x. Plotten Sie $\langle n\rangle(x)$ für $N = 1000$ und $g = 4$. Diskutieren Sie insbesondere das Verhalten in der Umgebung von $x = 1$.

b) Zeigen Sie, dass sich $\frac{1}{N}\langle n\rangle(x)$ im Limes $N \to \infty$ einer Sprungfunktion annähert, und dass die Ableitung $\frac{1}{N}\frac{\mathrm{d}\langle n\rangle}{\mathrm{d}x}$ bei $x = 1$ divergiert.

iii. Berechnen Sie die Wärmekapazität $C(x)$ und plotten Sie sie für $N = 1000$ und $g = 4$.

39. Gleichverteilungssatz

i. Wie lautet der Gleichverteilungssatz der klassischen statistischen Mechanik?

ii. Wie lautet die innere Energie des klassischen monoatomaren idealen Gases aus N Punktteilchen in drei Raumdimensionen? Begründen Sie Ihre Antwort.

iii. Wie lautet die Wärmekapazität eines Systems aus N unabhängigen klassischen harmonischen Oszillatoren? Die Kreisfrequenzen für die Schwingungen in die drei Raumdimensionen seien ω_x, ω_y und ω_z. Begründen Sie das Ergebnis.

iv. Erläutern Sie, was sich ändert, wenn die Oszillatoren quantenmechanischer Natur sind. Nutzen Sie eine Skizze des funktionalen Verlaufs der Wärmekapazitäten als Funktion der Temperatur.

40. Eindimensionales Ising-Modell

Sei ein System aus N (eindimensionalen) Spins mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{\mathsf{H}}_N = -\sum_{i=1}^{N-1} J_i\,\hat{\mathsf{S}}_i\hat{\mathsf{S}}_{i+1}, \tag{2}$$

wobei jeder Spin nur die zwei diskreten Werte $S = \pm 1$ annehmen kann. In diesem Modell können nur benachbarte Spins miteinander wechselwirken.

i. Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme Z_N.

Hinweis: Zeigen Sie die Rekursionsrelation $Z_{N+1} = 2Z_N\cosh(\beta J_N)$.

ii. Berechnen Sie die freie Energie F und die erste Ableitung $\partial F/\partial T$ für den Fall $J_I = J = \text{konst.}$