KARLSRUHER INSTITUT FÜR TECHNOLOGIE

INSTITUT FÜR THEORIE
DER KONDENSIERTEN MATERIE

Übungen zu Moderne Theoretischen Physik III   SS 16

Prof. Dr. A. Shnirman
PD Dr. B. Narozhny, P. Schad

Blatt 5
Besprechung 20.05.2016

---

1. Curie-Paramagnetismus (30 Punkte, schriftlich)

Betrachten Sie N unabhängige Spin-J-Teilchen (J kann ganz- oder halbzahlig sein). Der Operator des magnetischen Moments der Teilchen (Spins) ist $\mu\hat{\boldsymbol{J}}_i$. In einem äußerem Magnetfeld $\boldsymbol{H} = H\boldsymbol{e}_z$ lautet der Hamilton-Operator

$$\hat{\mathcal{H}} = -\mu \sum_{i=1}^{N} \hat{\boldsymbol{J}}_i \boldsymbol{H} \ . \tag{1}$$

Hier soll das kanonische Ensemble untersucht werden.

(a) Geben Sie die Mikrozustände und die zugehörigen Energien an. Zeigen Sie, dass die kanonische Zustandssumme in die Zustandssummen der einzelnen Spins faktorisiert und bestimmen Sie die Zustandssumme. Berechnen Sie daraus die freie Energie $F(T, H)$.

(b) Bestimmen Sie die thermodynamischen Größen, d.h. die Entropie S, die Magnetisierung $\boldsymbol{M} = \mu \sum_{i=1}^{N} \langle \hat{\boldsymbol{J}}_i \rangle$ und die Wärmekapazitäten

$$c_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H , \qquad c_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M . \tag{2}$$

(c) Finden Sie Näherungsausdrücke für M für kleine Magnetfelder $\mu H/(k_{\mathrm{B}}T) \ll 1$ und große Magnetfelder $\mu H/(k_{\mathrm{B}}T) \gg 1$. Berechnen Sie die Nullfeld-Suszeptibilität

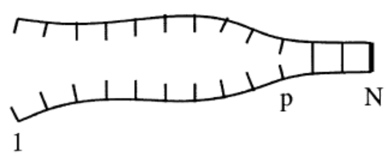
$$\chi(T) = \lim_{H \to 0} \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T . \tag{3}$$

2. Reißverschlussmodell eines DNA-Moleküls (20 Punkte, schriftlich)

Die Mikrozustände eines doppelstrangigen Moleküls seien wie folgt festgelegt:

(i) Die beiden Stränge können an den Stellen $1, 2, ..., N$ Bindungen eingehen. Eine geschlossene Bindung hat die Energie $\Omega \neq 0$, eine geöffnete die Energie 0.

(ii) Die p-te Bindung kann nur geöffnet werden, wenn $1, 2, ..., p-1$ bereits offen sind. Die N-te Bindung kann nicht geöffnet werden.



Das Molekül befinde sich im Kontakt mit einem Wärmebad konstanter Temperatur T.

(a) Bestimmen Sie die Energien der Mikrozustände und die kanonische Zustandssumme.

(b) Berechnen Sie die mittlere Zahl $\langle p \rangle$ offener Bindungen als Funktion von $\Omega/(k_\mathrm{B}T)$ und N. Was folgt für den Anteil $\langle p \rangle/N$ offener Bindungen im Limes $N \to \infty$?

3. Ensemble harmonischer Oszillatoren (50 Punkte, mündlich)

Betrachten Sie ein System von N unabhängigen und unterscheidbaren 1-dimensionalen harmonischen Oszillatoren, beschrieben durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x_i^2}{2} \right). \tag{4}$$

(a) Berechnen Sie die Entropie als Funktion der Energie $E = U$ für das mikrokanonische Ensemble im klassischen Fall. Bestimmen Sie zunächst das Phasenraumvolumen. Was ist die Temperatur?

Hinweis: Verwenden Sie die Stirlingformel $\ln(n!) \approx n\ln(n) - n$.

(b) Berechnen Sie das Zustandsintegral für das kanonische Ensemble im klassischen Fall. Bestimmen Sie die freie Energie, Entropie, innere Energie und spezifische Wärme c_V als Funktionen der Temperatur. Vergleichen Sie die Entropie mit der in (a) erhaltenen mikrokanonischen Entropie.

(c) In der Quantenmechanik kann das System von N unabhängigen und unterscheidbaren 1-dimensionalen harmonischen Oszillatoren durch den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^{N} \hbar\omega \left(\hat{n}_i + \frac{1}{2} \right), \tag{5}$$

beschrieben werden, mit dem Besetzungszahloperator $\hat{n}_i$. Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme und wiederholen Sie die in (b) durchgeführten Berechnungen für den quantenmechanischen Fall. Diskutieren Sie die innere Energie und die spezifische Wärme für hohe und tiefe Temperaturen.

Hinweis: Die kanonische Zustandssumme unabhängiger und unterscheidbarer Oszillatoren in (b) und (c) faktorisiert.