

Übungen zur Theoretischen Physik F SS 10

Prof. Dr. G. Schön
Dr. J. ColeBlatt 6
Besprechung 28.05.2010

1. System von harmonischen Oszillatoren: (2 + 4 + 6 = 12 Punkte)

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

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

- Berechnen Sie die klassische mikrokanonische Entropie als Funktion der Energie $E = U$. Betrachten Sie das Phasenraumvolumen, wobei das Volumen einer $2N$ -dimensionalen Kugel mit Radius r durch $V_{2N} = \pi^N r^{2N} / N!$ gegeben ist. Verwenden Sie $\ln(N!) \approx N \ln(N) - N$. Was ist die Temperatur?
- Berechnen Sie klassisch das kanonische Zustandsintegral, die freie Energie, Entropie, innere Energie und spezifische Wärme C_V als Funktionen der Temperatur. Vergleichen Sie die Entropie mit der unter (a) erhaltenen mikrokanonischen Entropie.
- Wiederholen Sie die unter (b) durchgeführten Berechnungen für den quantenmechanischen Fall, indem Sie von der kanonischen Zustandssumme ausgehen. Diskutieren Sie die innere Energie und die spezifische Wärme für hohe und tiefe Temperaturen.

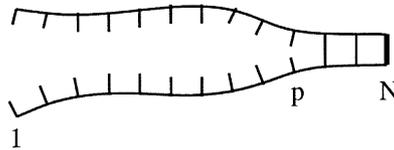
[Hinweis für (b) und (c): Beachten Sie, dass die kanonische Zustandssumme für unabhängige und unterscheidbare Oszillatoren faktorisiert.]

2. Reißverschlußmodell eines DNS-Moleküls:

(1 + 3 = 4 Punkte)

Die Mikrozustände eines doppelsträngigen Moleküls sind wie folgt festgelegt:

- (i) Die beiden Stränge können an den Stellen $1, 2, \dots, N$ 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 $1, 2, \dots, p - 1$ bereits offen sind. Die N -te kann nicht geöffnet werden.



- (a) Das Molekül befindet sich im Kontakt mit einem Wärmebad (Temperatur T). Bestimmen Sie die kanonische Zustandssumme.

Hinweis: $1 + x + x^2 + \dots + x^p = \frac{1 - x^{(p+1)}}{1 - x}$

- (b) Berechnen Sie die mittlere Zahl $\langle p \rangle$ offener Bindungen als Funktion von $\frac{\Omega}{kT}$ und N . Was folgt für den Anteil $\langle p \rangle / N$ offener Bindungen im Limes $N \rightarrow \infty$?

3. Reduzierte Dichtematrix:

(2 + 2 = 4 Punkte)

Betrachten Sie zwei antiferromagnetisch gekoppelte Spins mit $S = \frac{1}{2}$ und $\hat{H} = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ ($J > 0$).

- (a) Das System sei im Grundzustand. Schreiben Sie die Dichtematrix $\hat{\rho}$ in der Basis $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ auf. Überprüfen Sie explizit, dass es sich bei Ihrem Ergebnis um einen reinen Zustand handelt.
- (b) Nehmen Sie jetzt an, dass nur der Spin \vec{S}_1 als Messgröße interessiert. Bestimmen Sie die reduzierte Dichtematrix, indem Sie den zweiten Spin "ausspüren": $\rho_{\alpha\beta}^{red} = \sum_{\gamma=\uparrow,\downarrow} \rho_{\alpha\gamma,\beta\gamma}$. Zeigen Sie, dass $\hat{\rho}^{red}$ einen gemischten Zustand beschreibt (obwohl $\hat{\rho}$ rein ist).