Übungen in *Statistische Physik*

Übungsblatt 4

Bitte geben Sie Ihre Lösungen am **Dienstag, den 21.05.2019** in der Vorlesung ab.

1) 8 Punkte

Sei $\hat{A}$ eine Observable mit einem Kontinuumsspektrum (z. B. $\hat{A} = \hat{H}$ für die Energie). Die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung $P_{\hat{A}}(a')$ für den Messwert a' der Observablen $\hat{A}$ im gemischten Zustand $\hat{\rho} = \sum_n w_n |n\rangle\langle n|$ mit $\langle n|n\rangle = 1$ und $\sum_n w_n = 1$ ist gegeben durch

$$P_{\hat{A}}(a') = \sum_n w_n \sum_k |\langle a', k|n\rangle|^2, \tag{1}$$

wobei die Zustände $|a', k\rangle$ mit $\hat{A}\,|a', k\rangle = a'|a', k\rangle$ eine vollständige Orthonormalbasis bilden, d.h.

$$\langle a, k|a', k'\rangle = \delta_{k,k'}\,\delta(a - a')$$

und

$$\int \mathrm{d}a \sum_k |a, k\rangle\langle a, k| = 1\,.$$

i) Erklären Sie auf der Basis der Quantenmechanik, warum der Ausdruck (**??**) für $P_{\hat{A}}(a')$ für reine Zustände $|1\rangle$ ($w_n = \delta_{n1}$) richtig ist.

ii) Zeigen Sie, dass

$$P_{\hat{A}}(a') = \langle\, \delta(\hat{A} - a'\,)\,\rangle\,.$$

<u>Hinweis</u>: Zeigen Sie zuerst, dass $\delta(\hat{A} - a'\,) = \sum_k |a', k\rangle\langle a', k|$.

iii) Zeigen Sie, dass $P_{\hat{A}}(a')$ immer normiert ist.

2) 16 Punkte

Die kanonische Zustandssumme Z_c ist gegeben durch $Z_c = \mathrm{Tr}\{e^{-\beta\,\hat{H}}\}$. Zeigen Sie auf drei Wegen (i), ii) und iii)), dass man Z_c auch schreiben kann als

$$Z_c = \int \mathrm{d}E\, e^{-\beta\,E}\,\Omega(E)\,, \tag{2}$$

wobei $\Omega(E) = Z_{mc}$ die mikrokanonische Zustandssumme ist. Interpretieren Sie die Gl. (**??**) kurz aus statistischer Sicht.

i) Zeigen Sie, dass im kanonischen Ensemble die Wahrscheinlichkeitsdichte $w(E)$ für die Messung der Energie E gegeben ist durch

$$w(E) = \langle \delta(E - \hat{H}) \rangle = \frac{1}{Z_c} e^{-\beta\,E}\,\Omega(E)$$

und benutzen Sie, wie in der Aufgabe 1 iii) gezeigt, dass $w(E)$ normiert ist.

ii) Spalten Sie den Ausdruck für die kanonische Zustandssumme $Z_c = \mathrm{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}}\} = \sum_n e^{-\beta E_n}$, bei der die Summe bekanntlich über alle Mikrozustände im Hilbertraum mit N Partikeln und Volumen V geht, in eine Summe über alle Zustände mit einer Energie im Intervall $[E,\, E + \mathrm{d}E]$ und ein Integral über alle möglichen Energien E. Begründen Sie Ihren Denkweg kurz und identifizieren Sie die mikrokanonische Zustandssumme $\Omega(E)$.

iii) Begründen Sie und dann benutzten Sie die Beziehung

$$\int \delta(a - \hat{A})\, \mathrm{d}a = 1\,,$$

die für alle hermiteschen Operatoren $\hat{A}$ gilt (z.B. $\hat{A} = \hat{H}$).

3) 8+10 Punkte

Betrachten Sie ein Polymer, dass durch das Verbinden von N scheibenförmigen Molekülen in einer 1-dimensionalen Kette entsteht. Jedes Molekül kann sich entweder entlang seiner langen Achse (mit der Länge $2a$) oder entlang seiner kurzen Achse (mit der Länge a) ausrichten. Die Energie eines Monomers, dass sich entlang seiner langen Achse ausrichtet, ist um ε höher als bei der kürzeren Ausrichtung.

i) Finden Sie die Gesamtenergie E des Polymers als Funktion der Anzahl an Monomeren n_k, die sich entlang der langen Achse ausrichten.

ii) Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme $Z_c(T, N)$ des Polymers als Funktion der Temperatur T und der Anzahl N der Moleküle ($\beta = 1/k_\mathrm{B}T$, wobei k_B die Boltzmann-Konstante ist).

iii) Berechnen Sie die mittlere Länge $\langle L(T, N)\rangle$ des Polymers. Machen Sie eine Skizze von L als Funktion von T für $\varepsilon > 0$ und $\varepsilon < 0$.

iv) Berechnen Sie die Varianz der Länge $\Delta L^2 = \langle L(T, N)^2\rangle - \langle L(T, N)\rangle^2$. Interpretieren Sie die Abhängigkeit von T und N. $(*)$

v) Geben Sie einen Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(L)$ für die Länge des Polymers an ($Na \le L \le 2Na$). Fertigen Sie eine qualitative Skizze von $P(L/Na)$ für zwei repräsentative Werte von N und T an (z.B. für $N = 100$ und $N = 10^4$). Interpretieren Sie die Abhängigkeit von $P(L)$ als Funktion von T und N. $(*)$

vi) Was sagt der zentrale Grenzwertsatz über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für die Länge $L(T, N)$ und für die mittlere Länge $L(T,\, N)/N$ aus? $(*)$

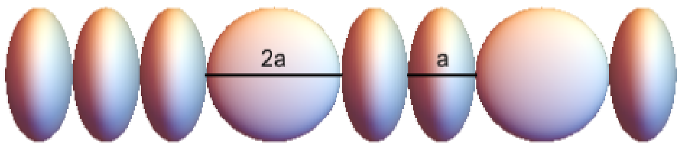

Abbildung 1: Skizze eines Polymers aus $n_k = 8$ Monomeren.

$(*)$ Die Aufgabenteile iv), v) und vi) müssen erst am 28.05.2019 abgegeben werden.

4)

8 Punkte

Betrachten Sie das großkanonische Ensemble mit der inversen Temperatur $\beta > 0$, dem chemischen Potential μ und dem Volumen V.

i) Zeigen Sie, dass $\langle \hat{N} \rangle = 0$ für $\mu \to -\infty$.

ii) Zeigen Sie, dass

$$\left. \frac{\partial \langle \hat{N} \rangle}{\partial \mu} \right|_{\beta, V} = \beta \left(\langle \hat{N}^2 \rangle - \langle \hat{N} \rangle^2 \right).$$

Schließen Sie daraus, dass zu der Gleichung $\langle \hat{N} \rangle = N$ genau eine einzige Lösung μ für alle $V, \beta > 0$ und $N \geq 0$ existiert.

iii) Zeigen Sie, dass

$$\langle \hat{N} \rangle = \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln Z_{gc}(\beta, V, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\beta, V} .$$