Übung 3 für Statistische Mechanik im SS 2016

Prof. Dr. Andreas Klümper
Norman Gundlach (n.gundlach@uni-wuppertal.de F.12.15)
Yahya Öz (y.oez@uni-wuppertal.de G.11.07)

Abgabe: 29.04.2016, 12:00 Uhr in Postfach Öz auf D.10
Besprechung: 03.05.2016, 08:30 Uhr / 06.05.2016, 10:15 Uhr

1. **Gerichtetes Kettenmolekül** (7)
   In einem vereinfachten Modell sei angenommen, dass ein Kettenmolekül nur folgende Zustände annehmen kann: Die N Atome befinden sich auf Positionen (x_j, y_j) eines Quadratgitters (x_j, y_j ganzzahlig). Der Anfang der Kette sei bei $x_0 = y_0 = 0$ fixiert. Die weiteren Atome seien mit den Bedingungen

$$x_j - x_{j-1} = 1, \qquad |y_j - y_{j-1}| = 1 \tag{1}$$

   an dieses angehängt. Damit ist die Kette in x-Richtung ausgerichtet und kann keine Schleifen bilden.

   (a) Berechne die Anzahl aller möglichen Mikrozustände.

   (b) Ein Makrozustand (N, y) sei die Gesamtheit aller Mikrozustände mit Kettenende bei $y_N = y$. Wie groß ist die Anzahl $W\,(N, y)$ der zugehörigen Mikrozustände?

   (c) Sei analog ein Makrozustand (j, y) durch Angabe der Position $y_j = y$ des j-ten Atoms definiert. Wie groß ist dann die Zahl der zugehörigen Mikrozustände? Berechne außerdem $\sum_y W\,(j, y)$.

   (d) Berechne die mittlere Auslenkung des Kettenendes

$$\bar{y} = \sqrt{\frac{\sum_y y^2 W\,(N, y)}{\sum_y W\,(N, y)}} \tag{2}$$

   Tipp: Die Summe kann durch den Trick $y = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} z^y \Big|_{z=1}$ berechnet werden.

2. **Zentraler Grenzwertsatz** (7)

   Eine Zufallsvariable X unterliege einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $\rho(x)$, sodass der Mittelwert $\bar{x}$ und die Schwankung $\triangle x$, gegeben durch

$$\bar{x} = \int \mathrm{d}x x \rho(x), \qquad (\triangle x)^2 = \int \mathrm{d}x \, (x - \bar{x})^2 \rho(x), \tag{3}$$

   endlich sind. Aus N gleichartigen Zufallsvariablen $X_1, \ldots, X_N$ bilden wir die neue Zufallsvariable

$$Y = \frac{1}{N} \sum_j X_j. \tag{4}$$

   (a) Berechne Mittelwert und Schwankung von Y.

   (b) Betrachte die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\omega(y)$ von Y. Zeige, dass ω im wesentlichen die Faltung der Verteilungsfunktionen ρ der X_j ist.

   (c) Untersuche den Limes $N \to \infty$ von $\omega(y)$.
   Tipp: Betrachte die Fouriertransformierte $\chi(k) = \int \mathrm{d}y e^{iky} \omega(y)$. Zeige zunächst $\chi(k) = \Phi^N\left(\frac{k}{N}\right)$ mit $\Phi(k) = \int \mathrm{d}x e^{ikx} \rho(x)$. Entwickle dann $\ln \chi(k)$ nach Potenzen von N^{-1} bis zur 2. Ordnung. Bestimme nun $\omega(y)$ durch Fourierrücktransformation von $\chi(k)$.

3. **Zwei $S = \frac{1}{2}$ Spins** (6)

   Gegeben sei ein System von zwei $S = \frac{1}{2}$ Spins, welches sich im (reinen) Zustand $|\psi\rangle$ befindet. Allgemein ist $|\psi\rangle$ eine Linearkombination aus den vier Zuständen $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ (siehe Blatt 0).

   (a) Berechne den Dichteoperator $\boldsymbol{\rho}_{\text{ges}}$.

   (b) Aus dem Dichteoperator $\boldsymbol{\rho}_{\text{ges}}$ des Gesamtsystems soll nun der Dichteoperator $\boldsymbol{\rho}_1$ für den Spin Nr. 1 berechnet werden. Dazu wird die Teilspur im Zustandsraum des Spins Nr. 2 gebildet (siehe Blatt 0).

$$\boldsymbol{\rho}_1 = \mathrm{tr}_2 \boldsymbol{\rho}_{\text{ges}} \tag{5}$$

   Prüfe, in welchem Fall sich das Teilsystem Spin Nr. 1 in einem reinen Zustand befindet.

   (c) Betrachte für die Dichteoperatoren $\boldsymbol{\rho}_{\text{ges}}$ und $\boldsymbol{\rho}_1$ die Entropie

$$S = -k_B \mathrm{tr}_x \left(\boldsymbol{\rho}_x \ln \boldsymbol{\rho}_x\right). \tag{6}$$

   Interpretiere das Ergebnis.