Universität Bonn 09.11.2010
Physikalisches Institut
Prof. Dr. J. Kroha, K. Ballmann, R. Katzer
http://www.th.physik.uni-bonn.de/th/groups/kroha/teaching/StatMech_WS10/

Theoretische Physik IV — WS 2010/11

Übungsblatt 5

(Abgabe am 16. November, Besprechung vom 16. bis 18. November)

5.1 Energiefluktuationen im kanonischen Ensemble (7 Punkte)

Für ein kanonisches Ensemble ist die relative Häufigkeit eines reinen Zustands $|n\rangle$ gegeben durch

$$W_K(n) = \frac{1}{Z_K} \exp(-\beta E_n),$$

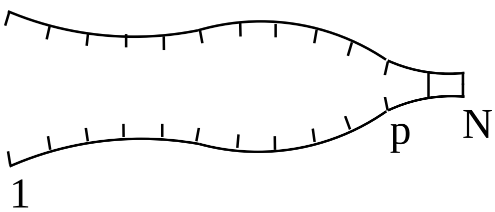
mit $\beta = 1/k_B T$ und der Zustandssumme $Z_K = \sum_n \langle n| \exp(-\beta E_n)|n\rangle$, wobei über alle reinen Zustände $|n\rangle$ summiert wird. Zeige, dass die Energieschwankungen gegeben sind durch

$$\langle(\Delta E)^2\rangle = kT^2 \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right).$$

Stelle den Zusammenhang mit der Wärmekapazität C_V her. Wie hängt die Energiefluktuation pro Teilchenzahl $\sqrt{\langle(\Delta E)^2\rangle}/N$ von der Teilchenzahl N ab? Was folgt daraus für die Anwendbarkeit von kanonischem und mikrokanonischen Formalismus?

5.2 Reißverschlussmodel für DNS-Moleküle (8 Punkte)

Die Mikrozustände eines doppelstrangigen Polymers (DNS) werden in einem einfachen Modell wie folgt festgelegt:



Die beiden Stränge können an den Stellen 1, 2, ..., N Bindungen miteinander eingehen. Eine geschlossene Bindung hat dabei die Energie $\epsilon_0 = 0$, eine geöffnete Bindung die Energie $\epsilon \neq 0$. Die p-te Bindung kann nur offen sein, wenn alle Bindungen 1, 2, ..., $p-1$ ebenfalls offen sind. Die N-te Bindung kann nicht geöffnet werden.

(a) Mache dir zunächst klar, warum der kanonische Formalismus angewendet werden kann. Bestimme dann die kanonische Zustandssumme $Z_K(T)$!

(b) Berechne die mittlere Zahl $\langle n\rangle$ der offenen Bindungen als Funktion von $x = e^{-\beta\epsilon}$.

(c) Bestimme anschließend den Anteil $\langle n\rangle/N$ der offenen Bindungen im Limes $N \to \infty$ für $x < 1$ und $x > 1$. Zeichne $\langle n\rangle/N$ für $N \to \infty$ als Funktion von x.

5.3 Zentraler Grenzwertsatz (15 Punkte)

Eine Zufallsgröße X kann die Werte $x \in M$ mit einer Wahrscheinlichkeit $p(x)$ annehmen (M heißt Ereignisraum des Zufallsexperiments). Die Zufallsgröße X werde nun N-mal *unabhängig* gezogen, wobei der Mittelwert der gezogenen Werte eine neue Zufallsgröße Y definiert:

$$Y:\ y = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \ .$$

Wir wollen die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_N(y)$ von Y im Grenzfall $N \to \infty$ bestimmen

(a) Zunächst sei N fest. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis $(x_1, x_2, ..., x_N)$? Drücke die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_N(y)$ formal mit Hilfe der $p(x_i)$ aus.

Es ist nützlich, die *charakteristische Funktion* einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(x)$ zu definieren als

$$\chi(k) = \int dx\ e^{ik(x-\langle x\rangle)} p(x)\ .$$

Wie man sieht, hängt sie eng mit der Fouriertransformierten von $p(x)$ zusammen.

(b) Zeige, dass die charakteristische Funktion von $P_N(y)$ gegeben ist durch

$$X_N(k) = \int dx_1 dx_2 ... dx_N\ e^{i\frac{k}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \langle x\rangle)} p(x_1)p(x_2)...p(x_N) = \left[\chi\left(\frac{k}{N}\right)\right]^N$$

(c) Zeige nun unter der Voraussetzung, dass alle Momente (siehe unten) der Verteilung $p(x)$ existieren, dass für den Grenzfall $N \to \infty$ folgt

$$X_N(k) \overset{N\to\infty}{\longrightarrow} e^{-\frac{\sigma^2}{2N}k^2}.$$

Entwickle dazu $\ln \chi$ nach k/N.

(d) Bestimme damit schließlich die Wahrscheinlichkeitsverteilung $\overline{P}(y) = \lim_{N\to\infty} P_N(y)$ und die Breite $\sqrt{\langle(\Delta y)^2\rangle}$.
Hinweis: $\int dt\ e^{-i\omega t} e^{-at^2} = \sqrt{\pi/a}\ e^{-\omega^2/4a}$ für $a > 0$

Definition: n-tes Moment einer Verteilung $p(x)$:

$$\langle x^n\rangle = \int dx\ x^n p(x).$$

Beispiele:

Normierung:	$\langle x^0\rangle = \int dx\ p(x) = 1$	
Mittelwert:	$\langle x^1\rangle = \int dx\ xp(x) = \langle x\rangle$	
2. Moment:	$\langle x^2\rangle = \int dx\ x^2 p(x)$	(Varianz: $\sigma^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2$)