Statistische Physik

Prof. Dr. Kurt Busch

SoSe 2017, Blatt 4a
09. Mai 2017

---

1. Reißverschlussmodell eines DNS-Moleküls (3+2+2 Punkte)

Die Mikrozustände eines doppelstrangigen Polymers sind wie folgt festgelegt:
(i) Die beiden Stränge können an den Stellen 1, 2, ..., N Bindungen eingehen. Eine geschlossene Bindung hat die Energie $\epsilon_0 = 0$, eine offene die Energie $\epsilon \neq 0$.
(ii) Die p-te Bindung kann nur geöffnet werden, wenn die Bindungen 1, 2, ..., p-1 bereits offen sind. Die N-te Bindung kann nicht geöffnet werden.
Dieses Modell ist auch als das Reißverschlussmodell eines DNS-Moleküls bekannt (siehe Skizze).

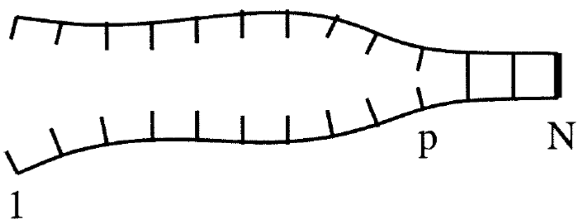

Fig.: Reißverschlussmodel eines DNS-Moleküls

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

(b) Berechnen Sie die mittlere Zahl $\langle n \rangle$ offener Bindungen als Funktion von $x = e^{-\beta\epsilon}$, wobei $\beta = 1/kT$ ist.

(c) Was folgt für den Anteil $\langle n \rangle / N$ offener Bindungen im Limes $N \to \infty$?

2. Ideales Gas aus zwei-atomigen Molekülen (2+3+1 Punkte)

Ein Gas aus N Molekülen im Volumen V besitzt Schwingungs-, Rotations- und Translationsfreiheitsgrade. Es ist an ein Wärmebad der Temperatur T angekoppelt (kanonische Gesamtheit).

(a) Die Schwingungsenergie *eines* Moleküls ist $E_n^{\mathrm{osz}} = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$, $n = 0,\ 1,\ 2,\ ...$ Wodurch sind die Mikrozustände der Schwingungsbewegung des Gases festgelegt? Berechnen Sie die kanonische Zustandssumme Z^{osc}, die (innere) Energie E^{osz} und die spezifische Wärmekapazität c_V^{osz} des Gases. Geben Sie das asymptotische Verhalten von c_V^{osz} für $T \to 0$ und $T \to \infty$ an.

(b) Die Rotationsenergie eines Moleküls lautet $E_l^{\mathrm{rot}} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$, $l = 0,\ 1,\ 2,\ ...$, wobei I das Trägheitsmoment des Moleküls bzgl. der entsprechenden Rotationsachse bezeichnet. Wie sind die Mikrozustände des Gases festgelegt (beachten Sie mögliche Entartungen!)? Geben Sie die kanonische Zustandssumme Z^{rot} des Gases an und berechnen Sie E^{rot} und c_V^{rot} für $T \to 0$ und $T \to \infty$.
Die Ergebnisse lauten:

$$\begin{aligned} c_V^{\mathrm{rot}}|_{T\to 0} &= 3Nk\left(\beta\hbar^2/I\right)\exp\left(-\beta\hbar^2/I\right) \\ c_V^{\mathrm{rot}}|_{T\to\infty} &= Nk\left(1 + \frac{1}{45}\left(\beta\hbar^2/2I\right)\right) \end{aligned}$$

(c) Geben Sie E^{trans} und c_V^{trans} der Translationsbewegung an.
Begründen Sie: $c_V = c_V^{\mathrm{osz}} + c_V^{\mathrm{rot}} + c_V^{\mathrm{trans}}$.

Hinweise zu (b):
$T \to 0$: Entwickeln Sie $\ln(Z)$ in $\exp(-\beta\hbar^2/2I)$.
$T \to \infty$: Entwickeln Sie $\ln(Z)$ in $\beta\hbar^2/2I$ und verwenden dabei die Euler-MacLaurinsche Summenformel $\sum_{l=0}^{\infty} f(l) \simeq \int_0^\infty \mathrm{d}x f(x) + \frac{f(0)}{2} - \frac{f'(0)}{12} + \frac{f'''(0)}{720} + ...$ (Zur Bestimmung der führenden Ordnung in βg benötigen Sie alle angegebenen Terme).