Soft Matter Theory

7. Übungsblatt

Abgabetermin: Dienstag, 31. Januar 2012, vor der Vorlesung

11*. Gaußsche Kette (7 Zusatzpunkte)

Die Verteilung der Bindungsvektoren $\{\tilde{\mathbf{b}}_n = (\mathbf{R}_{n+1} - \mathbf{R}_n)\}$ einer Gaußschen Kette aus N Monomeren an den Orten $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N$ ist

$$\Psi(\{\tilde{\mathbf{b}}_n\}) = \prod_{n=1}^{N-1} \left(\frac{3}{2\pi b^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3}{2b^2} \tilde{\mathbf{b}}_n^2\right).$$

- a) Zeigen Sie, dass für die Verteilung der Abstände zwischen beliebigen Monomeren n und m ($n, m = [1, N]$) gilt:

$$\Phi(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) = \left(\frac{3}{2\pi b^2 |n - m|} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{3}{2b^2} \frac{(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2}{|n - m|}\right).$$

Bestimmen Sie den mittleren quadratischen Abstand $\langle (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2 \rangle$.

- b) Der Gyrationradius ist ein charakteristisches Maß für die räumliche Ausdehnung des Knäuls und wird definiert durch

$$R_g^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \langle (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_{\text{cm}})^2 \rangle,$$

wobei $\mathbf{R}_{\text{cm}} = \sum_n \mathbf{R}_n / N$ der Massenschwerpunkt ist. Zeigen Sie zunächst $R_g^2 = \frac{1}{2N^2} \sum_{n,m=1}^N \langle (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)^2 \rangle$ und berechnen Sie dann damit R_g^2 für die Gauß-Kette.

Hinweis: Die exakte Berechnung der Summen ist problemlos möglich. Sie dürfen aber zur Vereinfachung in Integrale umgeschrieben werden. Von welcher Ordnung ist der Fehler?

c) Berechnen Sie den Strukturfaktor

$$S_{\mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_{n,m=1}^N \langle e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)} \rangle$$

für die Gaußsche Kette und schreiben Sie ihn in der Skalenform

$$S_{\mathbf{q}} = N f(R_g^2 \mathbf{q}^2).$$

Analysieren Sie das asymptotische Verhalten in den Grenzfällen $R_g^2 \mathbf{q}^2 \ll 1$ und $R_g^2 \mathbf{q}^2 \gg 1$. Skizzieren Sie den Verlauf von $S_{\mathbf{q}}$. Begründen Sie, warum die Form $S_{\mathbf{q}} \approx N/(1 + R_g^2 \mathbf{q}^2/2)$ eine akzeptable Näherung darstellt.

12*. **Jarzynski-Gleichung** (5 Zusatzpunkte)

Es soll das „work fluctuation theorem“

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (1)$$

bewiesen werden. Dabei bezeichnet ΔF die Differenz der freien Energie zweier Gleichgewichtszustände und W die Arbeit, die bei der Überführung vom Anfangs- in den Endzustand am System verrichtet wird. Die Mittelung $\langle \dots \rangle$ erfolgt über alle möglichen Prozessführungen, insbesondere auch solche, die das System zwischenzeitlich beliebig stark ins Nichtgleichgewicht treiben.

a) Begründen Sie, dass der Hamiltonian eines N-Teilchen-Systems mit Koordinaten $\Gamma = \{\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N\}$ zum Zeitpunkt $t = t_e$ gegeben ist durch

$$H_1[\Gamma(t_e)] = H_0[\Gamma(0)] + \int_0^{t_e} dt \dot{\lambda} \frac{\partial H_\lambda[\Gamma(t)]}{\partial \lambda},$$

wenn es sich bei $t = 0$ im Gleichgewichtszustand mit Hamiltonian H_0 befand. Das Überführungsprotokoll sei $\lambda(t)$ mit $\lambda(0) = 0, \lambda(t_e) = 1$. Identifizieren Sie die geleistete Arbeit $W(t_e)$.

b) Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle e^{-\beta W(t_e)} \rangle$ per Mittelung über alle Gleichgewichts-Anfangszustände $\Gamma(0)$. Zeigen Sie damit Gleichung (1).

Hinweis: Nutzen Sie dazu eine Eigenschaft des Phasenraumvolumens Hamiltonscher Systeme.

c) Was folgt aus der Jensenschen Ungleichung $e^{\langle X \rangle} \leq \langle e^X \rangle$ für die mittlere geleistete Arbeit?

d) Welche Aussage lässt sich aus c) für die experimentelle Durchführbarkeit einer Bestätigung der Jarzynski-Gleichung machen?