Universität Tübingen
Mathematisches Institut
Dr. Stefan Keppeler

Sommersemester 09

Mathematik II für Naturwissenschaftler

Übungsblatt $7\frac{1}{2}$ (Abgabe nach Vereinbarung mit Ihrem Tutor)

Aufgabe 31 (Boltzmannverteilung) (20 Zusatzpunkte)
Wir suchen ein Extremum der Funktion $S : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ gegeben durch

$$S(w_1, \ldots, w_n) = -\sum_{j=1}^{n} w_j \log w_j \qquad (\textit{Entropie})$$

unter den Nebenbedingungen

$$\sum_{j=1}^{n} w_j = 1 \qquad \text{und} \qquad \sum_{j=1}^{n} w_j E_j = U$$

(Normierung der *Wahrscheinlichkeiten* w_j und Vorgabe der mittleren *Gesamtenergie* U). Dabei sind $0 \le E_1 \le E_2 \le \cdots \le E_n$ (*Energieniveaux*) und U vorgegebene Konstanten.

a) Definieren Sie die Lagrangefunktion

$$L(w_1, \ldots, w_2, \lambda, \beta) = S(w_1, \ldots, w_n) - \lambda \left(\sum_{j=1}^{n} w_j - 1 \right) - \beta \left(\sum_{j=1}^{n} w_j E_j - U \right) ,$$

und geben Sie die Bestimmungsgleichungen für potentielle Extrema von S unter den angegebenen Nebenbedingungen an.

b) Lösen Sie $\frac{\partial L}{\partial w_j} \stackrel{!}{=} 0$ nach w_j auf, und zeigen Sie, dass für die Lösung gilt:

$$w_j = \frac{1}{Z(\beta)} \, \mathrm{e}^{-\beta E_j} \qquad (\textit{Boltzmann-Verteilung}),$$

$$\text{wobei} \qquad Z(\beta) := \sum_{j=1}^{n} \mathrm{e}^{-\beta E_j} \qquad (\textit{Zustandssumme}) .$$

c) Zeigen Sie, dass für die Lösung des Systems aus (a) gilt

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) .$$

Dies ist die Gleichung für den noch zu bestimmenden Parameter β (*inverse Temperatur*).

d) Betrachten Sie nun den Spezialfall $E_j = \omega(j + \frac{1}{2})$ (*harmonischer Oszillator*), $j = 0, 1, 2, \ldots, n$ mit $\omega > 0$ (fest) im Limes $n \to \infty$. Berechnen Sie zunächst Z (als Funktion von β), daraus U (als Funktion von β) und schließlich β (als Funktion von U).