

Mathematik II für Naturwissenschaftler*innen

Übungsblatt $\sqrt{101}$ (Abgabe freiwillig bis 13.07.2023, 10:00)

Aufgabe 42¹ (Boltzmannverteilung) (10 Zusatzpunkte)

Wir suchen ein Extremum der Funktion $S : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben durch

$$S(w_1, \dots, w_n) = - \sum_{j=1}^n w_j \log w_j \quad (\text{Entropie})$$

unter den Nebenbedingungen

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

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

a) Definieren Sie die Lagrangefunktion

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

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:

$$w_j = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E_j} \quad (\text{Boltzmann-Verteilung}),$$

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

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

¹Diese Aufgabe wird nicht (oder nicht vollständig) in den Übungsgruppen besprochen.