

## Mathematik II für Naturwissenschaftler

Übungsblatt  $8\frac{1}{2}$  (Abgabe freiwillig am 20.6.2013)

---

### Aufgabe 40 (Boltzmannverteilung)

(20 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  $\beta$  (*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  $\beta$ ), daraus  $U$  (als Funktion von  $\beta$ ) und schließlich  $\beta$  (als Funktion von  $U$ ).