Statistische Physik und Thermodynamik, SS 2026

Prof. Dr. Michael Bonitz

Übungszettel 4, Abgabe 12. Mai 10:15

1. **Wiederholung**: *Statistische Mechanik des Gleichgewichts. Entropie*[1]
   (a) Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen Wahrscheinlichkeit eines Zustandes, Gleichgewichtsverteilung und Entropie.
   (b) Vergleichen Sie Boltzmanns Entropieformel (1) und den Ausdruck über die Wahrscheinlichkeitsverteilung $f(x)$.
   (c) Erläutern Sie die Shanonnsche Information und ihren Zusammenhang mit der Entropie.
   (d) Erläutern Sie die Extremaleigenschaften von Entropie und Information.

2. **Theorie**: *Dichteoperator und Dichtematrix*
   (a) Erläutern Sie den Dichteoperator eines integrablen Systems. Diskutieren Sie die Diagonal- und Offdiagonal-Beiträge der Dichtematrix. Erläutern Sie das Verallgemeinerte Gibbs-Ensemble. (Grundlage: Skript)

3. **Aufgaben**: *Gleichgewichts-Verteilung. Entropie* (22 Punkte)
   (a) Leiten Sie die Boltzmann-Formel für den Zusammenhang von Entropie und Zustands-Wahrscheinlichkeit W (Zahl der Mikrozustände, nicht normiert),
   $$S = k_B \ln W \tag{1}$$
   ab. Verwenden Sie folgende Voraussetzungen:
   $$\begin{aligned} S(W) &= f(W), \\ f(W_1 \cdot W_2) &= f(W_1) + f(W_2)\,. \end{aligned}$$
   Hinweis: man differenziere f nach den Argumenten und finde die allgemeine Lösung der Differentialgleichung. (5 Punkte)
   (b) Man leite die verallgemeinerte Gibbs-Verteilung p_i^{GGE} (generalized Gibbs ensemble) aus dem Extremalprinzip der Entropie ab mit den Nebenbedingungen
   $$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{M} p_i &= 1, \\ \sum_{i=1}^{M} A_i^{(k)} p_i &= \overline{A^{(k)}}, \end{aligned}$$

[1] Theoriefragen sind mündlich zu beantworten, die wichtigsten Schritte überzeugend zu erläutern.

s. Vorlesung. Die Verteilung ist zu normieren. Zeigen Sie, dass die Entropie für p_i^{GGE} maximal ist und bestimmen Sie $S(p_i^{GGE})$. (7 Punkte)

(c) Im Skript wurde, ausgehend von Boltzmanns Formel (1) die Entropie eines klassischen nichtwechselwirkenden Vielteilchensystems aus N identischen Teilchen mit der vorgegebenen (beliebigen) Wahrscheinlichkeits-Dichte $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ mit der Normierung $\int d^6\Omega\, f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = 1$ berechnet. Dazu wurde der Phasenraum in M gleiche Teilvolumina $\Delta\Omega_i$ zerlegt und die mittlere Zahl der Teilchen ΔN_i in $\Delta\Omega_i$ durch f bestimmt. Boltzmanns W wurde bestimmt als Gesamtzahl der Möglichkeiten, N identische Teilchen auf M Teilintervalle zu verteilen (Permutation mit Wiederholung). Im Limes $N \to \infty$ wurde schließlich die Stirling-Formel $N! \approx (N/e)^N \sqrt{2\pi N}$ benutzt.

i. Verallgemeinern Sie die Untersuchung auf den Fall von $K = 2, 3, \ldots$ verschiedenen Teilchensorten.

ii. Verallgemeinern Sie die Betrachtung (für 1 Sorte) auf den Quantenfall. Die Entropieformel, die sich dann ergibt, lautet $S = -k_B \mathrm{Tr}\hat{\rho} \ln \hat{\rho}$, wobei $\hat{\rho}$ aus Einteilchen-Zuständen gebildet wird.

(10 Punkte)