Hermann Schulz

Statistische Physik

beruhend auf Quantentheorie
Eine Einführung

Verlag
Harri
Deutsch

Hermann Schulz, Hochschuldozent
Geboren 1938 in Zittau, Promotion 1970 bei W. Brenig in München
1973–2000 am Institut für Theoretische Physik der Universität Hannover
Arbeitsgebiet: QCD bei hoher Temperatur
E-Mail: hschulz@itp.uni-hannover.de

Verlag Harri Deutsch
Gräfstr. 47
60486 Frankfurt

www.harri-deutsch.de/verlag/
verlag@harri-deutsch.de
Fax: 069 77 01 58 69

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über ⟨ http://dnb.ddb.de ⟩ abrufbar.

ISBN 3-8171-1745-0

1. Auflage 2005

Druck: betz-druck GmbH, Darmstadt
Printed in Germany

Vorwort

Die Statistische Physik ist ein altehrwürdiges und faszinierendes Gebiet, vor allem aber ein sehr großes. Weil man grob gesprochen alles warm machen kann, vom Universum bis zum Atomkern, könnte die Statistik in jedem Anwendungsbereich der Physik ein Zuhause haben. So ist es aber nicht ganz. Damit nämlich das „Zuhause“ die Erwärmung verträgt, muß es ein quantenmechanisches sein. Es ist dem Siegeszug der Quantentheorie zuzurechnen, daß Quantenstatistik konsequent durchführbar ist. Die sogenannte klassische statistische Physik hingegen, die geht gar nicht. Meist bleibt sie nur unvollständig, aber bei manchen Systemen versagt sie völlig.

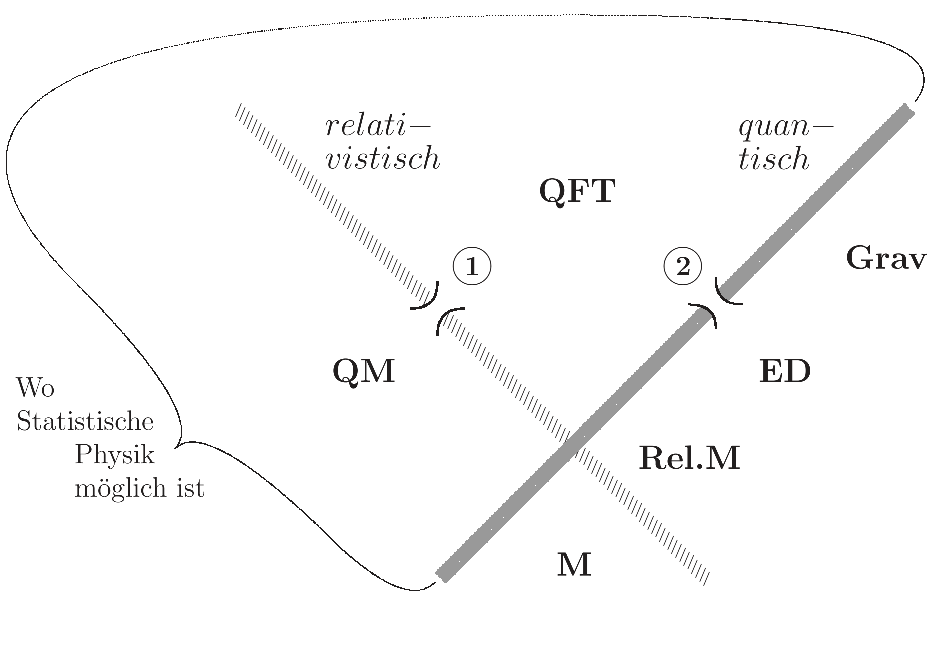
Unter dem Umfang der Thematik scheinen die einschlägigen und guten Lehrbücher allesamt ein wenig zu leiden. Notorisch gerät die Fülle der Beispiele und Anwendungen in Konflikt mit der zeitlichen Enge eines Semesters. Dagegen darf sich ein Studienbuch wohl etwas mehr Freiheiten einräumen. Es kann dem Motto „weniger ist mehr“ folgen und zum Beispiel den Anfangsgründen besonderen Wert beimessen. Möglicherweise sind es nämlich bereits die Grundlagen, bei denen sich die Schwierigkeiten häufen. Ein Studierender hat wenig Zeit für tiefsinniges Nacharbeiten, und mitunter bleibt ihm dadurch — wie schade — die gesamte Statistische Physik ein wenig fremd.

Der vorliegende Band geht auf Vorlesungen und zugehörige Übungen zurück. Seine Konzeption ist also getestet worden. So wird beispielsweise die Summenformel für die Entropie, $S = -\sum p \ln(p)$, als ordnendes Element benutzt. Sie trifft in *jedem* Ensemble zu. Auch *kleine* Systeme kann man an den Ofen halten, woraufhin insbesondere einfache Übungen möglich werden. Eine Boltzmann–Konstante gibt es nicht (sie ist Eins), und die Temperatur ist ein Parameter mit Dimension Energie, denn als solcher erleichtert er das Verstehen vieler Zusammenhänge. Übungsaufgaben sind direkt in den Text eingestreut und stets mit kurzen Lösungen versehen — à la Landau sozusagen. Sie sind eng mit dem Stoff verwoben. Manchmal wird im späteren Text auf deren Resultate verwiesen.

Eine weitere Buch–Eigenart braucht etwas Erklärung. Heutzutage wird viel gearbeitet. Die Teilgebiete der Physik wachsen, werden anstrengender und intelligenter. Kaum versteht man noch, was „die da drüben im Nebentrakt“ eigentlich treiben. Die Einheit der Physik ist von babylonischer Zersplitterung bedroht — wo es doch nur eine Natur gibt, also auch nur eine Physik. Sobald sich beim Entstehen dieses Buches solche Gedanken einstellten, wurde ihnen recht hemmungslos Rechnung getragen. So ist den meisten Themen eine quantenmechanische „Fadenaufnahme“ vorangestellt, sei es nun Rekapitulieren für die einen oder Neuigkeit für die anderen, dienlich hoffentlich allemal.

Quantentheorie lebt von ihren Anwendungen. Statistische Physik ist eines ihrer Anwendungsgebiete. Sich vom Gewinn an Erklärungen der Realität faszinieren zu lassen, ist die normale Haltung. Anwendungen zu studieren kann aber auch „rückwärts“ als Vertiefung angesehen werden, nämlich des Verstehens der Quantennatur der Welt. Es ist ein etwas verwegener Gedanke, aber verboten ist er nicht.

Die übliche Unterteilung der Theoretischen Physik in M (Mechanik), ED (Elektrodynamik), QM (Quantenmechanik) usw. wird vermutlich meist vertikal gesehen: immer höher hinauf. Es hat jedoch einiges für sich, die Gebiete wie in nachstehendem Diagramm anzuordnen.



Wird der schraffierte Graben überquert, so wird die zuvor betriebene Physik relativistisch richtig. Jenseits der dunklen Diagonalen — einer tiefen Schlucht, schwieriger zu bewältigen — liegen die grünen Gefilde quantentheoretisch richtiger Physik. Hier haben die Statistiken ihren Lebensraum. Auf die zwei numerierten Übergänge wird im Text verwiesen werden. Die Brücke 1 liegt ganz im Inneren des statistischen Weidelandes. Sie wird im

§ 7.4 explizit überschritten (Dirac–Gleichung). Der Zugang ② wird im § 8.1 geschaffen (Strahlungsfeld–Quantisierung). Er führt von einer statistisch absurden Situation (divergierende Energie des Strahlungs–Hohlraumes) in eine heile Welt.

Zugegeben, in der Figur liegt auch etwas Bosheit verborgen. Sind im Studium M, ED und QM bewältigt worden, vielleicht sogar je mit Anwendungsbereichen, dann kommt das Diagramm daher wie eine Hiobs–Botschaft: „Oh, mir fehlt ja noch völlig der vierte Quadrant!“ Es ist ein heilsamer Schrecken. Will das Studium der Physik modern bleiben, so wird es sich wohl hin und wieder straffen und auf grundsätzlich zu Leistendes besinnen müssen.

Für die kritische Durchsicht von Teilen des Manuskriptes möchte ich F. Göhmann, J. Reinbach, M. Reuter und A. Ziegler herzlich danken, ebenso Frau B. Cirksena für Korrekturen querbeet. Wie schon bei anderer Gelegenheit ließ es sich mit dem Verlagshaus Harri Deutsch trefflich kooperieren. Von dort sorgte insbesondere K. Horn für gute Laune und für Sicherheit bei allen Allgemeinheiten und Feinheiten, wie sie beim Entstehen eines Buches zu beunruhigen pflegen. Dem Verlag Oldenbourg danke ich für die freundliche Erlaubnis, den nachstehenden Auszug hier wiederzugeben.

Hannover, im Januar 2005 *H. Schulz*

Ch. Kittel und H. Krömer, *Physik der Wärme*
Oldenbourg München 1993, 4. Aufl., aus dem Vorwort:

„Eine *korrekte* statistische Darstellung *muß* aber von Anfang an auf den Begriffen der Quantenzustände eines jeden physikalischen Systems aufgebaut werden, statt den traditionellen Versuch zu unternehmen, eine „klassische“ statistische Thermodynamik zu konstruieren, die auf der klassischen Mechanik beruht. Letzten Endes geht das einfach nicht: Selbst das „klassische ideale Gas“ hat eine Entropie, die die Planck'sche Konstante enthält und die sich damit *per definitionem* klassisch nicht erklären läßt: Ohne Quanten–Begriffe gibt es keine diskreten und damit abzählbaren Zustände und ohne abzählbare Zustände bleibt die Entropie unverständlich.

... alle Bewunderung für Boltzmann ist kein Grund, 90 Jahre nach Planck's Einführung des Quantenbegriffes noch weiter so zu tun, als gäbe es eine „klassische“ statistische Thermodynamik – besonders, wenn man erkennt, daß die ganze Theorie *viel* einfacher wird, wenn man es von Anfang an richtig macht ... “

Inhalt

Teil I : Grundlagen

Teil II : Anwendungen

Teil I

Grundlagen

1 Entropie

Statistik ist das Verwalten eines Mangels, nämlich des Mangels an Information. So ist sie denn in vielen Gebieten zu Hause wie z.B. der Soziologie, der Wirtschaft, Biologie oder Meteorologie und so weiter. Volle Information ist dort oft gar nicht erwünscht und würde nur in das Unglück stürzen, selbige auch zu sichten und auszuwerten. Die Kunst besteht darin, aus wenig Information, wenigen Vorgaben, die Antwort auf wenige pauschale Fragen zu erlangen.

In der Statistischen Physik ist es nicht anders. Sie umfaßt alles, was in der Natur trotz Informationsmangel erklärt werden kann. Sofort ist jedoch dieses Wort „Natur“ stark einzuschränken. Soziologie, wiewohl ja irgendwie zur Natur gehörend, liegt derzeit weit, weit außerhalb der Reichweite der Physiker. Wir ergründen das thermische Verhalten von Systemen, welche quantenmechanisch bereits verstanden *sind* (meist zuerst in modellhaft vereinfachten Versionen, gefolgt von Verbesserungen in Richtung Realität, Einbau von Störungen usw.). Das System zu kennen, geht seiner Erwärmung voraus. So ist ja auch beim Würfel zuerst nachzusehen, wie die sechs Flächen bemalt sind, ehe zur Häufigkeit einer Eins etwas vorhergesagt werden kann. Abgesehen von Vorgaben soll das Resultat einer *ab initio* Rechnung nur noch Naturkonstanten enthalten. Vorgaben sind beim Halbleiter die Bandstruktur und die Temperatur, und wir fragen nach so kollektiven Größen wie Leitfähigkeit und spezifischer Wärme. Wenige Vorgaben, wenige Fragen, das paßt zusammen.

Die Entropie ist eine dimensionslose Zahl, welche (als Maß für Informationsmangel) gebildet werden kann, sobald Wahrscheinlichkeiten vorliegen. Hieran läßt sich bereits erahnen, daß beide Begriffe, Entropie und Wahrscheinlichkeit, noch nichts speziell Physikalisches sind. Aber beide regieren durchgehend alle Kapitel dieses Buches.

1.1 Wahrscheinlichkeiten

Bei einem Zufallsspiel (Roulett, Lotto, Karten, Würfel, Münzwurf) mögen sich g Resultate ergeben können: $\nu = 1, 2, 3, \ldots\, g$. Beim Würfel ist $g = 6$, und der Münzwurf hat $g = 2$. Die Wahrscheinlichkeit p_ν dafür, daß Ereignis ν eintritt, ist die durch 100 geteilte Prozent–Angabe. Bei der Münze fallen Zahl und Adler mit $p_{\text{Zahl}} = 1/2$ beziehungsweise mit $p_{\text{Adler}} = 1/2$. Ein Würfel — sofern er „ideal“, d.h. nicht manipuliert ist — zeigt die Sechs mit $p_6 = 1/6$. Prozent–Angaben müssen sich zu 100 addieren, Wahrscheinlichkeiten also zu 1.

Wahrscheinlichkeiten sind meßbare Größen. Wenn wir daran zweifeln, daß ein Würfel ebenmäßig und innen homogen hergestellt wurde, dann haben wir den Lederbecher „unendlich oft“ zu bedienen (in praxi z.B. N mal) und zu notieren, wie oft (N_1 mal) die 1 fällt, und die 2 und so weiter:

$$p_\nu = \left[\frac{N_\nu}{N} \right]_{N\to\infty} \qquad \curvearrowright \qquad \sum_{\nu=1}^{g} p_\nu = 1 \quad . \tag{1.1}$$

Es ist übrigens egal, ob man wirklich nacheinander $N = 1000$ mal den Becher schwingt oder ob man einen Sack mit 1000 identisch hergestellten solchen Würfeln auf dem Parkett einer Turnhalle entleert. „Messen“ heißt hier, bei jedem Würfel nachzusehen, welche Zahl obenauf liegt. Die Frage, wie gut sich schon nach 1000 Würfen ein Betrug des Herstellers nachweisen läßt, lassen wir vorerst beiseite (siehe z.B. [*PB*, § 14.1]). Viel wichtiger ist es, daß wir uns $N = \infty$ *denken* können.

Ensemble

Ein statistisches Ensemble ist die (gedachte) Gesamtheit unendlich vieler, gleich präparierter, identischer Systeme. Mitunter ist im konkreten Falle darüber nachzudenken, genau welches System gemeint ist und was „gleich präparieren“ heißt (man versuche, es zu *sagen*). Beim Würfel–Ensemble heißt präparieren, den Lederbecher gründlich zu schütteln, auf den Tisch zu kippen und zu warten, bis nichts mehr darin klappert. Bei einem Quantensystem kann ein ganz bestimmter Zustand ψ präpariert werden. Es ist aber auch denkbar, daß aufgrund schwächerer Präparierung mehrere ψ's mit gewissen Wahrscheinlichkeiten vorliegen. Statt vom „statistischen Ensemble“ wird übrigens gern auch von einer „statistischen Gesamtheit“ gesprochen: kein Unterschied.

Erst wenn (in Gedanken) das volle Ensemble vorliegt, kann man (in Gedanken) seine g Wahrscheinlichkeiten p_ν messen. Sie sind erst dann wohldefiniert. Wir können sagen, jedes einzelne p_ν sei ein Ensemble–Charakteristikum. Bald lernen wir weitere Ensemble–Charakteristika kennen.

Wahrscheinlichkeiten erscheinen gern in einer Summe oder als Linearkombination oder als Produkt. Eine Summe entsteht beispielsweise, wenn mehrere Ereignisse zu einem einzigen erklärt werden. Mit welcher Wahrscheinlichkeit zeigt der ideale Würfel eine Zahl > 4? — mit $p_{>4} = p_5 + p_6 = 1/6 + 1/6 = 1/3$. Beispiel für Linearkombination sind die Mittelwerte, siehe (1.3). Beispiele für Produkt entstehen bei nur–wenn–dann–Fragen. Nur wenn das Wenn–Ereignis zutrifft (mit Wahrscheinlichkeit p_{wenn}), zählt das Dann–Ereignis (Wahrscheinlichkeit p_{dann}): Resultat $p = p_{\text{wenn}} \cdot p_{\text{dann}}$. Zwei Würfel im Becher, einer rot, einer gelb. Nach N

Würfen ist $N_5 \approx p_{\text{rot } 5} N$ mal die rote Fünf gefallen. Aber erst nach N'–facher Wiederholung des Ganzen ($N \cdot N'$ Würfe insgesamt) findet sich zu jeder roten Fünf auch noch $N_2' \approx p_{\text{gelb } 2} N'$ mal die gelbe Zwei ein:

$$p_{\text{rot 5 und gelb 2}} = \left[\frac{N_5 \cdot N_2'}{N \cdot N'} \right]_{N,N' \to \infty} = p_{\text{rot } 5} \cdot p_{\text{gelb } 2} \quad . \tag{1.2}$$

Man darf sich entspannen: „Es ist wie beim $\frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6}$ dafür, daß bei idealem Würfelpaar zwei Sechsen fallen". Bei (1.2) dürfen die beiden Würfel auch „gezinkt" sein. Taucht die Frage nach Summe oder Produkt in irgendwelcher schlimmen Physik auf, so denke man stets an ihr Analogon bei Würfelspielen.

Übung 1/1 Zwei ideale Würfel im Lederbecher. Mit welcher Wahrscheinlichkeit p wird das Resultat mindestens eine Sechs enthalten?

Lösung $p = \frac{1}{6} \cdot 1 + \left(1 - \frac{1}{6}\right) \cdot \frac{1}{6} = \frac{11}{36}$. Oder: $p = \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6} + \frac{1}{6} \cdot \left(1 - \frac{1}{6}\right) + \frac{1}{6} \cdot \left(1 - \frac{1}{6}\right)$.

Übung 1/2 Auf b Pfählen einer Hafenanlage sitzen a <u>*un*</u>unterscheidbare Seemöwen, $b \geqslant a$. Ab und zu wechseln sie ihren Platz. Das geschieht sehr selten — und niemals, wenn man gerade hinschaut. Wie viele mögliche Anordnungen g der Möwen gibt es? Mit welcher Wahrscheinlichkeit p sind von links an die ersten a Pfähle besetzt? Mit welcher Wahrscheinlichkeit q sitzen die Möwen in einer (egal wo beginnenden) Reihe?

Lösung b Möglichkeiten für die erste Möwe, $b-1$ für die zweite, $b-a+1$ für die letzte. In diesen $\frac{b!}{(b-a)!}$ Möglichkeiten sind möwenvertauschte Anordnungen fälschlich separat gezählt. Darum $g = \frac{b!}{(b-a)!\,a!} =: \binom{b}{a}$, denn in jeder dieser g Anordnungen kann man $a!$ fach Möwen vertauschen. $p = 1/g$. $q = p \cdot (b-a+1)$. Dies im Falle $b = 3$, $a = 2$ kontrollieren?!

Übung 1/3 Zahlenlotto. Zum Spiel „a aus b" ist $p_c = \dfrac{\binom{a}{c}\binom{b-a}{a-c}}{\binom{b}{a}}$ die Wahrscheinlichkeit, c Richtige zu haben ($c < a < b$). Wie kommt das heraus?

Lösung Zu $c = a$ trifft Übung 1/2 zu: $p_a = 1/\binom{b}{a}$. Aus den a Richtigen c herauszugreifen, und aus $b-a$ Falschen die restlichen $a-c$, das gibt im Produkt die beiden Möglichkeits–Anzahlen im Zähler.

a priori

Offenbar kennt man mitunter alle Wahrscheinlichkeiten, ohne die unendlich vielen Messungen an jedem System des Ensembles vorgenommen zu haben. Sie sind *a* *priori* bekannt. Wenn es keinen physikalischen Grund gibt, ein Ereignis vor den anderen auszuzeichnen, dann *sind* alle g Ereignisse gleich wahrscheinlich, d.h. sie haben $p_\nu = 1/g$ für alle ν. Noch einmal und etwas mehr „physikalisch“: Wenn es bei der Präparierung eines Systems keinen Mechanismus (keinen Term im Hamilton–Operator) gibt, welcher ein Resultat einer (quantenmechanischen) Messung vor den anderen zu bevorzugen vermag, dann *sind* diese Resultate gleich wahrscheinlich. Wir kommen hierauf zurück.

Wie die Übungen zeigen, lassen sich aus *a–priori*–Wahrscheinlichkeiten flugs auch allerlei andere (zu anderen Fragestellungen) erhalten. Das ist hübsch. Es macht durstig. Wir werden diese Möglichkeit mit Leidenschaft weiter verfolgen. So — wie denn sonst? — wird es möglich sein, den Einstieg zur Statistischen Physik sehr handfester (kleiner oder auch großer) Systeme zu finden.

Mittelwerte

Unter die Charakteristika eines Ensembles gehören insbesondere Mittelwerte aller Art. Es sind arithmetische Mittel. Die mittlere Körpergröße Ihrer 5–köpfigen Familie ist $(\,\text{Größe}_1 + \ldots + \text{Größe}_5\,)/5$. Die mittlere Augenzahl eines idealen Würfels ist $\langle\nu\rangle = (1+2+\ldots+6)/6 = 3.5$. Bei einem gezinkten Würfel müssen wir bereits auf sein Ensemble zugreifen und $\langle\nu\rangle = [\,(N_1\cdot 1 + \ldots + N_6\cdot 6)\,/N\,]_{N\to\infty} = \sum_\nu p_\nu\cdot\nu$ bilden. Statt die mittlere Augenzahl interessant zu finden, können wir dem „Zustand“ ν des Würfels auch irgendeine andere Größe zuordnen, wie zum Beispiel ν^2 : $\langle\nu^2\rangle = \sum_\nu p_\nu\cdot\nu^2$. Genug der Beispiele. Sehr allgemein (merken?!) können wir schreiben

$$\begin{pmatrix}\text{Mittelwert}\\ \text{einer System–}\\ \text{Eigenschaft}\end{pmatrix} = \sum_\nu p_\nu \cdot \begin{pmatrix}\text{diese Eigenschaft,}\\ \text{die das System hat,}\\ \text{wenn es im Zustand } \nu \text{ ist}\end{pmatrix}$$

$$\text{oder:}\qquad \langle A\rangle := \langle A_\nu\rangle = \sum_\nu p_\nu\, A_\nu \quad . \tag{1.3}$$

Ordnen Sie jedem ν die gleiche Zahl C zu, so entsteht $\langle C\rangle = \sum_\nu p_\nu\, C = C$ mit Spezialfall (1.1). Ohne die obere Summengrenze werden unsere Formeln etwas schlanker: man weiß doch stets, bis wohin (beim Würfel bis $g = 6$, bei physikalischen Systemen oft bis ∞).

Die mittlere quadratische Abweichung ΔA einer Größe A vom Mittelwert, die **Schwankung** von A, wird — sehr wortgetreu — definiert durch

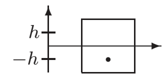
$$\begin{aligned}\Delta A :=& \sqrt{\left\langle\,(\,A_\nu - \langle A\rangle\,)^2\,\right\rangle}\\ =& \sqrt{\left\langle\, A_\nu^2 - 2A_\nu\,\langle A\rangle + \langle A\rangle^2\,\right\rangle} = \sqrt{\langle A_\nu^2\rangle - \langle A\rangle^2} \quad .\end{aligned} \tag{1.4}$$

Übung 1/4

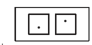
Ein gezinkter Würfel habe $p_2 = \ldots = p_5 =: p$, $p_6 = 2p$ und $p_1 = p/2$.

(a) $p = ?$ $\langle \nu \rangle = ?$ und $\Delta\nu = ?$

(b) Obige Asymmetrie beruhe darauf, daß der Schwerpunkt um h näher an der mit „1“ bemalten Fläche liegt, welche der „6“ gegenüber liegt. Welche mittlere potentielle Energie $\langle V \rangle$ hat der Würfel? Ein Blick voraus auf Bild 1–3 (d) ist nicht verboten.



(c) Finden Sie ein Argument (z.B. anhand nebenstehender Figur), weshalb Schwerpunktabsenkung stets $p_1 = p^2/p_6$ zur Folge hat.



Lösung

(a) $p = \frac{2}{13}$, $\langle \nu \rangle = \frac{53}{13}$, $\langle \nu^2 \rangle = \frac{253}{13}$, $(\Delta\nu)^2 = \langle \nu^2 \rangle - \langle \nu \rangle^2 = \frac{480}{169}$, $\Delta\nu \approx 1.69$.

(b) x–Achse durch Würfelzentrum, $\langle V \rangle = p_1 \cdot mgh + p_6 \cdot (-mgh) = -\frac{3\,mgh}{13}$.

(c) Schwer! Der skizzierte Zustand eines Zwei–Würfel–Systems hat potentielle Energie Null, der Zustand nach Zur–Seite–Kippen beider Würfel ebenfalls. Es gibt keinen physikalischen (hier: energetischen) Grund, die beiden Zustände zu unterscheiden, also ist $p_1 \cdot p_6 = p^2$. — Weiche Knie? Im Kapitel 3 wird die Überlegung unglaublich einfach werden und die Gestalt „ $\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta mgh} \cdot \frac{1}{Z}\mathrm{e}^{\beta mgh} = \frac{1}{Z} \cdot \frac{1}{Z}$ “ annehmen.

Einem Würfel lassen sich viele Flächen anschleifen. Ist er gar rund geschliffen (runder Bleistift), dann liegen die Ereignisse kontinuierlich dicht — wie auch manche Meßwerte an einem Quantensystem. Da dann der Index ν eine kontinuierliche Variable ist, hat nur noch die Frage einen Sinn, mit welcher Wahrscheinlichkeit $p_{\nu \text{ in } (\nu,\nu+d\nu)}$ der Index ν in einem $d\nu$–Intervall erhalten wird. Sie wird zur Intervallgröße proportional sein. Der Proportionalitätsfaktor $P(\nu)$ heißt **Wahrscheinlichkeitsdichte**:

$$p_{\nu \text{ in } (\nu,\nu+d\nu)} =: d\nu\, P(\nu) \quad \curvearrowright \quad \langle A(\nu) \rangle = „\sum p_\nu A_\nu\text{“} = \int d\nu\; P(\nu)\, A(\nu) \quad , \qquad (1.5)$$

denn Integral *ist* Summe. Ein eindimensional in $(-a, a)$ harmonisch mit ω schwingender Massenpunkt kann in dx mit $p = dt/(T/2)$ blind aufgegriffen werden, wobei T die Periode und dt die zum Durcheilen von dx benötigte Zeit ist: $dt = dx/(\omega\sqrt{a^2 - x^2}\,)$ aus Energiesatz. Also ist $P(x) = 1/(\pi\sqrt{a^2 - x^2}\,)$ seine klassische Wahrscheinlichkeitsdichte für Ortsmessung. Sie ist per Konstruktion auf $\int_{-a}^{a} dx\; P(x) = 1$ normiert, wie gemäß (1.5) erforderlich.

Übung 1/5

Ein Teilchen (m) schwingt 1D im Potential $V(x) = V_0 \ln(|x|/a)$ zwischen a und $-a$ hin und her — mit welcher Periode $T = ?$ $P(x) = ?$

Lösung

$E = V(a) = 0$, E–Satz: $T = 4\sqrt{\frac{m}{2}}\, \int_0^a dx\; 1/\sqrt{-V_0 \ln(x/a)}$, Subst. $x = a\,\mathrm{e}^{-\tau^2}$, $T = 2a\sqrt{2m\pi/V_0}$. $P(x) = 2/(T|\dot{x}|) = 1/(2a\sqrt{\pi}\,\sqrt{-\ln(|x|/a)}\,)$.

1.2 Entropie $= -\sum p \ln(p)$

Es gibt noch viel mehr Ensemble–Charakteristika als nur die g Wahrscheinlichkeiten p_ν und die Mittelwerte (1.3). Alles, was sich aus den p_ν bilden läßt, ist selbst Ensemble–charakteristisch. Insbesondere kann man für die A_ν in (1.3) eine Funktion von p_ν wählen. Setzen wir z.B. $A_\nu = 1/p_\nu$, so kommt $\langle 1/p_\nu \rangle = g$ heraus — richtig, aber etwas langweilig. Auf den ersten Blick mag auch die folgende dimensionslose Bildung wie harmlose Spielerei aussehen:

$$S \; := \; \left\langle \ln\left(\frac{1}{p_\nu}\right)\right\rangle \; = \; -\sum_\nu p_\nu \ln(p_\nu) \quad . \tag{1.6}$$

Es ist etwas Schönes, wenn eine bescheidene Definition alsbald zu großer Form aufläuft. (1.6) ist die **Entropie** der Informatiker (Informationsentropie)[1] *und* zugleich die der Physiker. Kaum kennen wir die Wahrscheinlichkeiten in einem der folgenden typisch physikalischen Ensembles, werden wir (1.6) befragen und die Entropie desselben erhalten.

Kein k_B

Erfahrene Leser werden vor dem Summenzeichen in (1.6) einen Vorfaktor k oder k_B vermissen, Boltzmann–Konstante genannt. Er fehlt, weil er *nirgends* benötigt wird und darum nur den Blick auf das Wesentliche von Gleichungen vernebeln würde. In hunderten von Publikationen zur Thermischen Feldtheorie gibt es kein k_B mehr. Allerdings scheint der Leitungsdraht von den Gebräuchlichkeiten in der Originalliteratur bis herunter zu den Hörsälen und Schulen einen großen Widerstand zu haben.

Gegen etwas Vorsicht ist an dieser Stelle nichts einzuwenden. Diese kaltherzigen Feldtheoretiker setzen ja, wie wir wissen, auch gern $\hbar = c = \varepsilon_0 = 1$. Das ist rentabel und gibt den Blick auf die wesentlichen Strukturen frei. Jedoch muß $\hbar$ im Spiel bleiben, wenn mit $\hbar \to 0$ gelegentlich noch der Grenzübergang zu klassischer Physik interessiert. c ist beizubehalten, sofern mit $c \to \infty$ auch nicht–relativistische Versionen interessieren. ε_0 ist beizubehalten, sofern noch Literatur im Gaußschen oder im SI–System angekoppelt bleiben soll. Für Beibehaltung von k_B gibt es hingegen *keinen* Grund. Stets bleiben für Vergleich mit „älterer“ Literatur die Ersetzungen $S = S_{\text{alt}}/k_B$ und $T = k_B T_{\text{alt}}$ problemlos möglich. Insbesondere gilt $T \cdot S = T_{\text{alt}} \cdot S_{\text{alt}}$ (wer gern „alt“ bleibt: $k_B = 1.38\,066 \cdot 10^{-23}$ J/K). Sobald die Temperatur definiert ist, kann mehr dazu gesagt werden, wie es sich ohne k_B gut leben läßt, nämlich im § 2.2 um Gleichung (2.26) herum.

[1] Claude Shannon (1916–1984): „A mathematical theory of communication“ (Bell System Technical Journal, Vol. 27, 1948).

Fünf Eigenschaften

Bei den folgenden fünf Eigenschaften der Entropie stehen die Paragraphen 10 und 11 bei [*Brenig*] Pate. Jedoch wird hier jede Verunsicherung durch den bösen „Statistischen Operator“ (§ 3.2) vorerst tunlichst vermieden. Die Eigenschaften **1.** bis **3.** gelten für *jedes* Ensemble. Bei den restlichen zwei Eigenschaften spielt Gleichverteilung (alle $p_\nu = 1/g$) eine besondere Rolle.

1. Größer–gleich Null. S ist nicht–negativ, $0 \leqslant S$, denn wegen $p_\nu \leqslant 1$ bleiben alle $\ln(p_\nu) \leqslant 0$.

Wegen $\lim_{\varepsilon\to 0} \varepsilon \, \ln(1/\varepsilon) = \lim_{\tau\to\infty} \mathrm{e}^{-\tau}\tau = 0$ tragen einzelne verschwindende Wahrscheinlichkeiten nicht bei. Der tiefste S–Wert, also $S = 0$, wird bei „Sicherheit“ angenommen, d.h. wenn ein p_ν Eins ist und alle anderen Null.

2. *S* ist additiv. Dies meint, daß die Entropie eines aus zwei unabhängigen Teilsystemen I und II bestehenden Gesamtsystems schlicht die Summe der Teil-Entropien ist. Man zeige.

Teilsystem I erlaube g_{I} Resultate mit Wahrscheinlichkeiten p_ν, und System II habe g_{II} Resultate mit q_μ. Die Unabhängigkeit besagt, daß $p_{\nu \text{ bei I und } \mu \text{ bei II}} = p_\nu \cdot q_\mu$ ist und folglich

$$S = -\sum_{\nu=1}^{g_{\mathrm{I}}} \sum_{\mu=1}^{g_{\mathrm{II}}} p_\nu \cdot q_\mu \left[\ln(p_\nu) + \ln(q_\mu) \right] = S_{\mathrm{I}} + S_{\mathrm{II}} \quad , \quad \text{qed.} \tag{1.7}$$

Unordnung im Wohnzimmer plus Unordnung im Schlafzimmer plus … gleich Unordnung der Wohnung. Wieso Unordnung? Oh, bei Eigenschaft **4.** lernen wir das ja erst.

3. Maximalwert. S hat einen größten Wert S_0. Er wird erreicht, wenn alle p_ν gleich sind, gleich $1/g$ also. Demnach ist $S_0 = \ln(g)$.

Um $S \leqslant S_0$ einzusehen, nutzen wir die aus Bild 1–1 hervorgehende Logarithmus–Eigenschaft $\ln(x) \leqslant x - 1$ aus, nämlich so:

$$\begin{aligned} S &= \sum_{\nu=1}^{g} p_\nu \left[\ln\left(\frac{1}{p_\nu \, g}\right) + \ln(g) \right] \\ &\leqslant \sum_{\nu=1}^{g} p_\nu \left[\frac{1}{p_\nu \, g} - 1 + \ln(g) \right] = 1 - 1 + \ln(g) = S_0 \quad , \quad \text{qed.} \end{aligned} \tag{1.8}$$

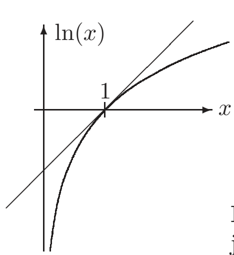


Bild 1–1 : Die Werte des Logarithmus liegen überall unter jenen der Geraden $x - 1$, außer am Berührungspunkt $x = 1$.

Die folgenden zwei Eigenschaften betreffen den Fall, daß alle p_ν gleich sind, die Entropie also ihren maximalen Wert S_0 hat. Diesen Fall werden wir bald das „Mikrokanonische Ensemble“ nennen.

4. Informationsmangel. $I := S_0 \,/\, \ln(2)$ ist gleich der (ggf. mittleren) Anzahl der Ja–Nein–Fragen, um bei optimaler Strategie den vorliegenden Zustand zu erfahren.

(a) Eine (ideale) Münze wurde geworfen. Wir können das Resultat nicht sehen. Nur Fragen, welche mit Ja oder Nein beantwortet werden können, sind erlaubt. Hier genügt eine solche Frage: „Liegt die Zahl oben ?“. Bei Antwort Nein wissen wir, daß es der Bundesadler ist. Zu $p_{\text{Zahl}} = p_{\text{Adler}} = 1/2$ wird $S_0 = \ln(2)$ und $I = 1$. Eine Frage, $I = 1$: die Behauptung trifft zu.

(b) Auf einem Feld eines Schachbretts steht eine Figur. Es gibt $g = 64$ Möglichkeiten, also ist $S_0 = \ln(64) = 6\ln(2)$ und $I = 6$. In der Tat genügen 6 Fragen: 1. „Steht sie in der rechten Hälfte ?“ 2. „in der unteren ?“ 3. „in der rechten dieses Qudranten ?“ 4. „in der unteren desselben ?“ 5. „in der rechten des 4∗4–Feldes ?“ 6. „oben ?“.

(c) Zum idealen Würfel ist $I = \ln(6)/\ln(2) \approx 2.6$. In der Tat sind manchmal 3, manchmal 2 Fragen nötig. Mehr Hintergrund zur Spezialität dieses auf 2.6 führenden Mittels steht bei [*Brenig*]. Wir halten fest, daß — im alle–p–gleich–Falle — die Entropie (1.6) ein gesundes Maß für den Informationsmangel ist. Klingt das arg vornehm? Maß für Unordnung besagt das Gleiche.

5. Wie *S* zunimmt. Indifferente Erschütterungen aller Art treiben ein Ensemble ins **Gleichgewicht**.

Wir haben dieses gefährliche Wort bisher vermieden, zumal alle soweit betrachteten Ensembles „im Gleichgewicht“ waren. Wir kennen mechanisches Gleichgewicht als Position von Massenpunkten, welche nach geringfügiger Vertreibung flugs (per Schwingung und Reibung) wieder eingenommen wird. Denken wir nun an unsere Billion idealer Würfel auf dem Parkett der Turnhalle. Ab und zu rattert draußen ein LKW vorbei und einige Würfel kippen um — ohne die Häufigkeiten zu ändern. Auch die Wärmebewegung von Fußboden und Luft bewirken (über entsprechend lange Zeit) das Gleiche, nämlich nichts. S ist gleich S_0 und bleibt es. Es können aber auch ruhig gezinkte Würfel den Boden füllen: nichts. Dreht aber ein Bösewicht über Nacht bei allen Würfeln die Eins nach oben, dann tut sich danach sehr wohl etwas im Laufe der Zeit. Es läßt sich also „Nicht–Gleichgewicht“ herstellen.

Es hat keinen Sinn, bei einem einzelnen Würfel von Gleichgewicht zu reden (Warnung vor dem recht üblichen Terminus „System im Gleichgewicht“). Gleichgewicht ist eine Ensemble–Eigenschaft. Die Untat des genannten Bösewichts ist nicht strafbar. Er hat nämlich lediglich eine spezielle Präparierung durchgesetzt. Tritt sodann eine andere Präparierung in Kraft, welche mehr Freiheit läßt, so können wir (aus Sicht der letzteren) sagen, das Ensemble sei im Nicht–