

OBERFLÄCHENSpannung UND THERMODYNAMIK DES IDEALEN GASES

INAUGURAL-DISSERTATION

zur Erlangung der Doktorwürde
der Naturwissenschaftlichen Fakultät der
JOHANN-WOLFGANG-GOETHE-UNIVERSITÄT

zu

Frankfurt am Main

vorgelegt

von

EBERHARD HILF

aus

EBERSWALDE

Weihnachten 1966

Gedruckt mit Genehmigung der Naturwissenschaftlichen
Fakultät der Universität Frankfurt am Main.

| | |
|--------------------|----------------------|
| Dekan: | Prof. Dr. J. Stauff |
| Leiter der Arbeit: | Prof. Dr. G. Süßmann |
| Erstgutachter: | Prof. Dr. G. Süßmann |
| Zweitgutachter: | Prof. Dr. H. Bilz |

Tag der mündlichen Prüfung: 1. - 3.3. 1967.

Inhaltsverzeichnis

Thema: Oberflächenspannung und Thermodynamik des idealen Gases

| | Seite |
|---|-------|
| A Einführung | 3-7 |
| B Auswirkung der quantenmechanischen Oberflächenspannung auf die Thermodynamik des idealen Gases | |
| Kap.1: Die Zustandsgrößen | |
| a) Einführung und Methodik | 8-12 |
| b) Zustandsdichte und Zustandssumme | 13-15 |
| c) Die freie Energie | 16 |
| Kap.2: Thermodynamik | 17 |
| a) Einführung der Entropie λ , des Druckes \bar{p} und des chemischen Potentials μ | 18-21 |
| b) Partielle Ableitungen thermodynamischer Größen | 22-23 |
| c) Die thermodynamischen Potentiale f , \bar{v} , g und h sowie ihre totalen Differentiale | 24-27 |
| C Explizite Berechnung einiger spezieller thermodynamischer Größen des idealen Gases mit quantenmechanischer Oberflächenspannung | |
| Kap.3 Oberflächenspannung σ , spezifische Wärme c_v und innere Energie U als Funktionen der Temperatur T , der Teilchenzahl N und des Volumens V für | 28-30 |
| a) Boltzmann-Maxwell-Statistik | 31-32 |
| b) Fermi-Dirac-Statistik bei starker Entartung | 33-36 |
| c) Fermi-Dirac-Statistik bei mittlerer Entartung sowie | 37-39 |
| d) Fermi-Dirac- und Bose-Einstein-Statistik bei schwacher Entartung | 40-43 |
| D Zusammenfassung | 44 |
| Anhang 1: Reihenentwicklungen für die Integrale $J_n(x)$ | |
| 2: Lebenslauf. | |

OBERFLÄCHENSPIANNUNG UND THERMODYNAMIK DES IDEALEN GASES:

A Einführung.

Die Eigenwertgleichung

$$(1) \quad \left(\frac{\partial^2}{\partial \vec{x}^2} + \lambda_n \right) \psi_n(\vec{x}) = 0$$

mit (vorgegebener) Randbedingung auf einer (meist geschlossenen) Fläche \mathcal{W} für die Eigenfunktionen $\psi_n(\vec{x})$ dient in der theoretischen Physik unter dem Namen "freie Schwingungsgleichung" zur Beschreibung der in der Natur so zahlreich auftretenden stationären Schwingungen. Sie ist in mehreren Gebieten der Physik Teil des mathematischen Fundamentes, auf dem nach Erweiterung von (1) durch spezifische Terme das Gebäude der jeweiligen Theorie errichtet wird: durch Hinzufügen eines Potentialtermes $\frac{2m}{\hbar^2} \cdot V(\vec{x})$ wird (1) zur zeitunabhängigen Einteilchen-Schrödingergleichung der Quantenmechanik; die Energie dieses Teilchens ist dabei $\lambda_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \lambda_n$. In der Akustik, ebenso wie in der Theorie des Hohlleiters und des Strahlungshohlraumes als auch in der Gezeitentheorie beschreiben die Eigenfunktionen $\psi_n(\vec{x})$ die Ortsverteilung der Amplituden der stehenden Schall- bzw. elektrischen, magnetischen oder Gezeitenwellen; daher werden sie auch Wellenfunktionen genannt.

Lösungen des Randwertproblems (1), d.h. die explizite analytische Angabe aller Wellenfunktionen und Eigenwerte, sind jedoch nur für wenige spezielle Randbedingungen gefunden worden, so für die Fälle, daß entweder $\psi_n(\vec{x})$ oder aber $\partial \psi_n(\vec{x}) / \partial \vec{x}$ auf der Fläche \mathcal{W} gleich einer vorgegebenen Zahl ist und \mathcal{W} als Oberfläche eines Quaders, einer Kugel oder eines Zylinders beschrieben werden kann. Wird die Randbedingung dagegen auf einer beliebig gestalteten Fläche ohne solche besonderen Symmetrieeigenschaften vorgegeben, so können Eigenwerte und Eigenfunktionen nur einzeln und numerisch errechnet werden.

Für den Aufbau der Thermodynamik eines in dem von der Fläche \mathcal{W} umschlossenen Hohlraumes \mathcal{V} befindlichen idealen Gases - und damit auch für die speziellen Anwendungen "Fermigas-Modell" der Kernphysik, Theorie der Metallelektro- nen und Theorie der Hohlraumstrahlung - werden jedoch nicht die genauen numerischen Werte der Eigenwerte und -funktionen benötigt, sondern es muß lediglich der mittlere Verlauf der Zustandsdichte $\varrho(\xi)$ - d.i. die Zahl der Zustände, deren Eigenwerte im Intervall $(\xi, \xi + d\xi]$ liegen - für grosse ξ möglichst genau bekannt sein.

Nun scheint der mittlere Verlauf der Zustandsdichte $\varrho(\xi)$ für große ξ bemerkenswert unabhängig von der genauen Gestalt des Hohlraums \mathcal{V} zu sein: so fand H.Weyl¹ in den Jahren 1907-1915, daß $\varrho(\xi)$ in erster Näherung (in ξ^{-1}) einfach dem Volumen V des Hohlraumes \mathcal{V} proportional ist. Diese Eigenschaft von $\varrho(\xi)$ wurde zuerst von R.H.Fowler² (1927) für den Aufbau einer quantenstatistisch begründeten Thermodynamik idealer Gase ausgenutzt. Jeder Eigenwert λ wird dabei als von $\bar{v}(\lambda)$ Teilchen besetzt betrachtet; die Besetzungszahldichte $\bar{v}(\lambda)$ hängt ab von der Wahl der Statistik, der die Teilchen des betrachteten Gases genügen sollen - d.h. ob es sich um ein Bose-, Fermi- oder "Boltzmann"-gas handelt - sowie von äusseren Parametern des Systems (zum Beispiel der Temperatur T). $\lambda_n = \frac{h^2}{2m} \xi_n^2$ ist die Energie eines einzelnen Teilchens; die Energie des Systems wird dann

$$(2) \quad E = \int_0^{\infty} d\lambda \cdot \lambda \cdot \bar{g}(\lambda) \cdot \bar{v}(\lambda)$$

(über die mathematischen Voraussetzungen für die Gültigkeit von (2) siehe Kap.1a)). Eine moderne Darstellung der Fowler-schen Theorie ist z.B. von E.Schrödinger³ gegeben worden.

¹H.Weyl, Diss. Göttingen, (1907); - Math. Ann. 66, 273ff., (1908); - Gött. Nachr. 37-64 (Nachr. d. Kgl. Ges. d. Wiss. Gött., math. phys. Klasse), (1909); - Math. Ann. 68, 220ff., (Habilitation), (1910); - Gött. Nachr. 443ff., (1910); - Math. Ann. 71, 441ff., (1912); - J. r. + a. Math. 1ff., (Über die Abhängigkeit der Eigenschwingungen einer Membran von deren Begrenzung), (1912); - J. r. + a. Math. 177ff., (Über die Randwert- aufgabe der Strahlungstheorie und asymptotische Spektralgesetze), (1913); - Rend. circ. math. pal. XXXIX, (Das asymptotische Verteilungsgesetz der Eigenschwingungen

Fowler nimmt das ideale Gas als in ganz \mathcal{W} homogen an. Die Teilchendichte $\varrho(\vec{x})$ sei also überall in \mathcal{W} konstant gleich ϱ_0 . Dies ist zwar mit einer komplizierten Randbedingung⁴ an die Wellenfunktionen erfüllbar. Jedoch allein die Randbedingung $\psi(\vec{x})=0$ für $\vec{x} \in \mathcal{W}$ - die physikalisch eine ideal reflektierende harte Wand beschreibt - gewährleistet, daß das Gas nicht entweicht (Teilchenstrom durch \mathcal{W} gleich Null). Unter dieser Randbedingung fällt jede Eigenfunktion $\psi_\lambda(\vec{x})$ der freien Schrödingergleichung (1) stetig und mit unterschiedlicher Steigung zur Potentialwand hin zu Null ab (und zwar mit $\sqrt{\lambda}$, sofern die Krümmung der Potentialfläche klein gegen $\sqrt{\lambda} \cdot \sqrt{2m/\hbar^2}/2\pi$ ist). In einer gewissen Oberflächenschicht ist also die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Teilchen systematisch umso größer, je energiereicher sie sind, ehe sie Null wird. Daher ist das im Innern homogene Gas in der Oberflächenschicht inhomogen; denn einerseits fällt die Teilchendichte $\varrho(\vec{x})$ stetig zu Null ab, andererseits ist dort das Gas (bezogen auf die Teilchendichte) relativ gesehen energiereicher. Verglichen mit dem Fowlerschen Ansatz sollte also die Zustandsdichte $\varrho(\lambda)$ im Mittel kleiner sein und zwar umso mehr, je größer die "benetzte Oberfläche" W von \mathcal{W} ist. Es kann vermutet werden, daß sich $\varrho(\lambda)$ von der Fowlerschen Energiedichte um einen zu W proportionalen Summanden unterscheidet. Tatsächlich ist von W.J.Swiatecki⁵ sowie von P.J.Hill und J.A.Wheeler⁶ für $\varrho(\lambda)$ für asymptotisch große λ der Ausdruck⁷

$$(3) \quad \varrho(\lambda) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \cdot V \cdot \lambda^{3/2} / 4\pi^2 - \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \cdot W / 16\pi + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot L \cdot \lambda^{-1/2} / 16\pi^2$$

vermutet und von E.Hilf⁸ und G.Süßmann⁹ numerisch begründet worden; (L ist die mittlere totale Krümmung von \mathcal{W} , siehe Kap.1,a)).

eines beliebig gestalteten elastischen Körpers), (1915).

²R.H.Fowler, Statistische Mechanik, (1927), neu herausgeg.v.O. Halpern, 1931, orig.:Cambridge Univ.Press.

³E.Schrödinger, Statistische Thermodynamik, Joh.Ambrosius Barth-Verlag, Leipzig, (1952).

⁴ $\psi_u(\vec{x}) = \frac{1}{2}(\psi_u(\vec{x}) + \chi_u(\vec{x}))$ mit $\psi_u(\vec{x}) = \chi_u(\vec{x}) = 0$, falls $\vec{x} \in \mathcal{W}$.

Mit dieser quantenmechanisch korrekteren Zustandsdichteformel (3) werden wir, ausgehend von der großkanonischen Zustandssumme, die Thermodynamik räumlich begrenzter idealer Bose-, Fermi- und Boltzmann-gase neu aufbauen. Dabei ist eine genügend große Teilchenzahl N des Systems Voraussetzung: es muß $(6\pi^2 N)^{1/3} \gg 1$ gelten.

Wesentliche Ergebnisse sind: die idealen Gase zeigen eine Oberflächenspannung σ ; der numerische Verlauf thermodynamischer Größen (wie z.B. spezifische Wärme, innere Energie, usf.) weicht von dem für das klassische ideale Gas bekannten Verlauf ab.

Diese rein quantenmechanisch bedingten Effekte sind i.a. proportional zu κ :

$$(5) \quad \kappa := \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \cdot W \cdot V^{-1} \cdot \mu^{-1/2}$$

Wegen der numerischen Kleinheit des rationalisierten Plank'schen Wirkungsquantums \hbar sind diese Effekte ausserordentlich klein, ausser für Teilchen sehr geringer Masse m , sowie für sehr geringe Volumina V , große Oberfläche W und i.a. für kleines chemisches Potential μ .

⁵W.J.Swiatecki, Proc.Phys.Soc.A64,226ff.,(1951);- Proc.Phys.Soc.A68,285ff.,(1955);- Phys.Rev.98,203ff.,(1955).

⁶P.J.Hill und J.A.Wheeler, Phys.Rev.89,1125ff.,(1953).

⁷Dort werden nur die Integrale $N = \int_0^\infty g(\lambda) \cdot \Theta(\lambda - \lambda')$ und $E = \int_0^\infty \lambda' \cdot g(\lambda) \cdot \Theta(\lambda - \lambda')$ behandelt. Sie entsprechen Teilchenzahl und Energie eines Fermionensystems mit der Fermienergie λ und der Temperatur $T=0$. Es ist daher einfach $g(\lambda) = dN/d\lambda$.

⁸E.Hilf, Diplomarbeit, Inst.f.theor.Phys.d.Univ.Frankfurt/M., (Über den Oberflächenterm der Gesamtenergie der Atomkerne nach dem Fermigas-Modell),(1963).

⁹E.Hilf und G.Süßmann, Phys.Lett.Vol.21,No.6,1.July,S.654ff., (Surface tension of nuclei according to the Fermi-gas model),(1966).

Eine Anwendung der Theorie erscheint demnach u.a. auf folgende physikalische Probleme sinnvoll und möglich:

- 1) Oberflächenspannung schwerer angeregter Atomkerne, z.B. für hochenergetische Kernspaltung.
- 2) Eigenschaften der Metallelektronen in Subminiaturbauelementen.
- 3) Strahlungsverteilung in sehr kleinen Hohlräumen bei tiefen Temperaturen.
- 4) Phononensysteme in Kristallen.

Die Zustandsdichteformel (3) kann u.a. verwandt werden für theoretische Abschätzungen

- 5) der Anzahl der "modes" bei Masern und Lasern und
- 6) in der Akustik der Anzahl der nichtharmonischen Obertöne pro Frequenzintervall (vor allem) komplizierterer Klangräume, sowie
- 7) der Hohlraumabsorption sehr kurzer elektromagnetischer Wellen.

Wir sind gespannt, ob und aus welchem Gebiet der Physik experimentelle Bestätigungen von Vorhersagen bekannt werden, die sich mit Hilfe der hier ausgearbeiteten Theorie ableiten lassen. Wo werden die hier behandelten quantenmechanischen Oberflächeneffekte von Systemen wechselwirkungsfreier Teilchen eine Rolle spielen?

B Auswirkung der quantenmechanischen Oberflächenspannung auf die Thermodynamik des idealen Gases.

Kapitel 1

Die Zustandsgrößen.

a) Einführung und Methodik.

Wir betrachten ein ideales Gas, das in einem Hohlraum eingeschlossen sei.

Die Wahl der Gestalt des Hohlraumes \mathcal{W} ist freigestellt, sofern nur asymptotisch die Zustandsdichteformel (3) gilt. Die Wand des Hohlraumes sei für die Teilchen des Systems ideal reflektierend und hart. Eine genaue hinreichende und notwendige Forderung an die Gestalt von \mathcal{W} für die Gültigkeit von (3) ist nicht bekannt. Die in der Physik auftretenden Gestaltformen sind jedoch schon in der hinreichenden Forderung enthalten: "die geschlossene Oberfläche \mathcal{W} von \mathcal{W} bestehe aus höchstens endlich vielen stetigen Flächenstücken beschränkter Krümmung κ , ($0 \leq \kappa < \infty$), welche mit höchstens endlich großen Flächenwinkeln aneinanderstoßen dürfen"; Kugel, Zylinder, Torus und Würfel sind einfache Beispiele für \mathcal{W} , die diese Bedingung erfüllen.

In die Thermodynamik des idealen Gases geht die Gestalt von \mathcal{W} über die Größen Volumen V , Oberflächeninhalt W und mittlere totale Krümmung L ein, welche als Integrale über die Oberfläche \mathcal{W} von \mathcal{W} definiert sind:

$$(6) \quad V := \frac{1}{3} \int_{\mathcal{W}} \vec{r} \cdot d\vec{W}, \quad W := \int |\vec{r}| d\vec{W}, \quad L := \int \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) |\vec{r}| d\vec{W}.$$

R_1 und R_2 sind die Hauptkrümmungsradien des Flächenstückes $d\vec{W}$.

Als ideales Gas wird üblicherweise ein System von N Teilchen bezeichnet, deren Teilchen untereinander wechselwirkungsfrei sind und lediglich durch ein gemeinsames äusseres Potential gebunden werden. Die Schrödingergleichung für das Gesamtsystem zerfällt dann in N Einzelteilchen-Schrödingergleichungen. Speziell für das besonders einfache Potential $\{V(\vec{x}) \text{ gleich Null für } \vec{x} \in \mathcal{W}, \text{ sonst gleich } \infty\}$, gehorcht

jedes Teilchen einer Gleichung (1) mit der Randbedingung $\varphi(\vec{x})=0$ für $\vec{x} \in W$.

Bemerkenswerterweise ist die freie Schrödingergleichung (1) nach Übergang zu der dimensionslosen Variablen $\vec{x} := \vec{x} / V^{1/3}$ invariant gegenüber Ähnlichkeitstransformationen Π

$$(7) \quad \left(\partial^2 / \partial \vec{x}^2 + \varepsilon_n \right) \cdot \varphi_n(\vec{x}) = 0 \quad \text{mit} \quad \varepsilon_n := \frac{2m}{\hbar^2} \cdot V^{2/3} \cdot e_n$$

denn es ist $\Pi \vec{x} = \vec{x}' = a \cdot \vec{x}$; folglich $\Pi dx = dx' = a \cdot dx$ und wegen (6) $\Pi V = V' = a^3 \cdot V \rightarrow a = (V'/V)^{1/3}$; und daher $\vec{x}' = \Pi \vec{x} = \vec{x}$:

$$(8) \quad \vec{x}' = V'^{-1/3} \cdot \vec{x}' = V^{-1/3} \cdot \vec{x} = \vec{x}$$

Das ε_n -Spektrum $[(\varepsilon_n \leq \varepsilon_{n+1} < \dots)]$, der Eigenwert jedes Zustandes sei dabei einzeln gezählt] ist also unabhängig vom Volumen V des Hohlraumes, nicht jedoch von der Gestalt. Als unabhängige Variable zur Beschreibung von W benutzen wir daher neben V meist nicht W und L , sondern die dimensionslosen Gestaltparameter $\omega := W/V^{2/3}$ und $\ell := L/V^{1/3}$. Eine Ähnlichkeitstransformation Π entspricht dann gerade einer Änderung von W bei festgehaltenem ω und ℓ , denn $\Pi W = W'$, $\Pi V = V'$, aber $\Pi(\omega, \ell) = (\omega', \ell') = (\omega, \ell)$.

Es ist nun naheliegend, für alle thermodynamischen Größen in analoger Weise dimensionslose Größen zu definieren. Es wird sich zeigen, daß diese neuen Größen für ideale Gase nicht mehr explizit von V abhängen, — und daß dieses geradezu als Definition eines idealen Gases ausgenutzt werden kann.

Wir definieren die neuen dimensionslosen Größen mit Hilfe der bekannten Größen Druck p , Temperatur T , Entropie S , freie Energie F , Enthalpie H , freie Enthalpie G , Teilchenzahl N , innere Energie U sowie M , dem chemischen Potential (welches in der Literatur meist mit μ oder $k \cdot T \cdot \log \zeta$ bezeichnet wird) und der Boltzmann-Konstanten k wie folgt:

$$(9) \quad \frac{p}{kT} := \frac{p}{P} := \frac{u}{u} := \frac{g}{G} := \frac{f}{F} := \frac{\mu}{M} := \frac{\Delta T}{S \cdot T} := \frac{\psi \cdot T}{\Psi \cdot T} := \frac{\xi}{e} := \frac{2m}{\hbar^2} \cdot V^{2/3}$$

also $\Delta = S/k$ und $\psi = \Psi/k$; es ist $\Psi := -F/T = k \cdot \log Z$. Z ist die großkanonische Zustandssumme. Sei irgendeine dieser dimensionslosen Größen durch b , die zugehörige ursprüngliche durch B charakterisiert, so gilt

$$(10) \quad d \log b = d \log B + \frac{2}{3} \cdot d \log V$$

Das ideale Gas beschreiben wir durch Angabe der Gestaltparameter V , w und ℓ des einhüllenden Hohlraumes \mathcal{W} , des ε_n -Spektrums (der Eigenwerte der Eigenzustände) und der mittleren Besetzungszahl \bar{v} dieser Eigenzustände.

$$(11) \quad \bar{v}(\zeta, \chi) = \left[\frac{1}{\zeta} \cdot e^{\chi^2} - \iota \right]^{-1}$$

mit $\zeta := \exp(M/(kT))$; $\chi := \sqrt{\varepsilon/\tau} = \sqrt{\varepsilon/(kT)}$. Für Bosonen, d.h. Teilchen, die der Bose-Einstein-Statistik genügen, ist $\iota = +1$ zu wählen. Es ist $0 \leq \zeta \leq 1$ und $0 \leq \bar{v} \leq \infty$. Für Fermionen, das sind Teilchen, die der Fermi-Dirac-Statistik genügen, ist $\iota = -1$ zu wählen. Es gilt $0 \leq \zeta \leq \infty$ und $0 \leq \bar{v} \leq 1$. Der klassische Grenzfall beider Statistiken ist gleich; es ist die bekannte Boltzmann-Maxwell-Statistik, der klassisch behandelte wechselwirkungsfreie Teilchen genügen. Für diese "Boltzonen" ist in (11) $\iota = 0$ zu setzen, und es ist $0 \leq \zeta \leq \infty$, $0 \leq \bar{v} \leq \infty$.

Ziel dieser Arbeit ist es, für endliche Temperaturen das thermodynamische Verhalten des in einen Hohlraum \mathcal{W} eingeschlossenen quantenmechanisch zu behandelnden idealen Gases zu studieren. Wir werden uns dazu die Temperatur, das Volumen (und die Gestalt von \mathcal{W} durch w und ℓ) sowie die Teilchenzahl vorgegeben denken und von der großkanonischen Gesamtheit ausgehen. Aus der großkanonischen Zustandssumme ist dann zunächst das thermodynamische Potential F (die freie Energie) bestimmbar, für welches die vorgegebenen Variablen T , V und N gerade die sog. natürlichen Variablen sind. Die übrigen thermodynamischen Potentiale und Funktionen folgen dann in bekannter Weise.

Die Darstellung der Ergebnisse kann nicht immer sehr explizit sein, denn es treten schon bei der Behandlung homogener idealer Gase (siehe R.H.Fowler^{2,3} u.a.) die bekannten i.a. nicht geschlossen lösbaren Integrale $\mathcal{I}_n(\zeta)$ auf (s. Anhang 1). Bei den hier behandelten inhomogenen Systemen treten zusätzlich weitere Integrale gleichen Typs auf, die sogar von etwas einfacherer Struktur sind. Dafür benötigen wir jedoch die nur semikonvergenten Reihenentwicklungen der $\mathcal{I}_n(\zeta)$ nicht nur bis zum ersten, sondern teilweise bis zum dritten Glied.

Als einfaches Beispiel berechnen wir jetzt N und U (Teilchenzahl und innere Energie) direkt aus (11), um rasch einen Einblick in die Struktur der zu erwartenden Ergebnisse zu haben.

Sei mit $M(e)$ die Zahl aller Eigenzustände bezeichnet, deren Eigenwerte e_n kleiner als e sind. Dann lassen sich N und U als Stieltjes-Integrale schreiben,

$$(12) \quad N = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{v}(e_n) \Rightarrow \int_{e=0}^{\infty} \bar{v}(e) \cdot dM(e) = \int_{e=0}^{\infty} dN(e)$$

und¹⁰

$$(13) \quad U = \sum_{n=0}^{\infty} e_n \cdot \bar{v}(e_n) \Rightarrow \int_{e=0}^{\infty} e \cdot \bar{v}(e) \cdot dM(e) = \int_{e=0}^{\infty} e \cdot dN(e)$$

$M(e)$ ist nun zwar monoton, doch mitnichten stetig. Daher ist eine Ersetzung $dM(e) = g(e) de$ mit $g(e) = dM/de$ ohne Sinn, da $g(e)$ eine hochgradig singuläre nichtmonotone Funktion ist: die Funktionaldeterminante ist nicht erklärt. Wir ersetzen aber $M(e)$ durch seinen mittleren Wert $\bar{M}(e)$ mit $d\bar{M}/de = \bar{g}(e)$ und $\bar{g}(e)$ aus (3). $\bar{g}(e)$ ist stetig differenzierbar und monoton (sogar einfach ein Polynom in $e^{1/2}$): für diese Mittelwerte folgen aus (12) und (13) die bekannten Integrale

$$(14) \quad N = \int_{e=0}^{\infty} de \cdot \bar{v}(e) \cdot \bar{g}(e) \quad ; \quad U = \int_{e=0}^{\infty} de \cdot \bar{v}(e) \cdot \bar{g}(e) \cdot e$$

Wegen (3) sind dies Summen von Integralen vom Typ

$$(15) \quad J_n(z) := \int_0^{\infty} dx \cdot x^n \cdot \bar{v}(z, x)$$

Diese bekannten Integrale werden wir also zur Darstellung der Ergebnisse dieser Arbeit benötigen. Nach Einsetzen der in Anhang 1 angegebenen (z.T. semikonvergenten) Reihenentwicklungen für $J_n(z)$ und Ordnen der Glieder nach gleichem asymptotischem Verhalten bestätigt sich, daß einige Reihen bis zum dritten Summanden benötigt werden.

¹⁰In dem Spezialfall ($T=0$, Fermigas), der in⁸ behandelt worden ist, ist $\bar{v} = \Theta(e_f - e)$, folglich $d\bar{M} = dN$, falls $e \leq e_f$; e_f ist die Fermienergie. Hier lässt sich (13) durch partielle Integration direkt auswerten:

$$U = \int_0^{e_f} dN(e) \cdot e = e_f \cdot N - \int_0^{\infty} de \cdot N(e)$$

Für alle folgenden Rechnungen ist Voraussetzung, daß die Teilchenzahl asymptotisch groß ist. Damit wird gewährleistet:

- 1., daß die Zustandsdichteformel (3), von der wir ausgehen, sicher gültig ist; und
- 2., daß die aus der großkanonischen Gesamtheit gewonnenen Ausdrücke für thermodynamische Potentiale und Funktionen (wie z.B. die Entropie S) übereinstimmen mit Ausdrücken für die gleichen Größen, die aus irgendeiner anderen Gesamtheit (es gibt deren ja unendlich viele^{11a}), gewonnen worden sind.

Praktisch werden die Ergebnisse auch in guter Näherung für endlich große N gültig sein, denn

1. haben wir in^{8,9} gezeigt, daß bis herunter zu sehr kleinen N die Zustandsdichteformel (3) den mittleren Verlauf der Zustandsdichte richtig wiedergibt, und
2. ist die Differenz zwischen den aus verschiedenen Gesamtheiten gewonnenen Ausdrücken für irgendeine thermodynamische Funktion für große N klein gegen den Hauptterm; z.B. ist die Differenz der aus der kanonischen bzw. mikrokanonischen Gesamtheit gewonnenen Entropieausdrücke $S_n - S_{mik.} \approx k \cdot \log \sqrt{3\pi N}$ klein gegenüber $S \approx k \cdot N$. Durch Berücksichtigung der Gestalt von Ω durch die Parameter w und ℓ treten im Ausdruck für S noch Terme hinzu, welche $\sim N^{1/3}$ bzw. $\sim N^{1/3}$ sind. Wir müssen also zumindest verlangen, daß diese Terme asymptotisch groß gegen $\log \sqrt{N}$ sind; das ist aber schon für sehr kleine Teilchenzahlen der Fall. Physikalisch bedeutet unsere Voraussetzung großer Teilchenzahlen, daß wir von dem Einfluß der Feinstruktur (von "Granulationseffekten") der Eigenschaften des Systems (z.B. Teilchendichte, Zustandsdichte) absehen können. Wir betrachten das System als "mikroskopisch homogen" und behandeln nur den Einfluß der durch die Begrenzung \mathcal{M} des Systems bedingten "makroskopischen Inhomogenität" des Systems. Dieses Vorgehen kann auch als "quasiklassische Näherung" bezeichnet werden.

^{11a} A. Münster, Handbuch der Physik, Bd. III/2, ed. S. Flügge, Springer-Verlag, Berlin, (1959).

b) Zustandsdichte und Zustandssumme.

1. Zustandsdichte und Oberflächenspannung:

Die mittlere Zustandsdichte $\bar{g}(e)$, die wir in (3) angegeben haben, lautet in die transformierten Größen umgeschrieben (mit $x^2 := e/kT = \varepsilon/\tau$):

$$(16) \quad \bar{g}(e) = \frac{d\bar{M}}{de} = \frac{d\bar{M}}{dx} \cdot \frac{dx}{de} = \frac{1}{2 \cdot k \cdot T \cdot x} \cdot \left(\frac{x^2 \cdot \tau^{3/2}}{2\pi^2} - \frac{w \cdot \tau \cdot x}{8\pi} + \frac{\ell \cdot \tau^{1/2}}{8\pi^2} \right).$$

Damit können wir Teilchenzahl N und innere Energie \bar{u} als Funktionen von ζ und τ berechnen. Aus (14) wird mit (11) wegen (15)

$$N = \int dx \cdot \bar{v}(\zeta, x) \cdot d\bar{M}/dx$$

$$(17) \quad N(\zeta, \tau) = \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{2\pi^2} \cdot J_2(\zeta) - \frac{w \cdot \tau}{8\pi} \cdot J_1(\zeta) + \frac{\ell \cdot \tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot J_0(\zeta) \right\}$$

und analog

$$(18) \quad \bar{u}(\zeta, \tau) = \tau \cdot \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{2\pi^2} \cdot J_4(\zeta) - \frac{w \cdot \tau}{8\pi} \cdot J_3(\zeta) + \frac{\ell \cdot \tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot J_2(\zeta) \right\}$$

Als Oberflächenspannung definieren wir die partielle Ableitung von \bar{u} nach w bei festgehaltenem τ , N und ℓ . Sie läßt sich mit Hilfe der Kettenregel aus (17) und (18) ableiten,

$$(19) \quad \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial w} \right)_{\ell, \tau, N} = \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial w} \right)_{\ell, \tau, \zeta} + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial \zeta} \right)_{\ell, \tau} \cdot \left(\frac{\partial \zeta}{\partial w} \right)_{N, \ell, \tau}$$

Die explizite (näherungsweise) Berechnung muß (auf Teil C) verschoben werden, bis die Reihenentwicklungen für $J_n(\zeta)$ abgeleitet worden sind.

Wir verwenden fast ausschließlich die transformierten Größen τ, \bar{u}, \dots . Der Übergang zu den originalen Größen ist (wegen (9) und (10)) problemlos.

2. Zustandssumme und Oberflächeneffekte:

Wir gehen von der Zustandssumme

$$Z = \zeta^{-N} \cdot \prod_{x_j} (1 - \nu \zeta \cdot e^{-x_j^2})^{-\nu}$$

aus. Ihr Logarithmus lautet

$$(20) \quad \log Z = -N \cdot \log \zeta - \nu \sum_{x_j} \log (1 - \nu \zeta \cdot e^{-x_j^2})^{-\nu}$$

Eine korrekte Ableitung des Ausdrucks (20) für den Logarithmus der Zustandssumme ist von E. Schrödinger¹¹ (Kap. VII: "Das N-Teilchenproblem") gegeben worden.

Er zeigt, daß man zum Ausdruck (20) nur gelangen kann, wenn zwei Terme vernachlässigt werden, von denen bei festgehaltenem ζ der eine proportional zu $\log N$, der andere konstant (in Bezug auf N) ist; die Hauptterme von (20) sind proportional zu N (, denn $\log Z$ ist eine extensive Größe). Schrödinger schreibt, daß diese Zusatzterme berücksichtigt werden müssen für ein Studium von "gas bodies so small that their thermodynamical behaviour depends on their size and shape. The peculiar features would be termed 'surface phenomena' by the experimentalist"¹¹. Diese Meinung werden wir korrigieren. Als Ausdruck für die Zustandsdichte kennt Schrödinger nur den ersten Summanden von (16).

Der Ausdruck (16) für $\bar{g}(\lambda)$ enthält gestaltabhängige Terme, die sich (ebenfalls) auf $\log Z$ auswirken. Die Summation in (20) ist über alle Zustände x_j zu erstrecken; in quasiklassischer Näherung ersetzen wir 1. die Summation durch Integration¹² und 2. $g(\lambda)$ durch $\bar{g}(\lambda)$ aus (16):

$$\sum_{x_j} \log (1 - \nu \zeta \cdot e^{-x_j^2}) \Rightarrow \int_0^{\infty} d\bar{M}(x) \cdot \log (1 - \nu \zeta \cdot e^{-x^2}) = \int_0^{\infty} dx \cdot \bar{g}(\lambda) \cdot 2\pi x \cdot \log (1 - \nu \zeta \cdot e^{-x^2}),$$

$$= \frac{\tau^{3/2}}{2\pi^2} \cdot K_2(3) - \frac{w \cdot \tau}{8\pi} \cdot K_1(3) + \frac{\rho \cdot \tau^{4/2}}{8\pi^2} \cdot K_0(3),$$

letzteres mit Hilfe der im Anhang 1 (4) definierten Integrale $K_n(3)$. Mit der Relation $K_n(3) = -\frac{2\nu}{n+1} \cdot J_{n+2}(3)$ (s. Anhang 1(5)) folgt aus (20):

$$(21) \quad \log Z = -N \cdot \log \zeta + \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{3\pi^2} \cdot J_4(3) - \frac{w \cdot \tau}{8\pi} \cdot J_3(3) + \frac{\rho \tau^{4/2}}{4\pi^2} \cdot J_2(3) \right\}.$$

¹¹E. Schrödinger, Statistical Thermodynamics, Cambr. Univ. Press, S. 46u., (1964).

¹²mit Ausnahme des Falles der Bose-Einsteinkondensation ($\nu=+1$, $\tau \rightarrow 0$).

Nun können wir die oben erwähnten "Schrödinger-Zusatzterme" (, die $\sim \log N$ und $\sim O(1)$ sind,) diskutieren.

a) In quasiklassischer Näherung ($N \rightarrow \infty$) sind die Zusatzterme zu vernachlässigen, denn die Summanden von (21) sind proportional zu N , $N^{2/3}$ bzw. $N^{1/3}$. (Zum Beweise ist (17) als Ausdruck für $N(\beta, \tau)$ bei festgehaltenem β in dritter Näherung nach τ aufzulösen und in (21) einzusetzen. Aus $N \rightarrow \infty$ folgt bei festem β auch $\tau \rightarrow \infty$). Für asymptotisch große N verschwinden daher die Schrödinger-Zusatzterme relativ zu den Summanden von (21).

Eine Verfeinerung des Näherungsausdruckes für $\log Z$ bis etwa zu Termen $\sim \log N$ ist nicht sinnvoll. Der Näherungsausdruck $\bar{g}(\lambda)$ (s.(3)) für den mittleren Verlauf der Zustandsdichte $g(\lambda)$ enthält die von der Gestalt von \mathcal{W} nur über die Oberflächenintegrale V , W und L abhängigen Terme, soweit sie asymptotisch $\gg O(\lambda^{-1/2})$ sind. Der mittlere Verlauf der Differenz $R = g(\lambda) - \bar{g}(\lambda)$, der sogenannte Restterm, hängt dagegen in komplizierter Weise von der genauen Gestalt von \mathcal{W} und von λ ab. Für beliebige Gestalt von \mathcal{W} gibt es für R bisher nur die Abschätzung $O(\lambda^{-1/2}) \leq \bar{R}$; in⁷ ist die Vermutung $\bar{R} = O(1)$ begründet worden. In (20) wird über alle Eigenwerte x_j summiert; in quasiklassischer Näherung bestimmt daher $g(\lambda) \Rightarrow \bar{g}(\lambda) + \bar{R}$ den Integrationsbereich. Der unbekannte Restterm \bar{R} führt zu einer endgültigen Unkenntnis $O(N^{1/3})$ von $\lim_{N \rightarrow \infty} \log Z$, welche die Schrödinger-Zusatzterme ($\sim \log N$, $\sim O(1)$) verdeckt.

Für Systeme endlicher, nicht zu großer Teilchenzahl können die Schrödinger-Zusatzterme relevant werden. Sie sind jedoch in erster Näherung eine Korrektur des Volumenterms - mithin von der Gestalt von \mathcal{W} unabhängig - und sie beschreiben daher primär gerade keine "Oberflächeneffekte".

b) Für Gaskörper sehr geringer Teilchenzahl versagt die quasiklassische Näherung. Die Summation in (20) muß exakt über die genau berechneten Eigenwerte x_j ausgeführt werden. Das System ist im Innern nicht mehr "homogen". Während die von uns behandelten kollektiven, "makroskopischen" Effekte hier ihren Sinn verlieren, lassen sich die "mikroskopischen" Schrödinger-Zusatzterme auch hier untersuchen. Doch läßt sich mit ihnen keine Thermodynamik aufbauen, denn das setzt mindestens mikroskopische (lokale) Homogenität voraus; erkennbar ist dies daran, daß bei anderer Mittelwertbildung, etwa mit Hilfe der mikrokanonischen Verteilung, die erhaltenen thermodynamischen Ausdrücke sich um Terme $\sim \log \sqrt{N}$ unterscheiden.

c) Die freie Energie .

$\log Z$ wird meist "thermodynamische Funktion" genannt und mit Ψ bezeichnet ($\Psi := k \cdot \log Z$). In (20) hängt $\log Z$ von den Variablen τ und ζ ab. Mit $N(\tau, \zeta)$ aus (17) läßt sich im Prinzip ζ eliminieren. Für vorgegebenes τ und N läßt sich genau dasjenige thermodynamische Potential angeben, für welches diese beiden Variablen die sogenannten natürlichen Variablen sind. Es ist die freie Energie f . Sie ist definiert durch

$$(22) \quad f := -\tau \cdot \Psi, \quad (F := -T \cdot \Psi).$$

Einsetzen von (20) liefert

$$(23) \quad f(\tau, \zeta) = N \cdot \tau \cdot \log \zeta - \left\{ \frac{\tau^{5/2}}{3\pi^2} \cdot J_4(\zeta) - \frac{w \cdot \tau^2}{8\pi} \cdot J_3(\zeta) + \frac{\ell \cdot \tau^{1/2}}{4\pi^2} \cdot J_2(\zeta) \right\}.$$

Zusammen mit $N(\tau, \zeta)$ aus (17) ist damit $f(\tau, N)$ im Prinzip bekannt. Die über f definierbaren thermodynamischen Größen, wie die Entropie $s := -(\partial f / \partial \tau)_N$ oder das chemische Potential $\mu := (\partial f / \partial N)_\tau$ können nun für unser System berechnet werden.

Im folgenden Kapitel werden wir aus der großkanonischen Zustandssumme (20) die Thermodynamik unseres Systems aufbauen; diese ist widerspruchsfrei, weil wir uns auf die quasi-klassische Näherung und den Limes sehr großer Teilchenzahlen beschränken und nur die Zustandsdichteformel abändern.

Kapitel 2

Thermodynamik.

Die Thermodynamik unseres Systems werden wir in drei Stufen aufbauen. Zunächst führen wir über die freie Energie den Druck, die Entropie und das chemische Potential ein. Sodann stellen wir einige partielle Ableitungen thermodynamischer Größen bereit. Schließlich studieren wir die thermodynamischen Potentiale und ihre totalen Differentiale. Dabei wird die besondere Struktur der Thermodynamik des in einen Hohlraum eingeschlossenen quantenmechanisch behandelten idealen Gases hervortreten:

- 1.): die thermodynamischen Größen hängen nach der Transformation (9) nur noch von zwei (an Stelle von drei) unabhängigen Variablen ab; es erweist sich, daß es dann auch nur zwei (an Stelle von drei) "unabhängige" thermodynamische Potentiale gibt. Dies ist eine Folge der besonders einfachen Zweiteilchenwechselwirkung der Partikel des idealen Gases, denn es gilt: $\psi(\vec{x}_i, \vec{x}_k) = 0$ mit $(\vec{x}'_i = \alpha \vec{x}_i, \alpha = \text{const.} \neq 0 \wedge 0 = \psi(\vec{x}_i, \vec{x}_k) = \psi(\vec{x}'_i, \vec{x}'_k) = 0)$.
- 2.): die Gibbs-Duhem-Relation gilt bis auf je einen in W und L linearen Term. Dies bestätigt, daß das System im Innern homogen und nur in Oberflächennähe ("makroskopisch") inhomogen ist.

Der ausführliche Aufbau der Thermodynamik in diesem Kapitel ist erforderlich, da er als Gerüst für die in Teil C mitgeteilten Rechnungen dient.

a) Einführung der Entropie ζ , des Druckes \bar{p} und des chemischen Potentials μ .

1. Die partiellen Ableitungen von $\beta(\tau, N)$.

Die "thermodynamische Funktion" $k \cdot \psi(N, V, \tau) = \Psi(N, V, T) = k \cdot \log Z$ ist in (21) als Funktion von N, ζ und τ angegeben worden, $\psi(N, \zeta, \tau)$. N ist nach (17) eine Funktion von ζ und τ allein. Dann hängt ψ nur von zwei unabhängigen Variablen ab, z.B. $\psi(N, \zeta, \tau) = \psi(N, \zeta(N, \tau), \tau) = \psi(N, \tau)$ und es gilt $\psi(N, V, \tau) = \psi(N, \tau)$:

$$(24) \quad \nabla \Psi_{\tau, N} = 0$$

Dabei haben wir die Kurzschreibweise

$${}_x a_y := \left(\frac{\partial a}{\partial x} \right)_y$$

für die partielle Ableitung von $a(x, y)$ nach x bei festgehaltenem y benutzt¹³.

Wir berechnen nun ${}_{\tau} \Psi_N$ aus (21). Nach der Kettenregel ist zunächst¹⁴

$${}_{\tau} \Psi_N = {}_{\tau} \Psi_{\zeta, N}^{(21)} + {}_{\zeta} \Psi_{\tau, N}^{(21)} \cdot {}_{\tau} \zeta_N$$

Im Anhang 1 haben wir für die in (21) auftretenden Integrale $J_n(\zeta)$ die Rekursionsformel

$$(A.7) \quad J_{n+2}^1(\zeta) = \frac{n+1}{2} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot J_n(\zeta)$$

¹³ Diese Schreibweise ist suggestiv, denn ${}_x$ steht links von a und ist als Operator $\frac{\partial}{\partial x}$ auf a anzuwenden. ${}_y$ steht rechts von a , wirkt nicht mehr auf a , d.h. ${}_y y = \text{const.}$

¹⁴ In (21) ist ψ als Funktion von drei Variablen (τ, ζ, N) dargestellt. Wegen $N = N(\zeta, \tau)$ sind diese nicht unabhängig. Mit Hilfe der Kettenregel läßt sich ${}_{\tau} \Psi_N$ berechnen. Wir fügen bei den Ableitungen ${}_{\tau} \Psi_{\zeta, N}$ bzw. ${}_{\zeta} \Psi_{\tau, N}$ als "Variable" die Nummer der Gleichung an, in der der abzuleitende Ausdruck für ψ angegeben ist. Ohne eine solche Kennzeichnung ist z.B. die Größe ${}_{\tau} \Psi_{\zeta, N}$ nicht eindeutig definiert und kann verschiedene Werte annehmen, je nach dem Grad der Substitution z.B. von τ durch $\tau(\zeta, N)$ in $\psi(\tau, \zeta, N)$. Partielle Ableitungen von Funktionen, deren Variable unabhängig sind, sind dagegen immer eindeutig definiert, so auch ${}_{\tau} \Psi_N$.

abgeleitet. Damit wird

$${}_3\Psi_{\tau, N} \quad (21) \quad = \frac{N}{3} + \frac{1}{3} \cdot \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{2\pi^2} \cdot J_2(3) - \frac{w \cdot \tau}{8\pi} \cdot J_1(3) + \frac{\rho \cdot \tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot J_0(3) \right\} .$$

Wegen (17) ist also

$$(25) \quad {}_3\Psi_{\tau, N} \quad (21) = 0$$

und damit

$$(26) \quad \tau\Psi_N = \tau\Psi_{3, N} \quad (21) = \frac{1}{\tau^2} \cdot \left\{ \frac{\tau^{5/2}}{2\pi^2} \cdot J_4(3) - \frac{w \cdot \tau^2}{8\pi} \cdot J_3(3) + \frac{\rho \cdot \tau^{4/2}}{8\pi^2} \cdot J_2(3) \right\} .$$

Vergleichen wir diesen Ausdruck mit (18), so haben wir die bekannte Relation

$$(27) \quad \ddot{u} = \tau^2 \cdot \tau\Psi_N$$

für unser System bestätigt. Wegen $\beta := -\tau \cdot \psi$ folgt daraus

$$(28) \quad \tau f_N = -\psi - \ddot{u}/\tau$$

Für ${}_N\Psi_\tau$ finden wir nach der Kettenregel wegen (25)

$$(29) \quad {}_N\Psi_\tau = {}_N\Psi_{\tau, 3} \quad (21) = -\log 3$$

und daher

$$(30) \quad {}_N f_\tau = \tau \cdot \log 3$$

2. Das totale Differential der freien Energie F .

Die Entropie S , den Druck p und das chemische Potential M führen wir als partielle Ableitungen der freien Energie ein¹⁵:

$$(31) \quad S := - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N,V}, \quad M := \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V}, \quad p := - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T}$$

Dann ist

$$dF = - S \cdot dT + M \cdot dN - p \cdot dV$$

Für diese partiellen Ableitungen von F leiten wir nun mit Hilfe der im vorigen Abschnitt berechneten Ableitungen von $\beta(\tau, N)$ Ausdrücke in V , T und γ ab. Dazu substituieren wir in $dF(T, N, V) = \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N,V} dT + \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} dN + \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T} dV$ sowohl dF wie auch dT vermittels (10); z.B. $dF = d\beta \cdot \gamma^{-1} - \frac{2}{3} \frac{F}{V} dV$; $\gamma := \beta / F = \mu / M = \pi / p = \tau / (kT) = \frac{2}{3} \frac{u}{V}$; s.(9), ordnen nach $d\tau$, dN und dV und erhalten durch Vergleich mit $d\beta(\tau, N) = \left(\frac{\partial \beta}{\partial \tau} \right)_{N} d\tau + \left(\frac{\partial \beta}{\partial N} \right)_{\tau} dN$ die gewünschten Beziehungen zwischen den partiellen Ableitungen von $\beta(\tau, N)$ und $F(T, N, V)$:

$$(32) \quad \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N,V} = k \cdot \left(\frac{\partial \beta}{\partial \tau} \right)_{N}, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V} = \gamma^{-1} \cdot \left(\frac{\partial \beta}{\partial N} \right)_{\tau}, \quad \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T} = \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{V} \cdot \left(\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{N,V} \cdot T - F \right)$$

Einsetzen von (28), (30) und (31) ergibt

$$(33) \quad \left\{ \begin{array}{l} \lambda = S/k = \psi + \tilde{u}/\tau = -N(\tau, \beta) \cdot \log \beta + \left\{ \frac{5\tau^{3/2}}{6\pi^2} \cdot J_4(\beta) - \frac{w\tau}{4\pi} \cdot J_3(\beta) + \frac{3\beta\tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot J_2(\beta) \right\} \\ \mu = \gamma \cdot M = M \cdot \tau / (kT) = \tau \cdot \log \beta \\ \pi = \gamma \cdot p = \gamma \cdot \left(\frac{2}{3} \frac{S T - F}{V} \right) = \frac{2}{3} \cdot (\lambda \cdot \tau - \beta) \cdot \frac{1}{V} \end{array} \right.$$

Wegen $\beta := -\tau \cdot \psi$ folgt hieraus unmittelbar $pV = \frac{2}{3} u$ bzw.

$$(34) \quad \pi \cdot V = \frac{2}{3} \cdot u$$

Dies ist die Relation, die P.T.Landsberg¹⁶ als notwendige und hinreichende Bedingung für die Eigenschaft eines Systems,

¹⁵An Stelle von $p := - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T}$ wird der Druck meist durch $p := T \cdot \left(\frac{\partial \mu}{\partial V} \right)_{N,T}$ eingeführt. Wegen $F := -T \cdot \psi$ sind diese beiden Definitionen jedoch identisch.

¹⁶P.T.Landsberg, "Thermodynamics", Interscience Publ. New York, London; S.216, Aufgabe 27.7 (1961).

"ideales Gas" zu sein, vorgeschlagen hat. (Die "klassische" Definition $p \cdot V = N \cdot k \cdot T$ gilt nur für homogene ideale Gase großer Temperatur und Verdünnung). Unsere Definition: Invarianz des dimensionslosen Hamiltonoperators $H(\vec{\alpha})$, mit $\vec{\alpha} := \vec{x} / v^{1/3}$, gegen Ähnlichkeitstransformationen, kann für relativistische Gase verallgemeinert werden, für die (34) i.a. nicht gilt.

b) Partielle Ableitungen thermodynamischer Größen.

Für das Folgende benötigen wir die bekannten "Substitutionsregeln für die partiellen Ableitungen von Funktionen zweier Variablen", insbesondere

1. einer Funktion (z.B. $y(x, z)$) bei drei Variablen x, y, z : aus $dy(x, z) = y_x dx + y_z dz$ folgt nach Einsetzen von $dz(x, y) = z_x dx + z_y dy$ und Vergleich mit der linken Seite

$$(35) \quad y_{zx} \cdot z_x = 1 \quad ; \quad y_{xz} \cdot z_y \cdot x_z = -1 \quad ;$$

2. zweier Funktionen (z.B. $a(x, y), y(x, z)$) bei vier Variablen a, x, y, z : Einsetzen von $dy(x, z)$ in $da(x, y)$ und Vergleichen mit $da(x, z)$ liefert die Beziehungen

$$(36) \quad y_{ax} \cdot y_{zx} \cdot z_x = 1 \quad ; \quad x_{ay} \cdot a_{xz} + y_{ax} \cdot a_{yz} = 1 \quad ,$$

die sich (mit (35)) vielfältig umformen lassen (so ist z.B. $a_{yz} = y_{ax} + x_{ay} \cdot x_{yz}$).

1. Die spezifische Wärme c_v .

Als spezifische Wärme c_v definieren wir

$$(37) \quad c_v := \frac{1}{T} \frac{\partial U}{\partial V, N} = k \cdot \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, N} .$$

Letzteres gilt, weil das Volumen bei der Ableitung $\frac{\partial U}{\partial V, N}$ festgehalten wird¹⁷.

$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, N}$ läßt sich aus den in (17, 18) angegebenen Ausdrücken für $\tilde{u}(\tau, \beta)$ bzw. $N(\tau, \beta)$ berechnen. Wegen (36) ist zunächst

$$(38) \quad \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, N} = \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, \beta} + \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \beta, \tau} \cdot \beta_{\tau, N} .$$

Aus (17) folgt

$$(39) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, \beta} &= \left\{ \frac{5}{4} \cdot \frac{\tau^{3/2}}{\pi^2} \cdot J_4(\beta) - \frac{w \cdot \tau}{4\pi} \cdot J_3(\beta) + \frac{3 \cdot \ell \cdot \tau^{1/2}}{16 \pi^2} \cdot J_2(\beta) \right\} , \\ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \beta, \tau} &= \frac{1}{\beta} \left\{ \frac{3}{4} \cdot \frac{\tau^{3/2}}{\pi^2} \cdot J_2(\beta) - \frac{w \cdot \tau}{8\pi} \cdot J_1(\beta) + \frac{\ell \cdot \tau^{1/2}}{16 \pi^2} \cdot J_0(\beta) \right\} . \end{aligned}$$

Mit (35) kann $\beta_{\tau, N}$ aus $N(\tau, \beta)$ bestimmt werden:

$$(40) \quad \beta_{\tau, N} = - \frac{N_{\beta, \tau}}{N_{\tau, \beta}} .$$

¹⁷ Ebenso gilt: $\frac{\partial U}{\partial V, T} = \frac{k}{2w} \cdot V^{2/3} \cdot \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, N}$, jedoch $\frac{\partial U}{\partial N, T} = \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{V} \cdot (T \cdot \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tau, N} - U)$. Der Beweis ist analog zu dem für (32).

Die partiellen Ableitungen von $N(\zeta, \tau)$ ergeben sich aus (17) zu

$$(41) \quad \begin{cases} \tau N_{\zeta} = \frac{1}{\tau} \cdot \left\{ \frac{3\tau^{3/2}}{4\pi^2} \cdot J_2(\zeta) - \frac{\omega\tau}{8\pi} \cdot J_4(\zeta) + \frac{\rho\tau^{1/2}}{16\pi^2} J_0(\zeta) \right\}, \\ \zeta N_{\tau} = \frac{1}{\zeta} \cdot \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{4\pi^2} \cdot J_0(\zeta) - \frac{\omega\tau}{8\pi} \cdot \zeta \cdot J_2'(\zeta) + \frac{\rho\tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot \zeta \cdot J_0'(\zeta) \right\}. \end{cases}$$

Der Ausdruck für ζN_{τ} enthält die in (A.9) definierten Integrale J_1' und J_0' .

Durch die Gleichungen (37)-(41) ist damit die spezifische Wärme c_v als Funktion von τ und ζ angegeben.

Wir vergleichen noch (39) mit (41) und erhalten die wichtige Relation

$$(42) \quad \zeta \ddot{u}_{\tau} = \frac{\tau^2}{\zeta} \cdot \tau N_{\zeta}$$

2. Die partiellen Ableitungen von λ .

Wir berechnen die partiellen Ableitungen der Funktionen $\lambda(\tau, N)$, $\lambda(\zeta, N)$ und $\lambda(\tau, \zeta)$ über $\lambda = \psi + \ddot{u}/\tau$ (siehe (33a) aus $\ddot{u}(\zeta, \tau)$ und $N(\zeta, \tau)$ mit Hilfe von (35) und (36).

Für $\lambda(N, \tau)$ lauten die partiellen Ableitungen

$$(43) \quad \begin{cases} N^{\lambda}_{\tau} = N^{\psi}_{\tau} + \frac{1}{\tau} \cdot N \ddot{u}_{\tau} \\ \tau^{\lambda}_{N} = \frac{1}{\tau} \cdot \tau \ddot{u}_{N} \end{cases}$$

denn nach (27) ist $\tau^{\psi}_{N} = \ddot{u}/\tau^2$. Anwendung von (36) ergibt mit $\tau^{\psi}_{\tau} = -\log \zeta$

$$(44) \quad \begin{cases} N^{\lambda}_{\tau} = -\log \zeta + \frac{1}{\tau} \cdot \zeta \ddot{u}_{\tau} \cdot \zeta_{\tau} \\ \tau^{\lambda}_{N} = \frac{1}{\tau} \cdot (\tau \ddot{u}_{\zeta} + \zeta \ddot{u}_{\tau} \cdot \zeta_N) \end{cases}$$

mit $\zeta_{\tau} = (\zeta N_{\tau})^{-1}$ und $\zeta_N = -\tau N_{\zeta} / \zeta N_{\tau}$ (siehe (40)).

Für die partiellen Ableitungen von $\lambda(\zeta, N)$ erhalten wir aus $\lambda = \psi + \ddot{u}/\tau$ nach mehrfacher Anwendung von (36) wegen $\tau^{\psi}_{N} = \ddot{u}/\tau^2$ und $\tau^{\psi}_{\tau} = -\log \zeta$

$$(45) \quad \begin{cases} N^{\lambda}_{\zeta} = -\log \zeta + \frac{1}{\tau} \cdot \tau \ddot{u}_{\zeta} \cdot N^{\tau}_{\zeta} \\ \zeta^{\lambda}_{N} = \frac{1}{\tau} \cdot (\zeta \ddot{u}_{\tau} + \tau \ddot{u}_{\zeta} \cdot \zeta^{\tau}_{N}) \end{cases}$$

Schließlich ergeben sich in analoger Weise die partiellen Ableitungen von $\lambda(\tau, \zeta)$:

$$(46) \quad \begin{cases} \tau^{\lambda}_{\zeta} = -\log \zeta \cdot N_{\zeta} + \frac{1}{\tau} \cdot \tau \ddot{u}_{\zeta} \\ \zeta^{\lambda}_{\tau} = -\log \zeta \cdot \zeta N_{\tau} + \frac{1}{\tau} \cdot \zeta \ddot{u}_{\tau} \end{cases}$$

c) Die thermodynamischen Potentiale f , \tilde{u} , g und h sowie ihre totalen Differentiale.

Wir behandeln die vier bekanntesten Potentiale Energie $U(S, V, N)$, die freie Energie $F(T, V, N)$, die Enthalpie $H(S, p, N)$ und die freie Enthalpie $G(T, p, N)$. Es gelten die Definitionsgleichungen:

$$(47) \quad U := F + T \cdot S \quad ; \quad F \quad ; \quad H := U + p \cdot V \quad ; \quad G := H - T \cdot S.$$

Wegen

$$(48) \quad (G + U) - (H + F) = 0$$

gibt es aber nur drei "unabhängige" Potentiale. Der Zustand eines (einphasigen, ...) thermodynamischen Systems ist durch Vorgabe von drei thermodynamischen Größen festgelegt (z.B. durch (U, H, G) oder (S, V, N) usw.). Ist das System dagegen ein ideales Gas, so gibt es wegen $p \cdot V = \frac{2}{3} U$ und damit

$$(49) \quad H = \frac{5}{3} U$$

nur zwei unabhängige Größen. Die Potentiale hängen nach der Transformation (9) von zwei (transformierten) Größen ab (so z.B. $\tilde{u}(s, N)$, welches sich aus $\tilde{u}(\tau, \zeta)$ durch Eliminieren von τ und ζ mittels $\lambda(\tau, \zeta)$ und $N(\tau, \zeta)$ berechnen läßt).

1. Das totale Differential der freien Energie $F(T, V, N)$ ist schon in Abschnitt a)2. behandelt worden.

$$(50) \quad dF = -S dT - p dV + \mu dN \quad ; \quad df = -s d\tau + \mu dN.$$

2. Das totale Differential der Energie

Nach (10) ist

$$dU(S, V, N) = d\check{u}(s, N) \cdot \gamma^{-1} - \frac{2}{3} \cdot \frac{U}{V} \cdot dV, \quad \gamma := \frac{2m}{h^2} \cdot V^{1/3}$$

Wir setzen (auf der linken Seite) $dS = k \cdot ds$ ein, ordnen nach ds , dV und dN und erhalten wegen $u = \frac{3}{2} pV$

$$(51) \quad \left. \begin{aligned} U_{S, V, N} &= (\gamma \cdot k)^{-1} \cdot s \check{u}_N & U_{N, V, S} &= \gamma^{-1} \cdot N \check{u}_s & U_{V, N, S} &= -p. \end{aligned} \right\}$$

Nun berechnen wir die partiellen Ableitungen von $\check{u}(s, N)$:

Die drei Funktionen zweier Variablen $\check{u}(z, \tau)$, $N(z, \tau)$ und $s(z, \tau)$ sind in (17, 18) bzw. (33a) angegeben. In $d\check{u}(s, N)$ setzen wir nun $dN(z, \tau)$ und $ds(z, \tau)$ ein, ordnen nach dz - und $d\tau$ -Gliedern und vergleichen mit $d\check{u}(z, \tau)$. Die resultierenden Bestimmungsgleichungen für $s \check{u}_N$ und $N \check{u}_s$ lösen wir nach diesen beiden Unbekannten auf und erhalten die Funktionaldeterminanten-Quotienten¹⁹

$$(52) \quad \left\{ \begin{aligned} s \check{u}_N &= \frac{|N, \check{u}|}{|N, s|} \Bigg|_{z, \tau} & N \check{u}_s &= \frac{|s, \check{u}|}{|s, N|} \Bigg|_{z, \tau} \end{aligned} \right. , \quad \text{mit } {}_{a,b} |A, B| := \begin{vmatrix} A_a & B_b \\ B_a & A_a \end{vmatrix}.$$

(52) ist definiert, weil im physikalischen Bereich

1.) alle auftretenden Funktionen mit ihren Umkehrungen differenzierbar und eindeutig sind und

2.) von den drei Funktionen \check{u} , N und s je zwei unabhängig sind.

Setzen wir nun in (52) für die partiellen Ableitungen von $s(\tau, z)$ die in (46) gefundenen Ausdrücke ein, so erhalten wir wegen $|N, N| = |\check{u}, \check{u}| = 0$

$$(53) \quad \frac{|N, s|}{|s, \tau|} = \frac{1}{\tau} \cdot \frac{|N, \check{u}|}{|z, \tau|} \quad ; \quad \frac{|s, \check{u}|}{|z, \tau|} = -\log z \cdot \frac{|s, N|}{|z, \tau|}$$

und damit

$$(54) \quad s \check{u}_N = \tau \quad ; \quad N \check{u}_s = \mu$$

Aus (51) folgt

$$(55) \quad \left. \begin{aligned} U_{S, V, N} &= T & U_{N, V, S} &= M & U_{V, S, N} &= -p \end{aligned} \right\}$$

$$(56) \quad dU(S, V, N) = T ds - p dV + M dN, \quad d\check{u}(s, N) = \tau ds + \mu dN.$$

¹⁹dies sind die Verallgemeinerungen von (35, 36) für 3 Funktionen.

3. Das totale Differential von $H(S, p, N)$ und $h(s, N)$.

In der Gleichung (10), angeschrieben für den Übergang von dH zu dh setzen wir $dH = dH(S, p, N)$ und $dh = dh(s, N)$ ein, substituieren dp nach (10) durch $d\pi$ und berücksichtigen $dS = k \cdot ds$ sowie

$$dV = -\frac{V}{\tau} \cdot d\tau + \frac{2}{3} \cdot \frac{T}{\tau} \cdot ds + \frac{2}{3} \cdot \frac{\mu}{\tau} \cdot dN ,$$

(Beweis: $d(\pi V) = \frac{2}{3} d\tilde{u}(s, N)$ mit (54)). Ordnen nach Gliedern in $d\tau$, ds und dN ergibt die Bestimmungsgleichungen

$$(57) \quad \begin{cases} {}_S H_{p, N} \cdot \gamma \cdot k - {}_S h_N - \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot H_{S, N} / \sqrt{V - \frac{5}{3}} \right) \cdot \tau = 0 , \\ {}_S H_{p, N} + \left(\frac{2}{3} \cdot H_{S, N} / \sqrt{V - \frac{5}{3}} \right) \cdot V = 0 , \\ {}_S H_{p, N} \cdot \gamma - {}_N h_S + \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot H_{S, N} / \sqrt{V - \frac{5}{3}} \right) \cdot \mu = 0 . \end{cases}$$

Wegen $h = \frac{5}{3} \tilde{u}$ folgt über (54)

$$(58) \quad {}_S h_N = \frac{5}{3} \cdot \tau , \quad {}_N h_S = \frac{5}{3} \cdot \mu .$$

Damit wird (57) gelöst durch

$$(59) \quad {}_S H_{p, N} = T , \quad {}_P H_{S, N} = V , \quad {}_N H_{p, S} = M ;$$

$$(60) \quad dH(S, p, N) = T \cdot dS + V \cdot dp + M \cdot dN , \quad dh(s, N) = \frac{5}{3} \cdot \tau \cdot ds + \frac{5}{3} \cdot \mu \cdot dN .$$

4. Das totale Differential von $G(T, p, N)$ und $g(\tau, N)$.

Zunächst geben wir für $g(\tau, \zeta)$ einen expliziten Ausdruck an: es ist nach (47)

$$g = h - \tau \cdot s = \frac{5}{3} \ddot{u} - \tau \cdot s$$

Mit $\ddot{u} = \ddot{u}(\tau, \zeta)$ und $s = s(\tau, \zeta)$ aus (18) bzw. (33a) erhalten wir

$$(61) \quad g = \mu \cdot N + \left\{ \frac{w \cdot \tau^2}{24 \pi} \cdot \mathcal{J}_3(\zeta) - \frac{\rho \cdot \tau^{3/2}}{6 \cdot \pi^2} \cdot \mathcal{J}_2(\zeta) \right\}$$

Im Unterschied zur Duhem-Gibbsschen Identität für das homogene ideale Gas, $g_{\text{hom.}} = \mu \cdot N$, treten hier zwei gestaltabhängige Terme hinzu, die jedoch linear im Inhalt bzw. der Krümmung der Oberfläche sind. Unser System ist also im Innern homogen, in Oberflächennähe dagegen (makroskopisch) inhomogen.

Zur Berechnung der totalen Differentiale von $G(T, p, N)$ und $g(\tau, N)$ substituieren wir zunächst in $dG = dG(T, p, N)$ mittels (9, 10) dT durch $d\tau$, sowie dp durch $d\tau \bar{\kappa}$ und anschließend überall dV über $d(\pi \cdot V) = \frac{2}{3} d\ddot{u}(\tau, N)$ und ordnen dann nach Gliedern in $d\tau$, $d\tau \bar{\kappa}$ und dN . Ersetzen wir andererseits dG über (10) durch $dg(\tau, N)$ und dV , substituieren wieder dV durch Glieder in $d\tau \bar{\kappa}$, und vergleichen den so erhaltenen Ausdruck für dG gliedweise mit dem oben abgeleiteten, so erhalten wir die Bestimmungsgleichungen

$$(62) \quad \begin{cases} T G_{p, N} \cdot \frac{1}{k} \cdot \left(1 - \frac{4}{9} \cdot \frac{\tau}{V \cdot \bar{\kappa}} \cdot \ddot{u}_N\right) - G_{p, T, N} \cdot \frac{4}{9} \cdot \frac{\ddot{u}_N}{V} = g_{\tau N} - \frac{4}{9} \cdot \frac{\ddot{u}_N}{V \bar{\kappa}} \cdot (-\tau \cdot \psi + V \cdot \bar{\kappa}) \\ T G_{p, N} \cdot \frac{1}{k} \cdot \tau + G_{p, T, N} \cdot \frac{5}{2} \cdot \bar{\kappa} = (-\tau \cdot \psi + V \cdot \bar{\kappa}) \\ - G_{p, N} \cdot \frac{1}{k} \cdot \frac{4}{9} \cdot \frac{\tau}{V \bar{\kappa}} \cdot \ddot{u}_N + G_{N, p, T} \cdot \delta - G_{p, T, N} \cdot \frac{4}{9} \cdot \frac{N \ddot{u}_T}{V} = g_{N \delta \tau} - \frac{4}{9} \cdot \frac{N \ddot{u}_T}{V \bar{\kappa}} \cdot (-\tau \cdot \psi + V \cdot \bar{\kappa}) \end{cases}$$

Wegen $g = \beta + \frac{2}{3} \ddot{u}$ erhalten wir

$$(63) \quad N g_{\tau} = \mu + \frac{2}{3} \ddot{u}_N \tau \quad ; \quad g_{\tau N} = -\delta + \frac{2}{3} \frac{\ddot{u}_N}{\tau}$$

Das lineare Gleichungssystem (62) wird gelöst durch

$$(64) \quad T G_{p, N} = -S \quad ; \quad G_{p, T, N} = V \quad ; \quad N G_{p, T} = M \quad ;$$

$$dG(T, p, N) = -S dT + V dp + M dN \quad , \quad dg(\tau, N) = \left(\mu + \frac{2}{3} \ddot{u}_N \tau\right) dN - \left(\delta - \frac{2}{3} \frac{\ddot{u}_N}{\tau}\right) d\tau$$

C Explizite Berechnung einiger spezieller thermodynamischer Größen des idealen Gases mit quantenmechanischer Oberflächenspannung.

- Kapitel 3 Oberflächenspannung σ , spezifische Wärme c_v und innere Energie U , als Funktionen der Temperatur T , der Teilchenzahl N und des Volumens V für
- Boltzmann-Maxwell-Statistik,
 - Fermi-Dirac-Statistik bei starker Entartung,
 - Fermi-Dirac-Statistik bei mittlerer Entartung sowie
 - Fermi-Dirac- sowie Bose-Einstein-Statistik bei schwacher Entartung.

Der Weg zur Berechnung jeder thermodynamischen Größe des idealen Gases mit quantenmechanischer Oberflächenspannung ist durch die in Teil B dieser Arbeit angegebenen Beziehungen vorgezeichnet. Wir beschränken uns auf die explizite Berechnung von drei Funktionen: der inneren Energie U , der spezifischen Wärme c_v und der Oberflächenspannung²⁰ σ in Abhängigkeit von der Temperatur T , der Teilchenzahl N und der Gestalt des Systems (soweit diese durch das Volumen V , den Oberflächeninhalt W und die totale Krümmung L festgelegt ist).

Die Ausgangsgleichungen sind

$$\left. \begin{aligned}
 (9) \quad U(T, N, V) &= \frac{k^2}{2m} \cdot V^{-2/3} \cdot \check{u}(\tau, N) \\
 (37) \quad c_v &:= \frac{U}{T} \Big|_{N, V} = k \cdot \tau \check{u}' \Big|_{N} \\
 (65) \quad \sigma &:= \frac{U}{W} \Big|_{T, N, V} = \frac{k^2}{2m} \cdot V^{-4/3} \cdot \check{u}' \Big|_{\tau, N}
 \end{aligned} \right\} (66)$$

sowie

$$\begin{aligned}
 (18) \quad \check{u} &= \check{u}(\zeta, \tau) = \tau \cdot \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{2\pi^2} \cdot J_4(\zeta) - \frac{w\tau}{8\pi} \cdot J_3(\zeta) + \frac{\ell\tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot J_2(\zeta) \right\}, \\
 (17) \quad N &= N(\zeta, \tau) = \left\{ \frac{\tau^{3/2}}{2\pi^2} \cdot J_2(\zeta) - \frac{w\tau}{8\pi} \cdot J_1(\zeta) + \frac{\ell\tau^{1/2}}{8\pi^2} \cdot J_0(\zeta) \right\}.
 \end{aligned}$$

²⁰Neben (65) gibt es andere mögliche Definitionen für σ : so sollte die experimentell beobachtete Oberflächenspannung

In (18) ist mit Hilfe von (17) zu eliminieren. Aus der so erhaltenen Funktion $\check{u}(\tau, N)$ und ihren Ableitungen $c_{\check{u}, N}$ und $w_{\check{u}, \tau, N}$ ergeben sich nach (66) die gesuchten Größen U , c_v und σ .

Die Eliminierung von ζ aus (17, 18) ist dann ausführbar, wenn die Integrale $J_u(\zeta, u)$ explizit berechnet worden sind. Dies ist jedoch nur getrennt für die verschiedenen Statistiken und i. a. nur für Teilbereiche von ζ möglich: im Anhang 1 werden die entsprechenden Reihenentwicklungen der Integrale $J_u(\zeta, u)$ abgeleitet und ihre Konvergenz-Eigenschaften ausführlich untersucht.

Für den klassischen Grenzfall der Boltzmann-Maxwell-Statistik ($u=0$) sind die Integrale $J_u(\zeta)$ für alle Werte von ζ geschlossen lösbar. Im Abschnitt a) dieses Kapitels berechnen wir für diesen Fall U , c_v und σ .

Für die Quantenstatistiken (Fermi-Dirac-Statistik, $u=-1$; Bose-Einstein-Statistik, $u=+1$.) wurden²¹ in den Jahren 1926-1929 Reihenentwicklungen für die Integrale J_4 und J_2 angegeben, welche in den Volumen-abhängigen Termen von $N(\zeta, \tau)$ und $\check{u}(\zeta, \tau)$ auftreten. Für die Berücksichtigung der Oberflächeneffekte sind auch J_3 , J_1 und J_0 zu entwickeln und die Konvergenz aller Reihen zu untersuchen, da in (17) und (18) jeweils die Glieder dreier verschiedener Reihen miteinander konkurrieren.

Im Spezialfall starker Entartung für die Fermi-Statistik werden die Größen U , c_v und σ in Abschnitt b) dieses Kapitels berechnet. Es ist hier nicht sinnvoll, diese Größen für ein stark entartetes Bose-System zu berechnen: in einem solchen System ist das unterste Niveau sehr stark besetzt - es gilt ja kein Pauli-Prinzip - ; der genaue Betrag des Eigenwertes des untersten Niveaus bestimmt entscheidend die

der Atomkerne mit der Größe $\sigma_k := \sqrt{\mu_{S, M, N}}$ verglichen werden, da bei Kernvibrationen neben der Teilchenzahl nicht das Volumen und die Temperatur, sondern die Dichte im Kerninnern welche i. w. vom chemischen Potential μ allein abhängt, und die Entropie (der Kern als abgeschlossenes System) Konstanten der Bewegung sind.

²¹ E. Fermi, Z. Phys. 36, 902ff., (1926); -
A. Sommerfeld, Z. Phys. 47, 1ff., (1928); -
R. H. Fowler, Statistical Thermodynamics, Cambr. Univ. Press, (1929).

Zustandssumme, hängt aber in nicht überschaubarer Weise von der genauen lokalen Gestalt des vorgegebenen Hohlraumes ab. Er läßt sich - auch nicht angenähert²² - aus der für asymptotisch große Eigenwerte gültigen Näherungsformel (der mittleren quasiklassischen, nur von Integralen über die Oberfläche des Hohlraumes abhängigen Zustandsdichte, von der wir in dieser Arbeit ausgehen) bestimmen, wie dies E. Schrödinger²³ getan hat, um die Einstein-Kondensation zu erläutern.

Für ($\alpha \approx 1$, $\nu = -1$), entsprechend mittlerer Entartung eines Fermionensystems, werden in Abschnitt c) die Größen u , σ und c_v angegeben.

Für den Spezialfall schwacher Entartung lassen sich die Integrale $J_\nu(\zeta)$ für die Bose-Statistik formal auf solche für die Fermi-Statistik zurückführen. Daher werden im Abschnitt d) dieses Kapitels u , c_v und σ für beide Statistiken gemeinsam berechnet.

²²In der Akustik kann leicht demonstriert werden, daß der niedrigste Eigenwert umso höher ist, je unsymmetrischer der Hohlraum ist. "Sehr unregelmäßig geformte Hohlräume haben keine Eigenschwingungen" (im Hörbereich!).

²³E. Schrödinger¹¹, Seite 77 .

a) Boltzmann-Maxwell-Statistik.

Gehorchen die Teilchen des räumlich begrenzten idealen Gases der Boltzmann-Maxwell-Statistik, d.h. sind verschiedene Teilchen mit gleichen Eigenschaften unterscheidbar, so ist in (A.11a) $l=0$ zu setzen. Die Integrale $J_n(\zeta)$ sind dann linear in ζ ,

$$(A.12) \quad J_n(\zeta) = \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{n-1}{2}\right)! \cdot \zeta \quad \text{falls } l = 0,$$

und wir erhalten aus (17)

$$(67) \quad N(\tau, \zeta) = \zeta \cdot \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{3/2} \cdot \left\{ 1 - \frac{\omega}{4} \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{1/2} + \frac{\ell}{2\pi} \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^1 \right\}$$

für jeden beliebigen Wert von ζ . Einschränkend muß aber

$$(68) \quad x^{-1} := \left(\frac{2\omega}{\tau^2} \cdot V^{2/3} \cdot k \cdot T / \pi\right)^{1/2} \gg 1$$

sowie

$$(69) \quad \zeta \gg 4 \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{3/2}$$

gelten, damit die Voraussetzungen der quasiklassischen Näherung: große Teilchenzahl sowie das Mitwirken zahlreicher Eigenniveaus bei der Zustandssumme, erfüllt bleiben.

Aus (18) erhalten wir mit (A.12) für $\check{u}(\tau, \zeta)$:

$$(70) \quad \check{u}(\tau, \zeta) = \zeta \cdot \frac{3\pi}{8} \cdot \left(\frac{\tau}{\pi}\right)^{5/2} \cdot \left\{ 1 - \frac{\omega}{6} \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{1/2} + \frac{\ell}{6\pi} \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^1 \right\}.$$

Rechnerisch können (67) und (70) wegen (68) als Reihenentwicklung nach $(\pi/\tau)^{1/2}$ aufgefasst werden. Wir eliminieren ζ in $\check{u}(\tau, \zeta)$ mit Hilfe von (67) und entwickeln in dritter Näherung nach Potenzen von $(\pi/\tau)^{1/2}$:

$$(71) \quad \check{u}(\tau, N) = \frac{3}{2} \cdot N \cdot \tau \cdot \left\{ 1 + \frac{\omega}{12} \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{1/2} + \left(\frac{\omega^2}{48} - \frac{\ell}{3\pi}\right) \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^1 \right\}.$$

Daraus ergibt sich die spezifische Wärme

$$(72) \quad c_V = k \cdot \check{u}_{\tau N} = \frac{3}{2} \cdot N \cdot k \cdot \left\{ 1 + \frac{\omega}{24} \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{1/2} + o\left(\frac{\pi}{\tau}\right)^1 \right\},$$

und die Oberflächenspannung (mit $\tau = \frac{2\omega}{\tau^2} \cdot V^{2/3} \cdot k \cdot T$)

$$(73) \quad \sigma = \frac{k^2}{2\omega} \cdot V^{-1/3} \cdot \check{u}_{\tau N} = \frac{\sqrt{\pi}}{8} \cdot \left(\frac{k^2}{2\omega}\right)^{1/2} \cdot \frac{N}{V} \cdot \sqrt{k \cdot T} \cdot \left(1 + \frac{\omega}{2} \cdot \left(\frac{\pi}{\tau}\right)^{1/2} \right)$$

Für ideale Boltzmann-Maxwell-Systeme - meist nur als

klassischer Grenzfall idealer Fermi- oder Bose-Systeme auftretend - ist die quantenmechanische Oberflächenspannung positiv und proportional zur Teilchendichte und der Wurzel aus der Temperatur.

b) Fermi-Dirac-Statistik bei starker Entartung.

Für stark entartete Fermionensysteme sind die Integrale $J_n(\lambda, \tau)$ für $\nu = -1$ und $\lambda \gg 1$, d.h. $\alpha \ll -1$ zu entwickeln. Dies ist im Anhang 1, S. A4ff., durchgeführt. Wir entnehmen (A.79)

$$(A.79) \quad J_n(\alpha) = \frac{|\alpha|^{n+1}}{n+1} \cdot \left(1 + \frac{\pi^2}{6|\alpha|^2} \cdot \frac{(n-1) \cdot (n+1)}{24} \right) + O(|\alpha|^{n+1-3}).$$

Damit erhalten wir für $N(\alpha, \tau)$ und $\check{u}(\alpha, \tau)$ aus (17, 18)

$$(74) \quad N(\alpha, \tau) = \frac{1}{6\pi^2} \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{3/2} \cdot \left[1 - \frac{3\pi}{8} \cdot w \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2} + \frac{3}{4} \cdot \ell \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1} \right] \\ + \frac{1}{48} \cdot \tau^2 \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2} \cdot \left[1 + \frac{1}{4} \cdot \ell \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1} \right] + O(1 + \tau^2 \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-2} + \tau^4 \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-5/2}),$$

$$(74a) \quad N(x, \tau) =: N_0(x) + \tau^2 \cdot N_1(x) + \dots, \quad x := (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2},$$

sowie

$$(75) \quad \check{u}(\alpha, \tau) = \frac{1}{10\pi^2} \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{5/2} \cdot \left[1 - \frac{5\pi}{16} \cdot w \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2} + \frac{5}{12} \cdot \ell \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1} + O((\tau \cdot |\alpha|)^{-3/2}) \right] \\ + \frac{1}{16} \cdot \tau^2 \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{1/2} \cdot \left[1 - \frac{\pi}{6} \cdot w \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2} + \frac{1}{12} \cdot \ell \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-1} + O((\tau \cdot |\alpha|)^{-3/2}) \right] \\ + O(\tau^4 \cdot (\tau \cdot |\alpha|)^{-3/2}),$$

$$(75a) \quad \check{u}(x, \tau) =: \check{u}_0(x) + \check{u}_1(x) \cdot \tau^2 + \dots, \quad x := (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2};$$

dabei sind durch (74a, 75a) Funktionen N_0, N_1, \check{u}_0 und \check{u}_1 eingeführt worden, die nach (74), (75) ausschließlich von $x = (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2}$ abhängen.

(74, 75) sind die gleichzeitigen Entwicklungen von $N(x, \tau)$ bzw. $\check{u}(x, \tau)$ nach den beiden unabhängigen Variablen x und τ für

$$(76)_a \quad x := (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2} \ll 1,$$

sowie

$$(76)_b \quad \tau \ll 1.$$

Unter diesen beiden Voraussetzungen folgt aus (74), daß $(6\pi^2 N) \sim x^{-3} \gg 1$, sowie $|\alpha|^{-\nu} \ll \tau^{1/2}$, also die beiden unabhängigen Bedingungen

$$(77)_a \quad N \gg 1, \quad (\text{quasiklassische Näherung});$$

$$(77)_b \quad |\alpha| \gg 1, \quad (\text{starke Entartung}).$$

von denen wir in diesem Abschnitt ausgegangen sind.

Um $\check{u}(\tau, N)$ zu erhalten, haben wir x aus (75) mit Hilfe von (74) zu eliminieren. Dazu lösen wir zunächst (74) in dritter Näherung in $y: (6\pi^2 N)^{1/3} \ll 1$ und in zweiter Näherung in $\tau^2 \ll 1$ auf, indem wir für $x(y, \tau)$ den Ansatz $x(y, \tau) = y(1 + a \cdot y + b \cdot y^2) + \tau^2(1 + d \cdot y + e \cdot y^2)$ in (74) einsetzen, alle Terme nach Taylor entwickeln²⁴, um dann nach Ordnen der Glieder nach gleichen y - bzw. τ^2 -Potenzen durch Koeffizientenvergleich die Größen a, b, c, d und e zu bestimmen. Das Ergebnis ist

$$(78) \quad x = y \cdot \left\{ \left(1 - \frac{\pi}{8} w \cdot y + \frac{e}{4} \cdot y^2 \right) + \tau^2 y^4 \cdot \frac{\pi^2}{24} \cdot \left(1 - \frac{3\pi}{8} w \cdot y + y^2 \left(\frac{\pi^2 w^2}{128} - \frac{5}{4} \cdot e \right) \right) \right\} + O(y^4 \cdot (1 + \tau^2 y^4 + \tau^4 y^8)).$$

Setzen wir dies in (75) ein und entwickeln gleichzeitig nach $y \ll 1$ und $\tau^2 \ll 1$, so erhalten wir als Ergebnis²⁶

$$(79) \quad \check{u}(\tau, N) = \frac{1}{10\pi^2 y^5} \left\{ 1 + \frac{5\pi}{16} w \cdot y + y^2 \left(-\frac{5}{6} \ell + \frac{5\pi^2 w^2}{64} \right) \right\} + \tau^2 \frac{1}{24 \cdot y} \left\{ 1 - \frac{\pi}{8} w y + y^2 \left(-\ell - \frac{29\pi^2 w^2}{256} \right) \right\} + O(y^{-2} + \tau^2 y^2 + \tau^4 y^3) ; \quad y := (6\pi^2 N)^{-1/3}$$

Die spezifische Wärme ergibt sich aus (79) zu

$$(80) \quad c_v = \tau \check{u}_N \cdot k = \frac{k \cdot T}{12} \cdot \frac{1}{y} \left\{ 1 - \frac{\pi}{8} w \cdot y + y^2 \left(-\ell - \frac{29\pi^2 w^2}{256} \right) \right\} + \dots = \frac{(6\pi^2)^{1/3}}{12} \cdot \left(\frac{2m}{h} \right) \cdot k^2 \cdot N \cdot \left(\frac{N}{V} \right)^{-2/3} \cdot T \cdot \left\{ 1 - \frac{\pi}{8} w \cdot (6\pi^2 N)^{-1/3} + \left(-\ell - \frac{29\pi^2 w^2}{256} \right) \cdot (6\pi^2 N)^{-1/3} + \dots \right\}.$$

Sie ist linear in der Temperatur. Die Oberflächenterme bewirken eine (zu $w \cdot y$) proportionale) Verringerung von c_v .

Die Oberflächenspannung

$$(81) \quad \sigma(T, V, N) = \frac{h^2}{2m} \cdot V^{-4/3} \cdot w \check{u}_{\tau, N} = \frac{h^2}{2m} \cdot V^{-4/3} \cdot \left\{ \left(\frac{1}{32\pi} \cdot \frac{1}{y^4} + \frac{w}{64} \cdot \frac{1}{y^3} \right) + \tau^2 \left(-\frac{\pi^2}{192} + w \cdot y \cdot \frac{29\pi^2}{3072} \right) + \dots \right\}, \quad y := (6\pi^2 N)^{-1/3}$$

nimmt mit zunehmender Temperatur quadratisch ab.

²⁴In²⁵ sind die ersten Koeffizienten für einige typische Reihenoperationen angegeben worden. Doch ist hier und im Folgenden das Zurückführen unserer Ausgangsreihen auf die für erforderlichen Normalformen umständlicher als die direkte Anwendung der Taylor-Formel.

²⁵M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of Math. Functions, Dover Publ. Inc., New York, S. 15, 3. 615ff., (1965).

²⁶In (78, 79) beschreiben die 0-Terme die Asymptotik der bei der Entwicklung zu vernachlässigenden Glieder.

Exkurs:

Wir berechnen nun $\sigma_k(T, \rho_0, N)$, die auf die Teilchendichte ρ_0 im Innern des Systems (statt auf das Volumen) bezogene Oberflächenspannung²⁰. σ_k ist verwandt mit der Kernoberflächenspannung angeregter Atomkerne, wenn der Atomkern als stark entartetes ideales Fermigas in einem lokalen Potential der Gestalt U mit harten Wänden idealisiert wird. Für ρ_0 ist dann die experimentell zu bestimmende Sättigungsdichte einzusetzen, welche erfahrungsgemäß vom Atomgewicht (N) nahezu unabhängig ist.

Die konstante Teilchendichte im Innern des Systems ρ_0 ergibt sich aus (74):

$$(82) \quad \rho_0(T, V, \alpha) := \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{N}{V} = \frac{1}{6\pi^2} \cdot \left(k \cdot T \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \cdot |\alpha| \right)^{3/2}.$$

Vergleichen wir diesen Ausdruck mit der asymptotischen Teilchendichte für $T=0$, siehe^{8,9},

$$(83) \quad \rho_0(T=0, V, h_f) = \frac{1}{6\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \cdot h_f \right)^{3/2},$$

so zeigt sich, daß an die Stelle der Energie der Fermikante h_f bei endlichen Temperaturen der Ausdruck

$$(84) \quad h_f(T) := k \cdot T \cdot |\alpha|$$

einzusetzen ist, wenn der formale Zusammenhang (83) beibehalten werden soll.

Aus

$$(9) \quad U(T, V, N) = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \tilde{u}(\tau, N) \cdot V^{-2/3}$$

sind die Variablen τ und V durch Ausdrücke in N , T und ρ_0 zu substituieren, damit wir

$$(85) \quad \sigma_k(T, \rho_0, N) := U_{T, \rho_0, N}$$

berechnen können. Nach (9) ist

$$(9) \quad \tau = \frac{2m}{\hbar^2} \cdot k \cdot T \cdot V^{2/3}.$$

Aus (82) erhalten wir zunächst für χ

$$(86) \quad \chi := (\tau \cdot |\alpha|)^{-1/2} = V^{-1/3} \cdot (6\pi^2 \rho_0)^{-1/3}.$$

Da in (78) x als Funktion von y und τ , dh. N, V und T angegeben ist, läßt sich nach Einsetzen von (86) und näherungsweise Auflösen nach V das Volumen als Funktion von N, ϱ_0 und T bestimmen. Dies geschieht am zweckmäßigsten, indem wir (86) sowie den Ansatz

$$V^{-2/3} =: A \cdot y^n \cdot (1 + B \cdot y) + C \cdot y^m \cdot T^2 \cdot (1 + D \cdot y)$$

in (74) einsetzen, alle Terme nach Taylor entwickeln und schließlich nach gleichen y - bzw. T^2 -Potenzen ordnen. Wir vernachlässigen diesmal auch die Krümmungsterme sowie die quadratisch von w abhängigen Terme. Koeffizientenvergleich gleicher y - und T^2 -Potenzen liefert

$$n = m = 2; \quad A = (6\pi^2 \varrho_0)^{2/3}; \quad B = -\frac{\pi w}{4}; \quad C = \frac{\pi^2}{12} \cdot \left(\frac{2w}{k^2}\right)^2 \cdot k^2 \cdot (6\pi^2 \varrho_0)^{-2/3}; \quad D = 0.$$

Setzen wir dieses Ergebnis für $V^{-2/3}$ zusammen mit (9) in (84) ein, so erhalten wir

$$(87) \quad U(T, \varrho, N) = \frac{k^2}{2w} \cdot \frac{3}{5} \cdot N \cdot (6\pi^2 \varrho_0)^{2/3} \cdot \left(1 + \frac{\pi w}{16} \cdot (6\pi^2 N)^{-1/3} + \dots\right) \\ + \frac{2w}{k^2} \cdot k^2 \cdot T^2 \cdot N \cdot (6\pi^2 \varrho_0)^{-2/3} \cdot \frac{3\pi^2}{10} \cdot \left(1 - \frac{5\pi w}{96} \cdot (6\pi^2 \varrho_0)^{-1/3} + \dots\right),$$

und daraus

$$(88) \quad \sigma_k(T, \varrho, N) = \frac{k^2}{2w} \cdot \frac{(6\pi^2)^{4/3}}{160\pi} \cdot (\varrho_0 \cdot N)^{2/3} - \frac{2w}{k^2} \cdot \frac{\pi}{384} \cdot k^2 \cdot T^2 \cdot \varrho_0^{-4/3} \cdot (\varrho_0 \cdot N)^{2/3}.$$

c) Fermi-Dirac-Statistik bei mittlerer Entartung.

Für den durch $(\zeta = e^{-\alpha}, |\alpha| \ll 1)$ gekennzeichneten Bereich "mittlerer" Entartung berechnen wir nun die innere Energie $U(\tau, N, V)$, die Oberflächenspannung σ und die spezifische Wärme c_v .

Die Integrale $J_n(\zeta, \nu)$ für $\zeta \approx 1, \nu = -1$ sind im Anhang 1, S.20 entwickelt worden:

$$(A.95) \quad J_{2s+1}(\alpha) = \frac{1}{2} \cdot s! \cdot (Z(\zeta+1) + \alpha \cdot \kappa(\zeta)), \quad \zeta = e^{-\alpha}, \quad \zeta = \frac{\nu-1}{2}, \quad |\alpha| \ll 1.$$

Die numerischen Werte der Zahlen $\kappa(\zeta)$ bzw. $Z(\zeta+1)$ sind im Anhang 1 (S.A 22) in Tabelle 4 bzw. in (A.39) angegeben. Mit (A.95) erhalten wir aus (17, 18) mit den Abkürzungen

$$(89) \quad x := \sqrt{\frac{\pi}{2}}, \quad \xi := \frac{\ell}{2\pi}, \quad Z\left(\frac{a}{b}\right) := Z(a)/Z(b), \quad \kappa\left(\frac{a}{b}\right) := \kappa(a)/\kappa(b)$$

für $N(\alpha, x)$ den Ausdruck

$$(90) \quad N(\alpha, x) = \left\{ \frac{Z(3/2)}{4x^3} \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega x}{4} \cdot Z(3/2) + \xi \cdot x^2 \cdot Z(1/2) \right) + \alpha \cdot \frac{\kappa(1/2)}{Z(3/2)} \cdot \left(1 - \frac{\omega x}{4} \cdot \kappa(1/2) + \xi \cdot x^2 \cdot \kappa(-1/2) \right) \right] \right\}$$

sowie

$$(91) \quad \check{u}(\alpha, x) = \left\{ \frac{3\pi \cdot Z(5/2)}{8 \cdot x^5} \cdot \left[\left(1 - \frac{\omega x}{6} \cdot Z(5/2) + \frac{\xi}{6} \cdot x^2 \cdot Z(3/2) \right) + \alpha \cdot \frac{\kappa(3/2)}{Z(5/2)} \cdot \left(1 - \frac{\omega x}{6} \cdot \kappa(3/2) + \frac{\xi}{6} \cdot x^2 \cdot \kappa(1/2) \right) \right] \right\}.$$

Da x nur von τ abhängt, erhalten wir $\check{u}(\tau, N)$, indem wir α aus (91) mit Hilfe von (90) eliminieren. Beschreiben wir für die folgenden Rechnungen die Struktur der Gleichungen (90) und (91) durch

$$(92) \quad N(\alpha, x) =: \frac{Z(3/2)}{4x^3} \cdot \left((1 + N_0(x)) + \alpha \cdot N_1(x) + O(\alpha^2) \right),$$

$$\check{u}(\alpha, x) =: \frac{3\pi Z(5/2)}{8x^5} \cdot \left((1 + \check{u}_0(x)) + \alpha \cdot \check{u}_1(x) + O(\alpha^2) \right),$$

mit den durch (90, 91, 92) definierten Polynomen $N_j, \check{u}_j; j=0,1$, so folgt zunächst:

$$(93) \quad \check{u}(\alpha, x) = \frac{3\pi \cdot Z(5/2)}{8x^5} \cdot \left((1 + \check{u}_0(x)) + \check{u}_1(x) \cdot \frac{(4x^3 N - 1) - N_0(x)}{N_1(x)} \right).$$

Dieser Ausdruck ist unter den Forderungen

$$(94)_a \quad N \gg 1 \quad (\text{quasiklassische Naherung})$$

und

$$(94)_b \quad |\alpha| \ll 1 \quad (\text{"mittlere" Entartung})$$

abgeleitet worden. Damit folgt aus (90) auch $x \ll 1$; (90,92) konnen somit rechnerisch als Potenzreihenentwicklung nach den beiden unabhangigen Groen $x \ll 1$ und $|\alpha| \ll 1$ aufgefat werden. Es ist dann wegen (90):

$$(95) \quad K := \left(\frac{4x^3 \cdot N}{Z^{(3/2)}} - 1 \right) = \left(\frac{4 \cdot \sqrt{\pi}^3}{Z^{(3/2)}} \cdot \frac{N}{V} \cdot \left(\frac{k}{2m} \cdot \frac{1}{k \cdot T} \right)^{3/2} - 1 \right)$$

ein von x unabhangiger Entwicklungsparameter. Wir haben (93) nach

$$(96)_a \quad K \ll 1, \quad \text{d.h.} \quad \frac{N}{V} \approx \left(\frac{2m}{k} \cdot k \cdot T \right)^{3/2} \cdot Z^{(3/2)} / (4 \cdot \pi^{3/2}),$$

sowie

$$(96)_b \quad x \ll 1, \quad \text{d.h.} \quad \sqrt{\frac{\hbar}{E}} = \sqrt{\pi} \cdot \left(\frac{k}{2m} \cdot \frac{1}{k \cdot T} \right)^{1/2} \cdot V^{-1/3} \ll 1$$

zu entwickeln. Die Forderungen (96) sind wegen (90) mit (94) vertraglich. Als Ergebnis der Entwicklung von (93) nach K und x finden wir:

$$(97) \quad \check{u}(k, x) = \frac{3\pi \cdot Z^{(5/2)}}{8x^5} \cdot \left[(1 + a_1 \cdot K) + \frac{wx}{2} \cdot (a_2 + a_3 \cdot K) + x^2 \cdot \left(\{t \cdot a_4 + \frac{w^2}{24} \cdot a_5\} + \{t \cdot a_6 + \frac{w^2}{8} \cdot a_7\} \cdot K \right) \right]$$

mit den Zahlen:

$$(97)_a \quad \begin{aligned} a_1 &:= x^{(3/2)} \cdot Z^{(3/2)} & ; & \quad a_2 := \frac{1}{3} \cdot \left(Z^{(4/2)} \cdot x^{(3/2)} - Z^{(2/2)} \right) \\ a_3 &:= x^{(3/2)} \cdot Z^{(3/2)} \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot x^{(0/2)} - \frac{1}{3} \cdot x^{(1/2)} \right\} \\ a_4 &:= \left\{ \frac{1}{6} \cdot Z^{(3/2)} - x^{(3/2)} \cdot Z^{(1/2)} \right\} \\ a_5 &:= Z^{(1/2)} \cdot \left\{ x^{(0/2)} \cdot x^{(3/2)} - x^{(1/2)} \right\} \\ a_6 &:= Z^{(3/2)} \cdot \left\{ \frac{1}{6} - x^{(-1/2)} \cdot x^{(3/2)} \right\} \\ a_7 &:= x^{(0/2)} \cdot Z^{(3/2)} \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot x^{(3/2)} - \frac{1}{3} \cdot x^{(1/2)} \right\} \end{aligned}$$

und den in (89) und (95) definierten Abkurzungen.

Für die Oberflächenspannung σ folgt aus (97)

$$(98) \quad \sigma(T, V, N) = \frac{k^2}{2\omega} \cdot \frac{k^2 T^2}{16\pi} \cdot V^{2/3} \cdot \left[\left\{ Z(1) \cdot x^{(3/2)} - Z(2) \right\} \right. \\ \left. + K \cdot \left\{ x^{(3/2)} \cdot Z(3/2) \cdot (3 \cdot x^{(0)} - 2 \cdot x^{(1)}) \right\} \right] \\ + \omega x \cdot \left(\left\{ \frac{1}{2} \cdot Z(1) \cdot (x^{(0)} \cdot x^{(3/2)} - x^{(1)}) \right\} \right. \\ \left. + K \cdot \left\{ x^{(0)} \cdot Z(3/2) \cdot \left(\frac{3}{4} \cdot x^{(3/2)} - \frac{1}{2} x^{(1)} \right) \right\} \right)$$

mit K und x nach (89,95).

Numerisch ergibt sich nach Tabelle 4 (s. Anhang 1 S. A22) und (A.39):

$$(99)_a \quad (Z(1) \cdot x^{(3/2)} - Z(2)) = 0.042$$

sowie

$$(99)_b \quad x^{(3/2)} \cdot Z(3/2) \cdot (3 \cdot x^{(0)} - 2 \cdot x^{(1)}) = 0.65,$$

und damit in erster Näherung:

$$(100) \quad \sigma(T, V, N) = \frac{k^2}{2\omega} \cdot k^2 T^2 \cdot V^{2/3} \cdot (16\pi)^{-1} \cdot 0.04,$$

Die spezifische Wärme c_v ergibt sich aus (97) wegen zu:

$$(101) \quad c_v = k \cdot \frac{\ddot{u}}{T} = k \cdot x \cdot \left\{ \frac{(\ddot{u}(k, x))}{K} \cdot K_N + \frac{(\ddot{u}(k, x))}{x} \cdot K \right\}.$$

Daraus folgt:

$$(102) \quad c_v = \frac{3}{16} \cdot Z(5/2) \cdot \left(\frac{2\omega}{\pi \cdot k^2} \right)^{3/2} \cdot k^2 \cdot T^{3/2} \cdot V \cdot \left[\left(\{5 - 3a_1\} + 2a_1 \cdot K \right) \right. \\ \left. + \frac{\omega x}{2} \cdot \left(\{4a_2 - 3a_3\} + 2a_3 \cdot K \right) \right. \\ \left. + x^2 \cdot \left(\{3 \cdot (a_4 - a_6) + \omega^2 \cdot \frac{3}{8} (a_7 - a_7)\} \right) \right]$$

mit den in (97)_a definierten Zahlen a_μ , $\mu = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$.

d) Fermi-Dirac- und Bose-Einstein-Statistik bei schwacher Entartung.

Im limes sehr schwacher Entartung liefern beide Quantenstatistiken die gleichen Ergebnisse wie ihr gemeinsamer klassischer Grenzfall, die Boltzmannstatistik, für die wir U , c_v und σ im Abschnitt a) berechnet haben.

Für zunehmende, jedoch immer noch schwache Entartung, für den Bereich

$$(103) \quad \left\{ \begin{array}{l} N \gg 1 \quad , \quad (\text{quasiklassische Näherung}) \\ \zeta \ll 1 \quad \quad (\text{schwache Entartung}) \end{array} \right.$$

lassen sich für beide Quantenstatistiken gleichzeitig die Größen U , c_v und σ berechnen.

Die Integrale $J_n(\zeta, \nu)$ mit $\zeta := e^{-\alpha}$ und $\nu = +1$ für Bosonen und $\nu = -1$ für Fermionen sind im Anhang 1 berechnet worden. Wir entnehmen (A.97, A.104, A.11a)

$$(104) \quad J_n(\zeta, \nu) = \left(\frac{n-1}{2}\right)! \cdot \frac{1}{2} \cdot \zeta \cdot \sum_{\nu=1}^{\infty} \zeta^{\nu-1} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{\nu}}\right)^{\nu+1} \cdot \nu^{n+1}$$

Der erste Summand ist identisch gleich $J_n(\zeta, 0)$, dem Integral $J_n(\zeta)$ für Boltzmann-Systeme. In zweiter Näherung in $\zeta \ll 1$ entnehmen wir (104):

$$(105) \quad J_n(\zeta, \nu) = \left(\frac{n-1}{2}\right)! \cdot \frac{1}{2} \cdot \zeta \cdot \left(1 + \nu \cdot \zeta \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\nu+1}\right) + O(\zeta^3)$$

Setzen wir dies in (17, 18) ein, so erhalten wir:

$$(106) \quad N(x, \zeta; \nu) = a \cdot A \cdot \zeta + b \cdot B \cdot \zeta^2$$

mit den rechtechnischen Abkürzungen

$$(107) \quad x := \sqrt{\frac{\pi}{\tau}} \quad , \quad a := (4x^3)^{-1} \quad , \quad b = \nu \cdot (8\sqrt{2} \cdot x^3)^{-1} \quad , \quad A := \left(1 - \frac{\omega x}{4} + \frac{1}{3} x^2\right) \quad ,$$

$$B := \left(1 - \sqrt{2} \cdot \frac{\omega x}{4} + 2 \cdot \frac{1}{3} x^2\right) \quad ,$$

sowie

$$(108) \quad \tilde{N}(x, \zeta; \nu) = c \cdot C \cdot \zeta + d \cdot D \cdot \zeta^2$$

mit den Abkürzungen

$$(109) \quad x := \sqrt{\frac{\pi}{\tau}} \quad , \quad c := 3\pi \cdot (8x^3)^{-1} \quad , \quad d := 3\pi \cdot \nu \cdot (32\sqrt{2} \cdot x^3)^{-1} \quad , \quad C := \left(1 - \frac{\omega x}{6} + \frac{1}{3} x^2\right) \quad ,$$

$$D := \left(1 - \sqrt{2} \cdot \frac{\omega x}{6} + \frac{2}{3} x^2\right) \quad .$$

Um $\check{\alpha}(\tau, N)$ zu erhalten, ist ζ aus (108) mit Hilfe von (106) zu eliminieren. Wegen (103) können wir (106) leicht nach ζ auflösen:

$$(110) \quad \zeta = \frac{y}{A} \cdot \left(1 - \frac{b \cdot B}{a \cdot A^2} \cdot y\right) + O(y^3) \quad , \quad y := \frac{N}{a} = 4x^3 \cdot N .$$

Dabei haben wir anstatt von (103) nun die beiden unabhängigen Entwicklungsparameter

$$(111) \quad \begin{cases} x \ll 1 \\ y \ll 1 \end{cases}$$

zur Verfügung, die mit (103) wegen (106) verträglich sind. Für $\zeta \ll 1$ folgt aus (106) $\frac{N}{aA} \ll 1$, wegen $a = (4x^3)^{-1}$ und $A \approx 1$ also $4 \cdot N \cdot x^3 =: y \ll 1$ und wegen $N \gg 1$ also $x \ll 1$. Nur in diesem Falle ist gewährleistet, daß die Oberflächen- und Krümmungsterme als kleine Korrekturen des Volumenterms betrachtet werden und somit gestaltabhängige Terme höherer Näherungen vernachlässigt werden können.

In die physikalischen Größen umgeschrieben lauten die Bedingungen (111):

$$(112) \quad \begin{aligned} (k \cdot l)^{3/2} &\gg \frac{N}{V} \cdot 4 \cdot \left(\pi \cdot \frac{l^2}{2m}\right)^{3/2} \\ (k \cdot \tau)^{4/2} &\gg \frac{1}{V^{1/3}} \cdot \left(\pi \cdot \frac{l^2}{2m}\right)^{4/2} . \end{aligned}$$

Sie beschreiben anschaulich die beiden Bedingungen für die Gültigkeit der quasiklassischen Näherung bei schwacher Entartung für ein thermodynamisches System: hohe Temperatur und geringe Dichte.

Wir berechnen nun $\check{\alpha}(\tau, N)$. Einsetzen von ζ aus (110) in (108) ergibt:

$$(113) \quad \check{\alpha} = c \cdot y \cdot \left[\frac{C}{A} + \frac{d}{c} \cdot y \cdot \left(\frac{D}{A^2} - \frac{bc}{a \cdot d} \cdot \frac{B \cdot D}{A^3} \right) \right] .$$

Setzen wir in diese Gleichung die in (107, 109) definierten Größen ein und entwickeln nach $x \ll 1$ und $y \ll 1$, entsprechend (111), so erhalten wir:

$$(114) \quad \check{\alpha}(x, N; \tau) = \frac{3\pi}{2} \cdot N \cdot \frac{1}{x^2} \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega x}{12} + x^2 \left(-\frac{2}{3} \epsilon + \frac{\omega^2}{48}\right)\right) - \tau \cdot \frac{N}{\sqrt{2}} \cdot x^3 \cdot \left(1 + \frac{\omega x}{3} (2 - \sqrt{2}) + \frac{5}{8} \omega^2 x^2 \cdot \left(\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{1}{2}\right)\right) \right]$$

und somit für die innere Energie $U(\tau, N, V)$

$$(115) \quad U(T, N, V) = \frac{3}{2} N \cdot k \cdot T \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega x}{42} + x^2 \left(-\frac{2}{3} \epsilon + \frac{\omega^2}{48} \right) \right) - \frac{L}{\sqrt{2}} \cdot \frac{N}{V} \cdot \left(\frac{\pi \cdot \frac{h^2}{2m}}{h \cdot T} \right)^{3/2} \cdot \left(1 + \frac{\omega x}{3} (2 - \sqrt{2}) + \frac{5 \omega^2 x^2}{8} \left(\frac{\sqrt{2}}{3} - \frac{1}{2} \right) \right) \right]$$

mit

$$(116) \quad x := \sqrt{\frac{\pi}{\epsilon}} = \left(\pi \cdot \frac{h^2}{2m} \cdot \frac{1}{kT} \right)^{1/2} \cdot V^{1/3}$$

$$\text{und } L = \begin{cases} +1 & \text{für Fermionen-} \\ -1 & \text{für Bosonen-} \end{cases} \text{Systeme}$$

Für die spezifische Wärme c_v folgt aus (114)

$$(117) \quad c_v = k \cdot \ddot{u}_{v,N} = k \cdot \ddot{u}_{v,N} \cdot \epsilon^x,$$

$$c_v = \frac{3}{2} \cdot N \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega x}{24} \right) + \frac{L}{2\sqrt{2}} \cdot \frac{N}{V} \cdot \left(\frac{\pi \cdot \frac{h^2}{2m}}{h \cdot T} \right)^{3/2} \cdot \left(1 + \frac{2}{3} (2 - \sqrt{2}) \omega x + \frac{5}{8} \cdot \left(\sqrt{2} - \frac{3}{2} \right) \cdot \omega^2 x^2 \right) \right]$$

mit (116). Die spezifische Wärme ist also nicht von der Krümmung abhängig!

Für die Oberflächenspannung folgt aus (114)

$$(118) \quad \sigma = \frac{h^2}{2m} \cdot V^{-1/3} \cdot \ddot{u}_{\sigma,N}$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{8} \cdot \frac{N}{V} \cdot \sqrt{\frac{h^2}{2m} \cdot k \cdot T} \cdot \left[\left(1 + \frac{\omega x}{2} \right) - L \cdot \frac{N}{V} \cdot 4 \cdot (\sqrt{2} - 1) \cdot \left(\frac{\pi \cdot \frac{h^2}{2m}}{h \cdot T} \right)^{3/2} \cdot x \cdot \left(1 + \frac{\omega x}{16} \cdot \frac{5(\sqrt{2} - 3)}{(2 - \sqrt{2})} \right) \right]$$

mit x gemäß (116).

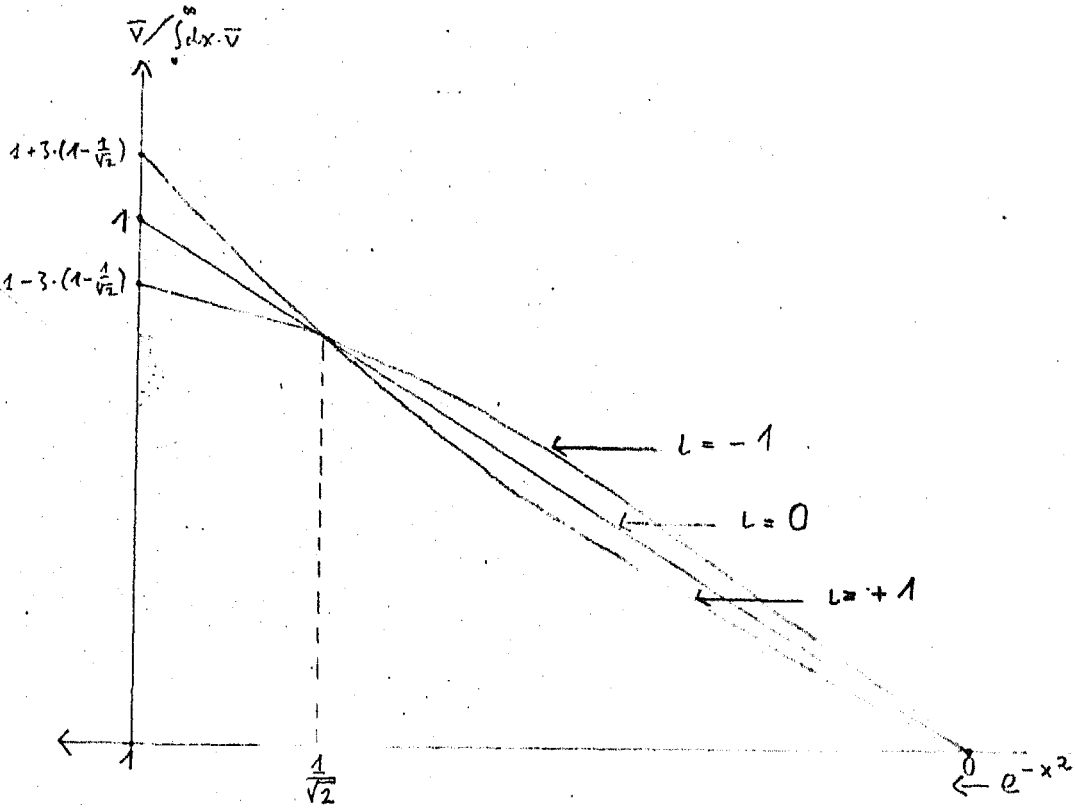
Der erste Term in (114, 117, 118) ist jeweils der für die Boltzmannstatistik bekannte Ausdruck (s. Abschnitt a)). Für Fermionensysteme ist die innere Energie und die Oberflächenspannung größer, die spezifische Wärme kleiner als für Boltzmannsysteme. Für Bosonensysteme verhält es sich umgekehrt.

Diese Abweichungen lassen sich qualitativ erläutern:

Für alle drei Statistiken ist die Energieniveaudichte, der Träger der gestaltabhängigen Korrekturen, gleich (s. (3)); - verschieden, wenn auch ähnlich, sind die Besetzungszahldichten als Funktion der Eigenwertenergie λ , $v(\lambda, T, V)$ (s. (5)).

Für ein System vorgegebener Teilchenzahl N und Temperatur T hat bei schwacher Entartung für Fermistatistik die Besetzungszahldichte als Funktion der Einteilchenenergie λ einen flacheren Verlauf als diejenige für Maxwell-Boltzmann-Systeme. Sie beginnt bei kleinen λ tiefer als diese. Für Bose-Einstein-Statistik gilt das Umgekehrte. Einen qualitativen Überblick gibt Zeichnung 1.

Die quantenmechanisch bedingte Oberflächenspannung ist aber nach W.J.Swiatecki⁵ (s. auch ^{8,9}) eine Folge der Tatsache, daß die höher energetischen Wellenfunktionen $\psi_n(\vec{x})$ stärkere Krümmungen besitzen und daher in der Oberflächenrandzone trotz der für alle Wellenfunktionen zu fordernden Randbedingung $\psi_n(\vec{x})=0$ einen größeren Beitrag liefern, als diejenigen zu Eigenwerten niedrigerer Energie. Wie aus Zeichnung 1 zu ersehen, ist dieses Mischungsverhältnis höher- zu niederenergetischer Wellenfunktionen trotz gleicher Temperatur und Entartung für Fermionen größer als für Boltzonen, und für diese wiederum größer als für Bosonen. In gleicher Weise sollten sich die Oberflächenspannungen verhalten, Und gerade das ist die Aussage der Gleichung (118).



Zeichnung 1:

Mittlere Besetzungszahldichte für ein System der Teilchenzahl N und der Temperatur T bei schwacher Entartung ($\beta \ll 1$)
 Bose-Einstein-Statistik: $l = +1$, Boltzmann-Maxwell-Statistik: $l = 0$, Fermi-Dirac-Statistik: $l = -1$. Vereinfachende Annahme für die Zeichnung: konstante mittlere Eigenwertdichte $\bar{\xi}(\lambda) = \text{const.}$

D Zusammenfassung

Für ein System von N miteinander nicht wechselwirkenden Teilchen oder Zuständen, deren Wellenfunktionen $\psi_n(\vec{x})$ der Randbedingung $\psi_n(\vec{x}) = 0$ für $\vec{x} \in \mathcal{W}$ gehorchen sollen, (\mathcal{W} sei dabei die Oberfläche eines geschlossenen Hohlraumes \mathcal{W} beliebiger Gestalt), ist von verschiedenen Autoren eine halbklassische Eigenwertdichteformel angegeben worden. Diese hängt nur linear über die Integrale von V , W und L über \mathcal{W} (Volumen, Oberflächeninhalt und totale Krümmung von \mathcal{W}) von der Gestalt \mathcal{W} des Hohlraumes ab. Während von H. Weyl mathematisch bewiesen werden konnte, daß der führende Volumenterm im Gebiet großer Eigenwerte alle folgenden Terme überwiegt, konnte für den Oberflächenterm eine gleichartige Vermutung bisher nur numerisch begründet werden.

Von dieser halbklassischen Eigenwertdichteformel ausgehend, werden die thermodynamischen Relationen des idealen Gases aufgebaut und einige Größen, innere Energie, spezifische Wärme und vor allem die Oberflächenspannung für die Grenzfälle starker, ein Gebiet mittlerer und schwacher Entartung explizit berechnet, und zwar sowohl für Fermi-Dirac- als auch Bose-Einstein-Statistik, als auch für ihren klassischen Grenzfall, die Boltzmann-Maxwell-Statistik. (s. Diagramm) Ausgenommen wird nur der Spezialfall der Einsteinkondensation, weil hier die (nur im Gebiet großer Eigenwerte gültige) halbklassische Eigenwertdichteformel nicht angewendet werden darf.

Die in dieser Arbeit untersuchten quantenmechanisch bedingten Oberflächeneffekte idealer Quantengase sind experimentell bisher wenig untersucht worden; für Molekulgase sind sie verschwindend klein. Die experimentell beobachtete Oberflächenspannung stabiler Atomkerne wird von dem Modell, das den Kern als ideales, entartetes Fermigas der Temperatur T beschreibt, im wesentlichen richtig wiedergegeben. Mit dem in Kap. 3b) abgeleiteten Ausdruck für die Oberflächenspannung stark entarteter idealer Fermigase endlicher Temperatur kann eine Voraussage über die Oberflächenspannung angeregter Atomkerne gemacht werden.

DIAGRAMM

| Statistik: | | $\zeta \ll 1$ | $\zeta \approx 1$ | $\zeta \gg 1$ |
|------------|----------|-----------------|--------------------------|-------------------------|
| Bose | $L = +1$ | schwache | Einstein-Kondensation | |
| Boltzmann | $L = 0$ | Entartung | s. Abschnitt a) | |
| Fermi | $L = -1$ | s. Abschnitt d) | mittlere Entartung s. c) | starke Entartung, s. b) |

Herrn Prof. Dr. G. Süßmann sage ich meinen herzlichen Dank für seine stete Förderung, Geduld und zahlreiche fruchtbare Diskussionen.

Herbert Hilf.

Gliederung :

Seite

| | |
|---|-----|
| 1. Die Integrale $K_\nu(\zeta)$ | 2 |
| 2. Die Integrale $V_\zeta(\alpha, \nu)$ | 3 |
| 3. Die Integrale $J_\nu(\zeta)$ für $\nu = 0$ | 3 |
| 4. Die Integrale $J_\nu(\zeta)$ für $\nu = -1, \zeta \gg 1$ | 4 |
| a) Das Integral $B(\zeta)$ | 5 |
| 1. Majorantenabschätzung | 5 |
| 2. SOMMERFELD-Näherung | 5 |
| 3. exakte Berechnung | 6 |
| b) Das Integral $R(\zeta)$ | 7 |
| 1. Entwicklung des Zählers | 7-8 |

Einschub 1: Grundintegrale und zugehörige Funktionen

| | |
|--|-------|
| 1. Die Gamma-Funktion | 9 |
| 2. Die Zeta-Funktion | 9 |
| 3. Der Eulersche Dilogarithmus | 10-11 |
| 4. Die Funktionen $F_\mu(x)$ | 11 |
| 5. Das Grundintegral $G_\nu(\alpha)$ | 11-12 |
| 2. Das Integral $R(\zeta)$ | 13-14 |
| 3. Abschätzung des Integrals \mathcal{Q} | 14-19 |
| c) Zusammenfassung | 20 |
| 5. Die Integrale $J_\nu(\zeta)$ für | |
| a) $\zeta \approx 1, \nu = -1$ | 21-23 |
| b) $\zeta \ll 1, \nu = \pm 1$ | 24-25 |

Anhang 1 : Die Integrale $J_n(\zeta)$
Eigenschaften, verwandte Integrale
und Reihenentwicklungen

In diesem Anhang leiten wir eine Reihe von Eigenschaften der Integrale

$$(1) \quad J_n(\zeta) := \int_0^{\infty} dx \cdot x^n \cdot \bar{v}(\zeta, x)$$

ab, die wir in dieser Arbeit benötigen. Es ist

$$(2) \quad \bar{v}(\zeta, x) = (\zeta^{-\nu} e^{x^2} - \epsilon)^{-1} \quad \text{mit } \nu = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \quad \text{für } \begin{cases} \text{Bose-Einstein} \\ \text{Boltzmann-Maxwell} \\ \text{Fermi-Dirac} \end{cases} \text{-Gase}$$

und $\zeta := \exp(M/(kT))$; $x^2 := \epsilon/\tau = \epsilon/(kT)$. ν sei positiv und ganz- bzw. halbzahlig oder gleich Null.

Für Bosonen ist $\nu = +1$, $0 \leq \bar{\nu} \leq \infty$ und daraus $0 \leq \zeta \leq 1$,

für Boltzonen ist $\nu = 0$, $0 \leq \bar{\nu} \leq \infty$ und daraus $0 \leq \zeta \leq \infty$,

für Fermionen ist $\nu = -1$, $0 \leq \bar{\nu} \leq 1$ und daraus $0 \leq \zeta \leq \infty$.

Damit ist der "physikalische Bereich" für ζ angegeben, für den allein die folgenden Formeln gelten sollen.

Verweise im Anhang beziehen sich ausschließlich auf Gleichungen des Anhangs selbst. Im Hauptteil der Arbeit werden diese Gleichungen mit vorgesetztem A zitiert.

1. Zusammenhang der $J_n(\zeta)$ mit den Integralen $K_n(\zeta)$.

In der Literatur wird mit $K_n(\zeta)$ das Integral

$$(3) \quad K_n(\zeta) := \int_0^{\infty} dx \cdot x^n \cdot \log(1 - \nu \zeta e^{-x^2}), \quad \nu = \pm 1,$$

bezeichnet. Es läßt sich auf $J_{n+2}(\zeta)$ zurückführen. Es sei $\nu = \pm 1$; $\zeta > 0$, aber fest. Für $\zeta = 0$ bzw. für $\nu = 0$ ist das Integral trivial.

Zunächst ist $(1 - \nu \zeta e^{-x^2}) = \zeta \cdot e^{-x^2} \bar{\nu}^{-1}$, folglich

$$(4) \quad K_n(\zeta) = \int_0^{\infty} dx \cdot x^n \cdot \log(\zeta \cdot e^{-x^2} \bar{\nu}^{-1}).$$

Partielle Integration ergibt

$$K_n(\zeta) = \left[\frac{1}{n+1} \cdot y^{n+1} \cdot \log(\zeta \cdot e^{-y^2} \bar{\nu}^{-1}) \right]_{y=0}^{y=\infty} - \int_0^{\infty} dx \cdot x^{n+2} \cdot \bar{\nu} \cdot \frac{2\nu}{n+1}.$$

Der Klammer-Ausdruck läßt sich entwickeln in

$$\frac{1}{n+1} \cdot \left[y^{n+1} \cdot \log(1 - \nu \zeta \cdot e^{-y^2}) \right]_{y=0}^{y=\infty} = \frac{1}{n+1} \left\{ \left[y^{n+1} \cdot (-\nu \zeta \cdot e^{-y^2}) \right]_{y=0}^{\infty} - \left[y^{n+1} \cdot \log(1 - \nu \zeta \cdot e^{-y^2}) \right]_{y=0}^{\infty} \right\} = 0,$$

und ist also gleich Null wegen $\lim_{y \rightarrow \infty} y^{n+1} \cdot e^{-y^2} = 0$ und $\lim_{y \rightarrow 0} y^{n+1} \cdot \log(1 - \nu \zeta) = 0$, da ζ in dem oben angegebenen physikalischen Bereich liegen soll. Damit haben wir

$$(5) \quad K_n(\zeta) = - \frac{2\nu}{n+1} \cdot J_{n+2}(\zeta) \quad ; \quad \nu = \pm 1.$$

Wir leiten nun $K_n(\zeta)$ nach ζ ab und erhalten die Relation

$$(6) \quad K_n'(\zeta) := \frac{\partial K_n(\zeta)}{\partial \zeta} = -\nu \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot J_n(\zeta).$$

Zusammen mit (5) ergibt sich die Rekursionsformel

$$(7) \quad J_{n+2}'(\zeta) = \frac{n+1}{2} \cdot \frac{1}{\zeta} \cdot J_n(\zeta),$$

da hier $\nu^2 = 1$ ist. Mit

$$(8) \quad \bar{\nu}' = \frac{1}{\zeta^2} \cdot e^{x^2} \cdot \bar{\nu}^2$$

haben wir noch die nicht rekurrierbaren Ableitungen

$$(9) \quad J_1' = \int_0^{\infty} dx \cdot x \cdot \frac{1}{\zeta^2} \cdot e^{x^2} \cdot \bar{\nu}^2 \quad ; \quad J_0' = \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{1}{\zeta^2} \cdot e^{x^2} \cdot \bar{\nu}^2.$$

2. Zusammenhang der $J_n(z)$ mit den Integralen $V_g(\alpha, \nu)$.

Die Integrale $V_g(\alpha, \nu)$ sind definiert als

$$(10) \quad V_g(\alpha, \nu) := \frac{1}{g!} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot x^g \cdot (e^{-x+\alpha} - \nu)^{-1}, \quad \nu = \pm 1.$$

Es sei $e^{\alpha} := 1/\zeta$, mit dem physikalischen Wertebereich $\zeta: [0, <1, =1, >1, =\infty)$ bzw. $\alpha: (-\infty, >0, =0, >-\infty, =-\infty)$ sowie $n = 2g+1 = 0, 1, 2, 3, 4$. Mit der Substitution $x := \sqrt{z}$ geht (10) dann über in

$$(11) \quad V_g(-\log \zeta, \nu) = \frac{2}{g!} \cdot J_{2g+1}(z),$$

bzw.

$$(11a) \quad J_n(z) = \left(\frac{n-1}{2}\right)! \cdot \frac{1}{2} \cdot V_{\frac{n-1}{2}}(-\log \zeta, \nu).$$

3. $J_n(z)$ für $\nu = 0$ (Boltzmann-Statistik).

Für den Fall $\nu = 0$ erhalten wir aus (1) und (2)

$$J_n(z) = z \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot x^n \cdot e^{-x^2} = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \int_0^{\infty} dy \cdot e^{-y} \cdot y^{(n-1)/2}.$$

Letzteres ist die Integraldefinition der Γ -Funktion, folglich

$$(12) \quad J_n(z) = \frac{1}{2} \cdot z \cdot \left(\frac{n-1}{2}\right)!,$$

oder ausgeschrieben für $n = 0, 1, 2, 3, 4$:

| $\nu=0$ | $n=0$ | 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------------------|--------------|---------------|-------------------------|---------------|-------------------------|
| $\frac{1}{2} \cdot J_n(z)$ | $\sqrt{\pi}$ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{1}{2}\sqrt{\pi}$ | $\frac{1}{2}$ | $\frac{3}{4}\sqrt{\pi}$ |

Ferner ist $J_1'(z) = \frac{1}{2}$ und $J_0'(z) = \sqrt{\pi}$.

4. $J_n(\zeta)$ für $\zeta = -1$ und $\zeta \gg 1$,

(Fermi-Statistik mit starker Entartung).

Anstelle von $J_n(\zeta)$ berechnen wir $V_g(\alpha, -1) = V_g(\alpha)$ mit $g = \frac{n-1}{2}$ und $\alpha := -\log \zeta$; (s. Abschnitt 2). Es ist also

$$(13) \quad V_g(\alpha) = \frac{1}{g!} \cdot \int_0^{\infty} dz \cdot z^g \cdot (e^{z-|\alpha|} + 1)^{-1}, \quad g = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; \quad \alpha < 0, |\alpha| \gg 1,$$

zu lösen. Wir beschränken uns auf $|\alpha| > g$. Dann liegt das Maximum $f(z_0)$ des Integranden $f(z)$ links von $|\alpha|$: $z_0 < |\alpha|$; für $g = 0$ oder $-\frac{1}{2}$ ist sogar $z_0 = 0$.

Wir schließen uns in der Methode an A. SOMMERFELD^a an, spalten also das Integral (13) auf in zwei Teilintegrale, $\int_0^{\infty} = \int_0^{|\alpha|} + \int_{|\alpha|}^{\infty}$. Aus dem Integral $\int_0^{|\alpha|}$ wird mit Hilfe der Identität $(e^x + 1)^{-1} = 1 - (e^{-x} + 1)^{-1}$ der Hauptterm $|\alpha|^{g+1} / (g+1)$ herausgezogen, der sogar allein übrig bleibt, falls $\alpha = -\infty$:

$$(14) \quad g! \cdot V_g(\alpha) = |\alpha|^{g+1} / (g+1) - \int_0^{|\alpha|} dz \cdot z^g \cdot (e^{|\alpha|-z} + 1)^{-1} + \int_{|\alpha|}^{\infty} dz \cdot z^g \cdot (e^{z-|\alpha|} + 1)^{-1}.$$

Substituieren wir im $\int_0^{|\alpha|}$ -Integral $y := 1 - z/|\alpha|$ und im $\int_{|\alpha|}^{\infty}$ -Integral $y := -1 + z/|\alpha|$, so erhalten wir

$$(15) \quad g! \cdot V_g(\alpha) \cdot \frac{1}{|\alpha|^{g+1}} - \frac{1}{(g+1)} = \int_0^1 dy \cdot \left\{ (1+y)^g - (1-y)^g \right\} \cdot (e^{|\alpha| \cdot y} + 1)^{-1} + \int_{-1}^0 dy \cdot (1+y)^g \cdot (e^{|\alpha| \cdot y} + 1)^{-1} =: A + B.$$

Das Integral B ist asymptotisch klein für $\alpha \ll -1$. Wir behandeln es im folgenden Abschnitt 4a). Das Integral A wird dann in 4b) berechnet. Die Ergebnisse schließlich sind in 4c) zusammengefaßt und für $\alpha \ll -1$ vereinfacht (Näherung in $1/|\alpha|$).

^aA. Sommerfeld, Z.Phys. 47, 1; (1928).

a) Das Integral $B(\alpha, s) = \int_0^{\infty} dy \cdot (1+y)^s \cdot (|\alpha|y+1)^{-1}$

Im ganzen Integrationsbereich ist $|\alpha| \cdot y \gg 1$ auf Grund der Voraussetzung $\alpha \ll -1$. Wir entwickeln den Nenner in eine Reihe nach Potenzen von $e^{-|\alpha|y}$

$$(16a) \quad B(\alpha, s) = \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \int_0^{\infty} (1+y)^s \cdot e^{-|\alpha| \cdot (v+1) \cdot y} dy$$

Mit $z := (y-1)$ folgt

$$B(\alpha, s) = \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot e^{-|\alpha| \cdot (v+1)} \cdot \int_{-1}^{\infty} (1+z)^s \cdot e^{-|\alpha| \cdot (v+1) \cdot z} dz,$$

und nach der Substitution $y := z \cdot |\alpha| \cdot (v+1)$ schließlich

$$(16) \quad B(\alpha, s) = \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot e^{-|\alpha| \cdot (v+1)} \cdot \frac{1}{|\alpha| \cdot (v+1)} \cdot \int_0^{\infty} dy \cdot \left(2 + \frac{y}{|\alpha| \cdot (v+1)}\right)^s \cdot e^{-y}$$

In dieser Form läßt sich das Integral B behandeln. Zunächst geben wir zwei einfache Abschätzungen:

1. Majoranten-Abschätzung.

Im ganzen Integrationsbereich ist $(1+y)^2$ eine Majorante zu $(1+y)^s$ für $s < 2$, also auch $B(2) \geq B(s)$. Nach (16) ist

$$B(\alpha, 2) = \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \frac{e^{-|\alpha| \cdot (v+1)}}{|\alpha| \cdot (v+1)} \cdot \int_0^{\infty} dy \cdot \left(2 + \frac{y}{|\alpha| \cdot (v+1)}\right)^2 \cdot e^{-y},$$

und wegen

$$\Gamma(v+1) = v! = \int_0^{\infty} dy \cdot e^{-y} \cdot y^v$$

folgt

$$B(\alpha, 2) = \frac{e^{-|\alpha|}}{|\alpha|} \cdot \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \frac{e^{-|\alpha| \cdot v}}{(v+1)} \cdot \left(4 + \frac{4}{|\alpha| \cdot (v+1)} + \frac{2}{|\alpha|^2 \cdot (v+1)^2}\right);$$

$$(17) \quad B(\alpha, s) \geq B(\alpha, 2) = O\left(\frac{e^{-|\alpha|}}{|\alpha|}\right) \quad \text{für } s = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}; \quad \alpha \ll -1.$$

2. Näherung nach A. SOMMERFELD

Der Integrand von B in (16) ist für $y > |\alpha|$ sehr klein auf Grund des Faktors e^{-y} . Für $y < |\alpha|$ ist der Summand $y / (|\alpha| \cdot (v+1))$ für alle v klein gegen 2; vernachlässigt man ihn überhaupt, so wird

$$(18) \quad B(\alpha, s) \cong 2^s \cdot \frac{e^{-|\alpha|}}{|\alpha|} \cdot \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \frac{e^{-|\alpha| \cdot v}}{(v+1)} = O\left(\frac{e^{-|\alpha|}}{|\alpha|}\right).$$

3. Berechnung von B.

Substituieren wir in (16a) $z := y+1$ und anschließend $x := |a|(y+1) \cdot z$, so erhalten wir

$$B(\alpha, s) = \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot e^{+|a|(v+1)} \cdot (|a|(v+1))^{-(s+1)} \cdot \int_{2 \cdot |a|(v+1)}^{\infty} x^s \cdot e^{-x} dx.$$

Das Integral ist aber die Integraldefinition der Whittaker-Funktion^b, folglich

$$(19) \quad B(\alpha, s) = 2^{s/2} \cdot |a|^{-(1+s/2)} \cdot \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot (v+1)^{-(1+s/2)} \cdot W_{\frac{s}{2}, \frac{s+1}{2}}(2 \cdot |a|(v+1)).$$

Mit der bekannten^b Reihenentwicklung der Whittaker-Funktion für grosses Argument erhalten wir schließlich

$$(20) \quad B(\alpha, s) = 2^s \cdot \frac{e^{-|a|}}{|a|} \cdot \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \frac{e^{-|a| \cdot v}}{(v+1)} \cdot \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2^k \cdot k! \cdot |a|^{k/2} \cdot (v+1)^k} \cdot \prod_{\mu=1}^k (s + \mu - \mu^2) \right\}.$$

(18) ist also in der Tat die erste Näherung von $B(\alpha, s)$. In zweiter Näherung wird

$$(21) \quad B(\alpha, s) \cong 2^s \cdot \frac{e^{-|a|}}{|a|} \cdot (1 + s/(2 \cdot |a|)).$$

(18) ist daher (nur) in erster Näherung korrekt.

Speziell für $s=(0,1)$ ist das Produkt in (20) gleich Null, falls $k \geq (1,2)$, damit bricht die k -Reihe ab und es bleibt

$$B(\alpha, 0) = \frac{e^{-|a|}}{|a|} \cdot \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \frac{e^{-|a| \cdot v}}{(v+1)} = \frac{1}{|a|} \cdot F_0(|a|),$$

$$B(\alpha, 1) = 2 \cdot \frac{e^{-|a|}}{|a|} \cdot \sum_{v=0}^{\infty} (-)^v \cdot \frac{e^{-|a| \cdot v}}{(v+1)} \cdot \left(1 + \frac{1}{2 \cdot |a| \cdot (v+1)} \right) = \frac{2}{|a|} \cdot \left(F_0(|a|) + \frac{1}{2 \cdot |a|} \cdot F_1(|a|) \right).$$

Die Funktionen $F_{\mu}(x)$ sind in (46) definiert.

^bI.H.Ryshik, I.S.Gradstein, "Summen-, Produkt- und Integral-Tafeln"; VEB, Deutscher Verlag d. Wiss., Berlin, (1957). :7.324, 7.327

b) Das Integral $R(\alpha, \beta) = \int_0^1 dy \cdot \frac{(1+y)^\beta - (1-y)^\beta}{(1+e^{|\alpha|y})}$

Es ist $R(\alpha, 0) = 0$. Das einfache Integral $R(\alpha, 1)$ berechnen wir in (53). Hier beschränken wir uns auf $\beta = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$.

Die (2. te, 1. te, 0. te) Ableitung des Zählers des Integranden für $\beta = (\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ haben bei $y=1$ einen Pol (wie $1/\sqrt{x}$ für $x \rightarrow 0$). Diese (, nicht jedoch höhere) Ableitungen sind noch integrierbar. Der Zähler selbst ist antisymmetrisch bezüglich y . Die Taylor-Entwicklung

$$(22) \quad f_\beta(y) = (1+y)^\beta - (1-y)^\beta = 2 \cdot \sum_{v=0}^{\infty} y^{2v+1} \cdot \binom{\beta}{2v+1} = \sum_{v=0}^{\infty} y^{2v+1} \cdot c_v(\beta), \quad (\text{Beachte } \beta \neq \beta - (\beta - 1)!) ,$$

enthält nur ungerade Potenzen von y und ist divergent für $y=1$.

Der Nenner des Integranden hat für $y=0$ den Wert 2 und für $y=1$ mit $|\alpha| \gg 1$ den Wert $e^{|\alpha|}$. Er verringert den Beitrag des Poles des Zählers um den Faktor $e^{-|\alpha|}$. Das Maximum des Integranden ist in der Nähe von $y=0$ zu suchen; eine Ausnahme bildet der Fall $\beta = -\frac{1}{2}$, jedoch ist selbst dafür der Beitrag des Intervalles $[(1-\epsilon_1, 1)$ mit $\epsilon_1 \ll 1]$ zum Integral klein gegen $\sqrt{\epsilon_1/|\alpha|}$.

Die Integrale ($J_4, J_2; J_3, J_1; J_2, J_0$) benötigen wir in (3. ter; 2. ter; 1. ter) Näherung. Daher ist für $\beta = (\frac{3}{2}; \frac{1}{2}; -\frac{1}{2})$ das Integral R höchstens in (3. ter; 3. ter; 1. ter) Näherung zu berechnen (, falls in (15) die herausgezogenen Terme nicht asymptotisch größer sind).

Die Methode von A. SOMMERFELD : " Entwicklung des Zählers des Integranden bei $y=0$ und Vertauschung von \sum und \int " liefert nach den oben genannten eine bestenfalls semikonvergente Reihe; deren korrekter Berechnung und Untersuchung sind die folgenden Abschnitte gewidmet.

1. Entwicklung des Zählers $f_\beta(y)$.

Die Reihenentwicklung (22) für $f_\beta(y)$ ist absolut konvergent für $|y| < 1$ (, sowie für $y=1$, falls $\beta = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$) jedoch in $[0, 1]$ (für $y=1$) nicht gleichmäßig konvergent.

Die Koeffizienten $c_v(\beta)$ lassen sich mit $\beta = (2u-1)/2$; $u=0, 1, 2, \dots$ umformen wegen $\binom{\beta}{v} = \frac{\beta!}{v!(\beta-v)!}$ zu

$$(23) \quad c_v(u) = \frac{2^{-2v}}{(2v+1)!} \cdot \prod_{\mu=0}^{u-1} (2u-1-2\mu) .$$

Eine andere Form erhalten wir mit der Abkürzung $[a] := \Theta(a) \cdot a$ durch Umformen des Produktes, beachtend, daß $(2u+1)!! = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2u+1)$, $(2u+1)! / (2^u u!)$ und $1! = 1 \cdot 0! = 1$,

$$C_v(u) = \frac{2^{-2v}}{(2v+1)!} \cdot \frac{(-1)^{[2v-u+1]} \cdot [4v-2u+1]! \cdot [2u-1]! \cdot [u-2v-2]! \cdot 2^{[u-2v-2]}}{[2v-u]! \cdot 2^{[2v-u]} \cdot [u-1]! \cdot 2^{[u-1]} \cdot [2u-4v-3]!}$$

Für $v \neq 0$ und $w = 0, 1, 2$ vereinfacht sich dieser Ausdruck zu

$$(24) \quad C_v(0, 1, 2) = \frac{2^{-2v}}{(2v+1)!} \cdot \frac{(-1)^{[2v-u+1]} \cdot (4v-2u+1)! \cdot [2u-1]!}{(2v-u)! \cdot 2^{2v-u} \cdot [u-1]! \cdot 2^{[u-1]}}$$

d.h.

$$(25) \quad \left\{ \begin{array}{l} C_v(0) = - \frac{2^{-4v} \cdot (4v+1)!}{(2v+1)! \cdot (2v)!} , \quad C_0(0) = -1 , \\ C_v(1) = + \frac{2^{-4v+1} \cdot (4v-1)!}{(2v+1)! \cdot (2v-1)!} , \quad C_0(1) = +1 , \\ C_v(2) = -3 \frac{2^{-4v+2} \cdot (4v-3)!}{(2v+1)! \cdot (2v-2)!} , \quad C_0(2) = +3 \end{array} \right. \quad v \neq 0 .$$

Einschub 1 : Grundintegrale und zugehörige Funktionen.

Dieser Einschub ist eine für uns zweckmäßige Zusammenstellung bekannter Formeln.

1. Die Gamma-Funktion $\Gamma(x+1) = x!$

$\Gamma(v+1)$ sei definiert über das Eulersche Integral

$$(26) \quad \Gamma(v+1) = v! := \int_0^{\infty} dx \cdot x^v \cdot e^{-x}$$

Die Funktionalgleichung

$$(27) \quad x! = x \cdot (x-1)!$$

liefert wegen $0! = 1! = 1$: $n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n$,

sowie für halbzahlige v wegen $(1/2)! = \sqrt{\pi}$ und (27), $n \geq 0$,

$$(28) \quad \left(\frac{2n+1}{2}\right)! = \sqrt{\pi} \cdot 2^{-2n} \cdot (2n+1)! / n! \quad ; \quad \left(\frac{1-2n}{2}\right)! = \sqrt{\pi} \cdot (-1)^{n+1} \cdot 2^{2n} \cdot n! / (2n)!$$

Aus (26) erhält man durch die Substitution $x := \lambda y^2$

$$(29) \quad \int_0^{\infty} dx \cdot x^v \cdot e^{-\lambda x^2} = \frac{1}{2} \cdot \lambda^{-\frac{v+1}{2}} \cdot \Gamma\left(\frac{v+1}{2}\right) \quad , \quad \text{falls } v > -1, \lambda > 0.$$

2. Die Zeta-Funktionen

Die ζ -Funktion sei definiert durch

$$(30) \quad \zeta(x) := \sum_{v=1}^{\infty} v^{-x}$$

und die Z-Funktion^d durch

$$(31) \quad Z(x) := \sum_{v=1}^{\infty} (-1)^{v-1} \cdot v^{-x}$$

Es gilt

$$(32) \quad Z(x) = (1 - 2^{1-x}) \cdot \zeta(x).$$

Integraldarstellungen sind

$$(33) \quad \zeta(k) = \frac{a^k}{(k-1)!} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot x^{k-1} \cdot (e^{ax} - 1)^{-1} \quad ; \quad k > -1, a > 0,$$

$$(34) \quad Z(k) = \frac{a^k}{(k-1)!} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot x^{k-1} \cdot (e^{ax} + 1)^{-1} \quad ; \quad k > -2, a > 0.$$

Für negative Argumentwerte läßt sich ζ berechnen aus

$$(35) \quad \zeta(1-x) = 2 \cdot (2\pi)^{-x} \cdot \cos \frac{\pi x}{2} \cdot (x-1)! \cdot \zeta(x) \quad , \quad x > 0.$$

^c 1. W. Gröbner, N. Hofreiter, Integraltafel, Bd. II, S. 59-64;
Wien, Springer-Verlag, (1961).

2. b.

^d Mit "Z" ist der zu "ζ" gehörige griechische Großbuchstabe

Funktionswerte auf der positiven reellen Achse:

Für geradzahlige Argumente $x = 2v$, $v = 1, 2, 3, \dots$, ist

$$(36) \quad Z(2v) = \frac{\pi^{2v}}{(2v)!} \cdot (2^{2v-1} - 1) \cdot |B_{2v}|,$$

mit den bekannten Bernoulli-Zahlen^e B_n .

Im Limes großer positiver reeller Argumentwerte werden beide Funktionen gleich Eins:

$$(37) \quad \lim_{x \rightarrow \infty} Z(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \zeta(x) = 1.$$

Für endlich große n gilt

$$(38) \quad \zeta(n+1) \approx \frac{1}{2} \cdot (1 + \zeta(n)), \quad v \gg 1,$$

und ebenso für $Z(n)$. Dabei geht im Limes $n \rightarrow \infty$ $\zeta(n)$ von oben, $Z(n)$ dagegen von unten gegen Eins.

$\zeta(x)$ hat für $x > 0$ einen einzigen Pol (bei $x = 1$). Die Z -Funktion jedoch ist auf der ganzen positiven reellen Achse beschränkt und sehr langsam veränderlich. Dazu einige numerische Werte:

| | $x = 0$ | 0.5 | 1 | 1.5 | 2 | 2.5 | 3 |
|-----------------|---------|---------------|--------------|---------------|--------------|--------------|--------------|
| (39) $\zeta(x)$ | -0.5 | $-1.460\dots$ | ∞ | $+2.612\dots$ | $1.644\dots$ | $1.301\dots$ | $1.050\dots$ |
| $Z(x)$ | $+0.5$ | $+0.606\dots$ | $0.693\dots$ | $0.765\dots$ | $0.822\dots$ | $0.869\dots$ | $0.898\dots$ |

mit $Z(0) = -\zeta(0) = 1/2$; $Z(1) = \ln 2$; $Z(2) = 1/2 \cdot \zeta(2) = \pi^2/12$.

3. Der Eulersche Dilogarithmus^f $\mathcal{L}_2(x)$.

$\mathcal{L}_2(x)$ ist der Spezialfall $\mu = 2$ der " μ -Logarithmen"

$$(40) \quad \mathcal{L}_\mu(x) := \sum_{v=1}^{\infty} x^v \cdot v^{-\mu},$$

also

$$(41) \quad \mathcal{L}_2(x) = \sum_{v=1}^{\infty} x^v \cdot v^{-2}.$$

Der Dilogarithmus hat die Integraldarstellung

$$(42) \quad \mathcal{L}_2(x) = \int_0^{\infty} dt \cdot \log(1-t) / t.$$

Seine Ableitungen lauten

$$(43) \quad \mathcal{L}_2'(x) = -\frac{1}{x} \cdot \ln(1-x); \quad \mathcal{L}_2''(x) = \frac{1}{x^2} \cdot \left(\frac{x}{1-x} + \ln(1-x) \right).$$

Im Intervall $-1 \leq x \leq +1$ ist $\mathcal{L}_2(x)$ eine schwach veränderliche monoton wachsende Funktion, ebenso \mathcal{L}_2' und \mathcal{L}_2'' in $-1 \leq x \leq 0$.

^eDie Beträge der Bernoulli-Zahlen B_{2n} können über (33) und (31) berechnet werden. Ferner ist $B_{2n} = (-1)^{n+1} \cdot |B_{2n}|$, $B_{2n+1} = 0$ für $n \neq 0$; $B_0 = 1$; $B_1 = -1/2$; $B_2 = 1/6$.

Für $\varepsilon > 0$, $|\varepsilon| \ll 1$ ist

$$(44) \quad \mathcal{L}_2(-1 + \varepsilon) \approx -\frac{\pi^2}{12} + \varepsilon \cdot \ln 2; \quad \mathcal{L}_2(-\varepsilon) \approx -\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{4} \dots$$

Einige numerische Werte:

| | $x = -1$ | -0.5 | 0 | 0.5 | 1 |
|-------------------------|-----------|-----------|-----|-----------|-----------|
| (45) $\mathcal{L}_2(x)$ | - 0.822.. | - 0.447.. | 0 | + 0.580.. | + 1.644.. |
| $\mathcal{L}_2'(x)$ | + 0.693.. | + 0.810.. | 1 | + 1.386.. | ∞ |
| $\mathcal{L}_2''(x)$ | + 0.193.. | + 0.288.. | 0.5 | + 1.227.. | ∞ |

mit $\mathcal{L}_2(-1) = -\pi^2/12$; $\mathcal{L}_2(0) = 0$; $\mathcal{L}_2'(1/2) = \pi^2/12 - \ln^2 2$; $\mathcal{L}_2'(1) = \pi^2/6$; $\mathcal{L}_2'(1) = \ln 2$;
 $\mathcal{L}_2''(0) = 1$; $\mathcal{L}_2''(-1) = \ln 2 - \pi^2$; $\mathcal{L}_2''(0) = -1/2$.

4. Die Funktionen $F_\mu(x)$.

$F_\mu(x)$ ist definiert als das Negative des $(\mu+1)$ -Logarithmus für das Argument $y := -e^{-x}$:

$$(46) \quad F_\mu(x) := -\mathcal{L}_{\mu+1}(-e^{-x}) = \sum_{v=1}^{\infty} (-1)^{v-1} \cdot e^{-vx} / v^{\mu+1};$$

es gilt

$$(47) \quad F_\mu(x) = \frac{1}{\mu!} \cdot \int_0^{\infty} dy \cdot y^\mu \cdot (1 + e^{x+y})^{-1}, \quad x > 0.$$

Spezialfälle sind

$$(48) \quad F_0(x) = \ln(1 + e^{-x}) = -\sum_{v=1}^{\infty} (-e^{-x})^v / v,$$

$$F_1(x) = -\mathcal{L}_2(-e^{-x}) = -\sum_{v=1}^{\infty} (-e^{-x})^v / v^2,$$

sowie

$$(49) \quad F_\mu(0) = Z(\mu+1).$$

5. Das Grundintegral $G_\mu(a) := \int_a^{\infty} dx \cdot x^\mu \cdot (1 + e^x)^{-1}$ mit $a > 1$.

Im ganzen Integrationsbereich $a \leq x < \infty$ ist $e^{-x} < 1$ und daher ist die Entwicklung

$$(1 + e^{-x})^{-1} = \sum_{v=0}^{\infty} (-1)^v \cdot e^{-vx}, \quad x \geq a > 1$$

gleichmäßig konvergent. Einsetzen in den Integranden und Vertauschung von \sum und \int ergibt

$$G_\mu(a) = \sum_{v=0}^{\infty} (-1)^v \cdot \int_a^{\infty} dx \cdot x^\mu \cdot e^{-x(v+1)}$$

Die Substitution $z := x - a$, binomische Entwicklung von $(z+a)^\mu$ und anschließende Substitution $b := z \cdot (v+1)$ liefert

^f A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi, Higher transcendental functions; Bateman Manuscript Project; Cal. Inst. of Techn., Mc. Graw-Hill, (1955);

A. Münster, Handbuch der Physik, Bd. III/2, ed. S. Flügge, Sprin-

$$G_n(a) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \binom{\nu}{\mu} e^{-a(\nu+1)} \sum_{\mu=0}^{\nu} a^{\nu-\mu} \binom{\nu}{\mu} (\nu+1)^{-(\mu+1)} \int_0^{\infty} dx \cdot \frac{1}{b} x^{\mu} e^{-bx}$$

Das Integral ist gerade das Euler-Integral für $\mu!$. Nach Vertauschung der Summen, Umsummierung $\nu+1 \rightarrow \nu$ und wegen (46) erhalten wir

$$(50) \quad G_n(a) = \sum_{\mu=0}^n a^{n-\mu} \frac{n!}{(n-\mu)!} \cdot F_{\mu}(a)$$

2. Das Integral $H(\alpha, s)$.

In

$$H(\alpha, s) = \int_0^1 dy \cdot f_s(y) \cdot (e^{|\alpha|y} + 1)^{-1} \quad \alpha < -1$$

setzen wir für $f_s(y)$ die Reihenentwicklung (22) ein; da diese im Intervall $[0, 1]$ nicht gleichmäßig konvergent ist, ziehen wir nur die ersten m Glieder der Summe vor das Integral und erhalten mit $s = (2n-1)/2$, $n = 0, 1, 2$; $f_s(y) = f_{(2n-1)/2}$:

$$(51) \quad H(\alpha, n) = \sum_{v=0}^m c_v(n) \cdot \int_0^1 dy \cdot y^{2v+1} \cdot (e^{|\alpha|y} + 1)^{-1} + \mathcal{R}(\alpha, n; m)$$

mit

$$(52) \quad \mathcal{R}(\alpha, n; m) := \int_0^1 dy \cdot R(y, n; m) \cdot (e^{|\alpha|y} + 1)^{-1}, \quad R(y, n; m) := f_{(2n-1)/2}(y) - \sum_{v=0}^m c_v(n) y^{2v}$$

Das Integral \mathcal{R} schätzen wir im Abschnitt 3 ab. Die übrigen in (51) auftretenden Integrale lassen sich durch die Substitution $x := |\alpha| \cdot y$ zurückführen auf die im Einschub (Ziffer 4 und 5) angegebenen Integraldarstellungen für $Z(x)$ und $G_n(\alpha)$:

$$\int_0^1 dy \cdot y^l \cdot (1 + e^{|\alpha|y})^{-1} = |\alpha|^{-(l+1)} \cdot \int_0^{|\alpha|} dx \cdot x^l \cdot (1 + e^x)^{-1} = |\alpha|^{-(l+1)} \cdot \left\{ \int_0^\infty dx \cdot x^l \cdot (1 + e^x)^{-1} - \int_{|\alpha|}^\infty dx \cdot x^l \cdot (1 + e^x)^{-1} \right\}$$

$$(53) \quad \int_0^1 dy \cdot y^l \cdot (1 + e^{|\alpha|y})^{-1} = |\alpha|^{-(l+1)} \cdot (l! \cdot Z(l+1) - G_l(|\alpha|))$$

Setzen wir dies in (51) ein, verwenden den in (50) für $G_l(|\alpha|)$ erhaltenen Ausdruck, summieren aber in der entstehenden Doppelsumme um nach fallenden Potenzen in $|\alpha|$, d.h. $\sum_{v=0}^m \sum_{\mu=0}^{2v+1} = \sum_{\mu=0}^{2m+1} \sum_{v=\lceil \mu/2 \rceil}^m$ mit „ $\lceil \cdot \rceil$ “ als Trunkation, so folgt das Ergebnis

$$(54) \quad H(\alpha, n) = \sum_{v=0}^m c_v(n) \cdot (2v+1)! \cdot Z(2v+2) \cdot |\alpha|^{-(2v+2)} - \sum_{\mu=0}^{2m+1} |\alpha|^{-(\mu+1)} \cdot F_\mu(|\alpha|) \cdot \sum_{v=\lceil \mu/2 \rceil}^m c_v(n) \cdot \frac{(2v+1)!}{(2v+1-\mu)!} + \mathcal{R}(\alpha, n; m)$$

und mit $c_v(n)$ aus (23) und $s = (2n-1)/2$:

$$(55) \quad H(\alpha, n) = \sum_{v=0}^m |\alpha|^{-(2v+2)} \cdot Z(2v+2) \cdot 2 \cdot \prod_{\mu=0}^{2v} (s-\mu) - \sum_{\mu=0}^{2m+1} |\alpha|^{-(\mu+1)} \cdot F_\mu(|\alpha|) \cdot \sum_{v=\lceil \mu/2 \rceil}^m 2 \cdot \prod_{\ell=0}^{2v} (s-\ell) \cdot 1/(2v+1-\mu)! + \mathcal{R}(\alpha, n; m)$$

die Funktionen $Z(x)$ und $F_\mu(|\alpha|)$ wurden in (31) bzw. (46) angegeben, und es ist $s = (2n-1)/2$. Damit ist der Ausdruck $(A - \mathcal{R})$ für alle $|\alpha| > 1$ exakt berechnet.

Für $|\alpha| \gg 1$ können wir $F(\alpha, s; \mu)$ abschätzen:

Mit $\xi = (\mu-1)/2$ folgt aus (55)

$$(56) \quad F(\alpha, s; \mu) \cong \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{\xi}{|\alpha|^{1/2}} + O(|\alpha|^{-3}) + O(e^{-|\alpha|}) + \mathcal{R}(\alpha, s; \mu),$$

denn nach (46) ist $F_{\mu}(|\alpha|) = O(e^{-|\alpha|})$ und $Z(\xi) = \pi^2/12$ (s. (39)). Ferner ist $O(e^{-|\alpha|})/O(|\alpha|^{-\nu}) = O$ für $|\alpha| \rightarrow \infty$ und endliches ν .

3. Abschätzung des Integrals

Wir schätzen nun für große $|\alpha|$ den Wert des Restintegrals

$$(52) \quad \mathcal{R}(\alpha, s; \mu) := \int_0^1 dy \cdot R(y, s; \mu) \cdot (e^{|\alpha|y} + 1)^{-1}$$

mit

$$(57) \quad R(y, s; \mu) := (1+y)^s - (1-y)^s - \sum_{v=0}^{\infty} c_v(s) \cdot y^{2v+1}$$

nach oben ab.

Der Faktor $(e^{|\alpha|y} + 1)^{-1}$ des Integranden in (52) ist für alle $y \in [0, 1]$ positiv. Daher läßt sich $\mathcal{R}(\alpha, s; \mu)$ auch dann nach oben abschätzen, wenn wir nur für $R(y, s; \mu)$ eine Majorante suchen.

Zunächst folgt aus (57)

$$(58) \quad R(0, s; \mu) = 0;$$

$$(59) \quad R(1, s; \mu) = 2^s - \sum_{v=0}^{\infty} c_v(s) \quad , \quad s = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}.$$

Für $s = -\frac{1}{2}$ hat $R(y, -\frac{1}{2}; \mu)$ bei $y=1$ einen Pol wie $(-\varepsilon^{-1/2}, \varepsilon \rightarrow 0)$.

Die Reihenentwicklung

$$(22) \quad f_s(y) := (1+y)^s - (1-y)^s = \sum_{v=0}^{\infty} c_v(s) \cdot y^{2v+1}$$

ist konvergent für $0 \leq y < 1$. Der Konvergenzradius beträgt $y_r = 1$. Für $s = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ ist $f_s(y)$ auch noch für $y=1$ konvergent⁸, jedoch nicht mehr gleichmäßig. Aus (57) folgt wegen (22)

$$(60) \quad R(y, s; \mu) = \sum_{v=\mu+1}^{\infty} c_v(s) \cdot y^{2v+1}$$

Nach (25) haben alle $c_v(s)$ für $v \geq 1$ und gegebenes s gleiches Vorzeichen. Wegen $y^a > y^{a+b}$ mit $b > 0; a > 0$ und $0 \leq y \leq 1$, kann die Summe

⁸Siehe^b, S.No. 1.110.

in (60) in der Weise majorisiert werden, daß alle y -Exponenten durch den niedrigsten auftretenden, nämlich $(2m+3)$ ersetzt werden. Wegen (22) für $y=4$ erhalten wir als gesuchte Majorante $R_{maj}(y, s; m)$ für $R(y, s; m)$ den Ausdruck $R(4, s; m) \cdot y^{-(2m+3)}$ mit

$$(61) \quad |R(y, s; m)| \leq |R(4, s; m)| \cdot y^{-(2m+3)} =: |R_{maj}(y, s; m)|, \quad s = \frac{3}{2}, \frac{1}{2},$$

wobei mit $R(4, s; m)$ der durch (59) definierte endliche Ausdruck gemeint ist. Den Fall $s = -\frac{1}{2}$ werden wir gesondert untersuchen.

Zunächst prüfen wir (61) für $(s = \frac{3}{2}, \frac{1}{2};)$ in der Nähe von $y=4$, ob $R_{maj}(y) \geq R$. Dazu entwickeln wir $R(y, s; m)$ an der Stelle $y=4$. Mit der Substitution $\varepsilon := y-4$, $|\varepsilon| < 4$, wird aus (57) nach Ordnen der Glieder mit gleichen Potenzen in ε

$$(62) \quad R(\varepsilon, s; m) = -(-\varepsilon)^s + \sum_{k=0}^{2m+1} \varepsilon^k \cdot \left\{ \binom{s}{k} \cdot 2^{s-k} - \sum_{v=\lceil k/2 \rceil}^m c_v(s) \cdot \binom{2v+1}{k} \right\} \cdot \sum_{n=2m+1}^{\infty} \varepsilon^n \cdot \binom{s}{n} \cdot 2^{s-n}$$

$$=: R_0 + R_1 \cdot \varepsilon + R_2 \cdot \varepsilon^2 + \dots - (-\varepsilon)^s.$$

Für $R_{maj}(\varepsilon, s; m)$ erhalten wir

$$(63) \quad R_{maj}(\varepsilon, s; m) = \left(2^s - \sum_{v=0}^m c_v(s) \right) \cdot \sum_{k=0}^{2m+3} \varepsilon^k \cdot \binom{2m+3}{k} =: R_{maj_0} + R_{maj_1} \cdot \varepsilon + R_{maj_2} \cdot \varepsilon^2 + \dots$$

Wir vergleichen (62) und (63) gliedweise nach Potenzen in ε . Die Koeffizienten von ε^0 stimmen überein:

$$R_0 = R_{maj_0}$$

Also ist (61) für $y=4$ bestätigt. Die Koeffizienten von ε^1 lauten:

$$(64) \quad R_1 = s \cdot 2^{s-1} - \sum_{v=0}^m c_v(s) \cdot (2v+1),$$

$$(65) \quad R_{maj_1} = (2m+3) \cdot \left(2^s - \sum_{v=0}^m c_v(s) \right).$$

Für $s = \frac{3}{2}$ verschwindet $(-\varepsilon)^s$ für $\varepsilon \rightarrow 0$ in (62) mit höherer Potenz in ε als $R_1 \cdot \varepsilon$. In erster Näherung haben wir daher anstelle von (61) für $s = \frac{3}{2}$

$$(61)_{\frac{3}{2}} \quad |R_0 + R_1 \cdot \varepsilon| \stackrel{!}{\leq} |R_0 + R_{maj_1} \cdot \varepsilon|$$

zu prüfen. Es ist $R_0 = R(4, \frac{3}{2}; m) = 2^{3/2} - 3 + \sum_{v=1}^m |c_v(\frac{3}{2})|$.

Mit (25) kann $R(4, \frac{3}{2}; m)$ für jedes m berechnet werden. Für große m geht R_0 asymptotisch gegen $(-\infty)$. Einige Werte sind in Tabelle 1 angegeben. Wegen $R_0 < 0$ ist (61)_{3/2} bestätigt, falls $R_{maj_1} \geq R_1$ ist. Aus (64) und (65) ergibt sich, $(\partial(R_{maj_1} - R_1) / \partial m) = 2 \cdot R(4, \frac{3}{2}; m)$,

$$(66)_{\frac{3}{2}} \quad \frac{1}{2} (R_{maj_1} - R_1) = m \cdot R(4, \frac{3}{2}; m) + \left[\left(\frac{9\sqrt{2}}{4} - 3 \right) + \sum_{v=2}^m |c_v(\frac{3}{2})| \cdot (v-1) \right].$$

Dieser Ausdruck ist positiv. Für $m=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$ sind die numerischen Werte in Tabelle 1 angegeben.

Für $g=1/2$ verschwindet R_1, ε für $\varepsilon \rightarrow 0$ von höherer Potenz in ε als $(-\varepsilon)^{1/2}$. In erster Näherung haben wir daher anstelle von (61)

$$(61)_{\frac{1}{2}, a, b} \quad |R_0 - \sqrt{-\varepsilon}| \stackrel{!}{\leq} |R_0|, \text{ oder genauer: } |R_0 + R_1 \cdot \varepsilon - \sqrt{-\varepsilon}| \stackrel{!}{\leq} |R_0 + R_{\text{maj } 1} \cdot \varepsilon|$$

zu prüfen. Es ist nun $R_0 = (\sqrt{2}-1) - \sum_{v=2}^{\infty} c_v(\frac{1}{2})$. Mit (25) kann $R_0 = R(1, \frac{1}{2}; m)$ für jedes m berechnet werden. Für große m geht R_0 asymptotisch gegen $(+0)$. Einige numerische Werte sind in Tabelle 2 angegeben. Wegen $R_0 > 0$ muß $\sqrt{-\varepsilon}$ kleiner sein als $2R_0$, damit (61) $_{1/2}$ gilt. Wegen $\varepsilon \rightarrow (-0)$ ist dies für gegebenes m immer erfüllbar. Der Ausdruck für $R_{\text{maj } 1}$ lautet, ($\partial(R_{\text{maj } 1} - R_1)/\partial m = 2 \cdot R_0$),

$$(66)_{\frac{1}{2}} \quad \frac{1}{2} \cdot (R_{\text{maj } 1} - R_1) = m \cdot R_0 + \left[(\sqrt{2} \cdot \frac{11}{8} - 1) + \sum_{v=2}^m c_v(\frac{1}{2}) \cdot (v-1) \right].$$

Obwohl R_1 negativ ist, läßt sich für genügend kleines $\varepsilon(m) < 0$ auch (61) $_{1/2, b}$ erfüllen, (s.a. Tabelle 2).

Für $g=3/2, 1/2$ können wir nun das Restintegral (52) abschätzen, indem wir im Integranden $R(y, g; m)$ durch die Majorante $R(1, g; m) \cdot y^{2m+3}$ ersetzen:

$$(67) \quad \mathcal{R}(\alpha, g; m) \leq R(1, g; m) \cdot \int_0^1 dy \cdot y^{2m+3} \cdot (e^{|\alpha|y} + 1)^{-1} =: \mathcal{R}_{\text{maj}}(\alpha, g; m)$$

und mit (53)

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\alpha, g; m) &\leq R(1, g; m) \cdot |\alpha|^{-(2m+4)} \cdot \left((2m+3)! \cdot Z(2m+4) - G_{2m+3}(|\alpha|) \right), \\ &= \frac{R(1, g; m)}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot \left\{ (2m+3)! \cdot Z(2m+4) - \sum_{\mu=0}^{2m+3} |\alpha|^{2m+3-\mu} \cdot \frac{(2m+3)!}{(2m+3-\mu)!} \cdot F_{\mu}(|\alpha|) \right\} \end{aligned}$$

$$(68) \quad \mathcal{R}(\alpha, g; m) \leq \frac{R(1, g; m) \cdot (2m+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot \left\{ Z(2m+4) - \sum_{\mu=0}^{2m+3} |\alpha|^{2m+3-\mu} \cdot \frac{(2m+3-\mu)!}{(2m+3-\mu)!} \cdot F_{\mu}(|\alpha|) \right\}$$

Wegen (37) und (46) wird für große m und $|\alpha|$ der Ausdruck in der Klammer gleich $\left\{ 1 - O(|\alpha|^{2m+3} \cdot e^{-|\alpha|}) \right\}$. Der davorstehende Faktor wird für festes $|\alpha|$ aber unendlich, falls $m \rightarrow \infty$. Die Entwicklung des Integralen \mathcal{R} ist daher (mindestens) semikonvergent. Zu jedem vorgegebenen $|\alpha|$ gibt es ein größtes m , sodaß der Restterm noch sicher genügend klein ist.

In (51) hatten wir das Integral $A(\alpha, g)$ entwickelt in m Summanden und das Restglied $\mathcal{R}(\alpha, g; m)$. Das Restglied \mathcal{R} ist in (68) durch \mathcal{R}_{maj} abgeschätzt. Da für gegebenes $|\alpha| \gg 1$ \mathcal{R}_{maj} für $m \rightarrow \infty$ über alle Grenzen wächst, wir aber $A(\alpha, g)$ durch die ersten m Summanden von (51) approximieren wollen, ist zu fordern, daß \mathcal{R}_{maj} mindestens kleiner ist als der m -te Summand in (51).

$$|\mathcal{R}_{\text{maj}}(\alpha, g; m)| \leq |A(\alpha, g; m)|,$$

oder mit (68) und (54) wegen $Z(2m+2) \rightarrow 1$ und ohne die zweite Summe, welche für $|\alpha| \gg 1$, $\sim O(e^{-|\alpha|}/|\alpha|)$ ist,

Tabelle 1

| $s = 3/2$ | $C_m(3/2)$ | $R_0 = R(1, \frac{3}{2}; m)$ | $m \cdot R_0$ | $[n], s, (66)$ | $\frac{1}{2}(R_{m+1} - R_1)$ | $ \alpha_{min} $ |
|-----------|------------|------------------------------|---------------|----------------|------------------------------|------------------|
| $m = 0$ | +3.0000 | =0.1715 | 0.0000 | +0.181 | +0.181 | 1 |
| 1 | -0.1250 | -0.0465 | -0.0465 | 0.181 | 0.134 | 2.7 |
| 2 | -0.0234 | -0.0231 | -0.0462 | 0.204 | 0.158 | 6.8 |
| 3 | -0.0088 | -0.0143 | -0.0429 | 0.199 | 0.156 | 11.0 |
| 4 | -0.0044 | -0.0099 | -0.0396 | 0.194 | 0.154 | 15.7 |
| 5 | -0.0026 | -0.0073 | -0.0365 | 0.191 | 0.154 | 20.9 |
| 6 | -0.0016 | -0.0057 | -0.0342 | 0.189 | 0.155 | 27.4 |

Tabelle 2

$\xi = 0.01$

| $s = 1/2$ | $C_m(1/2)$ | $R_0 = R(1, \frac{1}{2}; m)$ | R_1 | $P_{m+1} - P_1$ | $ \alpha_{min} $ | $R_0 + R_1 \xi - \sqrt{\xi}$ | $R_0 + R_{m+1} \xi$ |
|-----------|------------|------------------------------|-------|-----------------|------------------|------------------------------|---------------------|
| $m = 0$ | 1.000 | 0.413 | 0.647 | 1.890 | 1.6 | 0.413 | 0.413 |
| 1 | 0.125 | 0.288 | 1.022 | 2.466 | 6.8 | | |
| 2 | 0.055 | 0.233 | 1.297 | 2.932 | 13.4 | 0.146 | 0.217 |
| 3 | 0.034 | 0.199 | 1.535 | 3.330 | 20.5 | | |
| 4 | 0.022 | 0.177 | 1.733 | 3.684 | 29.8 | | |
| 5 | 0.016 | 0.161 | 1.809 | 4.006 | 39.6 | | |
| 6 | 0.012 | 0.149 | 1.965 | 4.304 | 51.1 | 0.069 | 0.126 |

Tabelle 3

| $s = -1/2$ | $C_m(-1/2)$ | $R_0 = R(1, -\frac{1}{2}; m)$ | $ \alpha_{min} $ |
|------------|-------------|-------------------------------|------------------|
| $m = 0$ | 1.000 | 1.707 | 1.9 |
| 1 | 0.625 | 2.332 | 3.5 |
| 2 | 0.492 | 2.814 | 6.0 |
| 3 | 0.419 | 3.233 | 8.0 |
| 4 | | | 10.0 |
| 5 | | | 12.0 |
| 6 | | | 14.0 |

$$\frac{|R(1, s; m)| \cdot (2v+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \leq \frac{|C_m(s)| \cdot (2m+1)!}{|\alpha|^{2m+2}}$$

und daraus

$$(69) \quad |\alpha| \geq 2 \cdot \sqrt{\left| \frac{R(1, s; m)}{C_m(s)} \right| \cdot \left(m^2 + \frac{5}{2}m + \frac{3}{2} \right)} =: |\alpha_{\min}(s, m)|$$

Numerische Werte für $|\alpha_{\min}(s, m)|$ für $m=0, 1, \dots, 6$ und $s = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$ sind in den Tabellen 1 und 2 angegeben. Damit ist die Stärke der Semikonvergenz von $R(\alpha, s; m)$ nach oben abgeschätzt.

Wir berechnen nun $\mathcal{R}(\alpha, s; m)$ für $s = -\frac{1}{2}$.

Das Definitionsintegral für \mathcal{R} (siehe (52)) spalten wir auf in $\int_0^1 dy = \int_0^{1-\varepsilon_m} dy + \int_{1-\varepsilon_m}^1 dy$. Da (22) für $0 \leq \varepsilon_m < 1$ konvergent ist, können wir im ersten Term Integration und Summation vertauschen und erhalten nach der Substitution $\xi := y - 1$:

$$(70) \quad \mathcal{R}(\alpha, -\frac{1}{2}; m) = \sum_{v=m+1}^{\infty} \int_0^{1-\varepsilon_m} dy \cdot c_v \cdot y^{2v+1} \cdot (e^{|\alpha| \cdot y} + 1)^{-1} + \int_{-\varepsilon_m}^0 d\xi \cdot R(1+\xi, -\frac{1}{2}; m) \cdot (e^{|\alpha| \cdot y} + 1)$$

Nach Ausführung der Integrale $\int_0^{1-\varepsilon_m} dy$ mit Hilfe der Substitution $z := |\alpha| \cdot y$ und mit (53) bleibt nach der Umsummierung $\sum_{v=m+1}^{\infty} = \sum_{k=1}^{\infty}$ mit $v := k+m$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(\alpha, -\frac{1}{2}; m) &= \frac{(2m+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot \sum_{k=1}^{\infty} c_{k+m} \cdot |\alpha|^{-k+1} \cdot Z(2(k+m+1)) \cdot \frac{(2k+2m+1)!}{(2m+3)!} \\ &\quad - \sum_{k=1}^{\infty} c_{k+m} \cdot (2k+2m+1)! \cdot \sum_{\mu=0}^{2k+2m+1} \frac{|\alpha|^{-\mu+1} \cdot (1-\varepsilon_m)^{2k+2m+1-\mu}}{(1-\varepsilon_m)} \cdot \frac{F_{\mu}(|\alpha| \cdot (1-\varepsilon_m))}{(2k+2m+1-\mu)!} \\ &\quad + \int_{-\varepsilon_m}^0 d\xi \cdot R(1+\xi, -\frac{1}{2}; m) \cdot (e^{|\alpha| \cdot (1-\xi)} + 1)^{-1} \end{aligned}$$

Die zweite Summe wird nach Potenzen von $|\alpha|$ geordnet,

$$(71) \quad \begin{aligned} \mathcal{R}(\alpha, -\frac{1}{2}; m) &= \frac{(2m+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot \sum_{k=1}^{\infty} c_{k+m} \cdot |\alpha|^{-k+1} \cdot Z(2(k+m+1)) \cdot \frac{(2k+2m+1)!}{(2m+3)!} \\ &\quad - \sum_{\mu=0}^{\infty} \frac{F_{\mu}(|\alpha| \cdot (1-\varepsilon_m))}{|\alpha|^{\mu+1}} \cdot \sum_{k=\lceil (\mu - (2m+1))/2 \rceil, k \geq 1}^{\infty} c_{k+m} \cdot (-\frac{1}{2}) \cdot (1-\varepsilon_m)^{2k+2m+1-\mu} \cdot \frac{(2k+2m+1)!}{(2k+2m+1-\mu)!} \\ &\quad + \int_{-\varepsilon_m}^0 d\xi \cdot R(1+\xi, -\frac{1}{2}; m) \cdot (e^{|\alpha| \cdot (1-\xi)} + 1)^{-1} \end{aligned}$$

Im verbliebenen Integral substituieren wir $\delta := -\xi$ und setzen für $R(1+\xi, -\frac{1}{2}; m)$ den in (57) angegebenen Ausdruck ein, den wir an der Stelle $\delta = 0$ entwickeln und nach Gliedern mit gleichen δ -Exponenten ordnen,

$$(72) \quad R(1-\delta, -\frac{1}{2}; m) = \sum_{\mu=0}^{2m+1} K_{\mu} \cdot \delta^{\mu} + \left(\sum_{\mu=1(2m+1)}^{\infty} \rho_{\mu} \cdot \delta^{\mu-2m-2} \right) \cdot \delta^{2m+2} - \delta^{-\frac{1}{2}}$$

mit

$$(73) \quad K_\mu := \ell_\mu - \sum_{\nu=\lfloor \mu/2 \rfloor}^{\mu} c_\nu \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \binom{2\nu+1}{\mu}$$

und

$$(74) \quad \ell_\mu := (-1)^\mu \cdot \binom{-\frac{1}{2}}{\mu} \cdot 2^{-(\mu+\frac{1}{2})}$$

Setzen wir nun (72)-(74) in das Integral in (71) ein und entwickeln den Faktor $(e^{|\alpha|(1-\delta)} + 1)^{-1}$ wegen $e^{|\alpha|(1-\delta)} > 1$ für alle $\delta \in (0, \varepsilon_m)$ in eine Reihe, so erhalten wir

$$(75) \quad \int_{-\varepsilon_m}^0 d\xi \cdot R(1-\delta, -\frac{1}{2}; m) \cdot (e^{|\alpha|(1+\xi)} + 1)^{-1} = \sum_{\nu=0}^{\infty} (-1)^\nu \cdot \frac{e^{-|\alpha| \cdot (\nu+1) \cdot (1-\varepsilon_m)}}{|\alpha| \cdot (\nu+1)} \cdot \left[\left\{ \sum_{\mu=0}^{2m+2} K_\mu \cdot \sum_{n=0}^{\mu} (-1)^n \frac{\mu!}{(\mu-n)!} \cdot \frac{\varepsilon_m^{\mu-n}}{(1+|\alpha| \cdot (\nu+1))^{\mu-n}} \right. \right. \\ \left. \left. + \left\{ \sum_{\mu=2m+2}^{\infty} \ell_\mu \cdot \sum_{n=0}^{\mu} (-1)^n \cdot \frac{\mu!}{(\mu-n)!} \cdot \frac{\varepsilon_m^{\mu-n}}{(1+|\alpha| \cdot (\nu+1))^{\mu-n}} \right\} \right. \\ \left. \left. + e^{-|\alpha| \cdot (\nu+1) \cdot \varepsilon_m} \cdot |\alpha| \cdot (\nu+1) \cdot \left\{ \sqrt{\varepsilon_m} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon_m \cdot |\alpha| \cdot (\nu+1))^n}{n! \cdot (n+\frac{1}{2})} \right\} \right] .$$

Durch (71) und (73)-(75) ist der in (70) angegebene Restterm berechnet.

Das genaue Konvergenzverhalten dieser Lösung $\mathcal{Q}(\alpha, -\frac{1}{2}; m, \varepsilon_m)$ für $\mathcal{Q}(\alpha, -\frac{1}{2}; m)$ ist verwickelt; es wird bestimmt von der Wahl der Größen α , m und ε_m . Wir geben eine kurze Übersicht:

Der Ausdruck in (75) wird für asymptotisch große $|\alpha|$ und endliches m proportional zu

$$O\left(\frac{1}{|\alpha|} \cdot e^{-|\alpha| \cdot (1-\varepsilon_m)}\right) \cdot \left(O(1) + O(1) + O(|\alpha| \cdot \sqrt{\varepsilon_m})\right) .$$

Die beiden großen Summen in (71) werden wegen $Z(2k+2m+1) \sim 1$ gleich

$$\frac{(2m+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot c_{m+1} + O\left(e^{-|\alpha| \cdot (1-\varepsilon_m)} \cdot |\alpha|^{-1}\right) ,$$

mithin

$$(76) \quad \lim_{\alpha \rightarrow -\infty} \mathcal{Q}(\alpha, -\frac{1}{2}; m) = \frac{(2m+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot c_{m+1} \left(-\frac{1}{2}\right) + O\left(\frac{1}{|\alpha|} \cdot e^{-|\alpha| \cdot (1-\varepsilon_m)}\right) \cdot \left(O(1) + O(|\alpha| \cdot \sqrt{\varepsilon_m})\right)$$

Die Wahl von ε_m ist freigestellt, falls nur $0 \leq \varepsilon_m < 1$. Wir denken uns ε_m so bestimmt, daß $\mathcal{Q}(\alpha, -\frac{1}{2}; m, \varepsilon_m)$ bezüglich der Wahl von ε_m minimal wird. Dieses so bestimmte $\varepsilon_m = \varepsilon_{\min}(\alpha, m)$ hängt von m und $|\alpha|$ ab. Für asymptotisch große $|\alpha|$ und vorgegebenes m vermuten wir nach (76), daß $\varepsilon_{\min}(\alpha \rightarrow -\infty, m) = 0$ ist. Für festes α dagegen wird zwar für $\varepsilon_m \rightarrow 0$ der Wert des Ausdruckes (75) immer kleiner, doch wird gleichzeitig die Konvergenz der ε_m -abhängigen Reihe in (71) immer schlechter. Daher wird sich i.a. ein von Null verschiedener Wert für $\varepsilon_{\min}(\alpha, m)$ ergeben.

Die Stärke der Semikonvergenz von $R(\alpha, -\frac{1}{2}; m)$, (siehe (54)), läßt sich am einfachsten beschreiben durch eine "Semikonvergenz-Bedingung" für α und m , in der wir fordern, daß der Restterm $\mathcal{R}(\alpha, -\frac{1}{2}; m)$ kleiner sein soll, als der m -te Summand von $R(\alpha, -\frac{1}{2}; m)$. Für $|\alpha| \gg 1$ erhalten wir aus (54) und (76)

$$\frac{c_m(-\frac{1}{2}) \cdot (2m+1)!}{|\alpha|^{2m+2}} \geq \frac{(2m+3)!}{|\alpha|^{2m+4}} \cdot c_{m+1}(-\frac{1}{2}) .$$

Mit (25) ergibt sich

$$(77) \quad |\alpha| \geq \sqrt{(4m+5) \cdot (4m+3)} =: |\alpha_{\min}| .$$

Numerische Werte für $|\alpha_{\min}|$ für $m=0,1,2,\dots,6$, sind in Tabelle 3 angegeben. (77) ist nur als Näherung für $|\alpha| \gg 1$ zu betrachten, da wir von (76) ausgegangen sind; eine genaue Bestimmung der Semikonvergenz-Bedingung hat von dem exakten, noch von ε_m bzw. $\varepsilon_{\min}(\alpha, m)$ abhängigen komplizierten Ausdruck ((71), (73)-(75)) für $\mathcal{R}(\alpha, -\frac{1}{2}; m)$ auszugehen, doch ist (77) ein Teil ihrer komplizierten Struktur.

Für $g=1,0$ sind die Integrale $R(\alpha, g)$ exakt lösbar; es treten hier keine Restterme auf.

c) Zusammenfassung:

Das Ergebnis der Berechnung von $V_3(\alpha, \nu)$ für $\alpha < 0, |\alpha| \gg 1, \nu = -1$, ist durch die Gleichungen (15), (20), (55) sowie die Abschätzungen (68, 69, 75, 77) gegeben. Die ersten Glieder lauten

$$(78) \quad \mathfrak{S}! \cdot V_3(\alpha) = \frac{|\alpha|^{\mathfrak{S}+1}}{\mathfrak{S}+1} \cdot \left(1 + \frac{1}{|\alpha|^2} \cdot \mathfrak{S} \cdot (\mathfrak{S}+1) \cdot \frac{\pi^2}{6} \right) + O(|\alpha|^{3+4-\mathfrak{S}}),$$

folglich wegen (11a)

$$(79) \quad J_\nu(e^{-\alpha}) = \frac{|\alpha|^{(\nu+1)/2}}{\nu+1} \cdot \left(1 + \frac{\pi^2}{|\alpha|^2} \cdot \frac{(\nu-1) \cdot (\nu+1)}{24} \right) + O(|\alpha|^{\frac{\nu+1}{2}-3}).$$

Für $\nu=3$ und $\nu=1$ ist $J_\nu(\cdot)$ exakt lösbar: aus (15), (20)_{0,1}, (53) sowie (50) folgt

$$(79)_3 \quad J_3(\alpha) = \frac{|\alpha|^2}{4} \cdot \left(1 + \frac{2}{|\alpha|^2} \cdot \left(\frac{\pi}{6} - E_2(|\alpha|) \right) \right),$$

$$(79)_1 \quad J_1(\alpha) = \frac{|\alpha|}{2} \cdot \left(1 + \frac{1}{|\alpha|} \cdot E_0(|\alpha|) \right).$$

5. $J_\nu(\zeta)$ für $(\nu = -1, \zeta \approx 1), (\nu = +1, \zeta \ll 1)$.

a) Fermi-Statistik bei mittlerer Entartung: $\nu = -1, \zeta \approx 1$.

Für $\zeta = 1$, entsprechend $\alpha = 0$, (denn $e^{-\alpha} = \zeta$) lautet das Integral $V_\zeta(\alpha, \nu)$, (siehe (10)),

$$(81) \quad V_\zeta(0, \nu) = \frac{1}{\zeta!} \int_0^\infty dz \cdot z^\zeta \cdot (e^z - \zeta)^{-1}$$

Für $\nu = \pm 1$ sind dies gerade die Grundintegrale (33, 34) mit speziell $\alpha = 1$ und $k = \zeta + 1$. Also folgt für Fermionen

$$(82) \quad V_\zeta(0, -1) = Z(\zeta + 1)$$

und für Bosonen

$$(83) \quad V_\zeta(0, +1) = \zeta(\zeta)$$

$\zeta = 1$ für Bosonen entspricht jedoch nicht mittlerer Entartung, sondern dem Grenzfall vollständiger Einsteinkondensation (s. S. A1). Diesen Fall behandeln wir in dieser Arbeit nicht.

Die numerischen Werte für $Z(\zeta + 1)$ und $\zeta(\zeta)$ für $\zeta = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$ sind in (39) angegeben.

Für Fermionen ($\nu = -1$) entwickeln wir nun $V_\zeta(\alpha)$ an der Stelle $\alpha = 0$:

$$(84) \quad V_\zeta(\alpha, -1) = V_\zeta(0, -1) + \alpha \cdot \left(\frac{\partial V_\zeta(\alpha, -1)}{\partial \alpha} \right)_{\alpha=0} + \dots$$

Mit (10) folgt

$$(85) \quad V_\zeta(\alpha, -1) = \frac{1}{\zeta!} \int_0^\infty dz \cdot z^\zeta \cdot (1 + e^z)^{-1} \cdot (1 + \alpha \cdot (1 + e^{-z})^{-1} + \alpha^2 \dots)$$

Der erste Term ergibt wegen (82) $Z(\zeta + 1)$. Den zweiten Term, den wir mit $\kappa(\zeta)$ bezeichnen,

$$(86) \quad \kappa(\zeta) := \frac{1}{\zeta!} \int_0^\infty dz \cdot z^\zeta \cdot (1 + e^z)^{-1} \cdot (1 + e^{-z})^{-1}$$

schätzen wir zunächst nach oben und unten ab. Der Faktor $(1 + e^{-z})^{-1}$ steigt monoton an vom Wert $\frac{1}{2}$ für $z = 0$ bis zum Wert 1 für $z = \infty$; ersetzen wir ihn einmal durch $\frac{1}{2}$; zum anderen durch 1, so haben wir $\kappa(\zeta)$ eingeschlossen zwischen die Schranken:

$$(87) \quad \frac{1}{2} \cdot Z(\zeta + 1) \leq \kappa(\zeta) \leq Z(\zeta + 1)$$

Wir berechnen nun einen numerischen Näherungswert für $\kappa(\varrho)$. Dazu formen wir $\kappa(\varrho)$ aus (86) um in

$$(88) \quad \kappa(\varrho) = \frac{1}{\varrho!} \cdot \int_0^{\infty} dz \cdot z^{\varrho} \cdot e^{-z} \cdot (1 + e^{-z})^{-2}$$

entwickeln den Faktor $(1 + e^{-z})^{-2}$ in eine Reihe nach Potenzen von $\beta := 1 - e^{-z}$

$$(89) \quad (1 + e^{-z})^{-2} = (2 - (1 - e^{-z}))^{-2} = \frac{1}{4} \cdot (1 - \frac{1}{2} \beta)^{-2} = \frac{1}{4} \cdot \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\nu+1)}{2^{\nu}} \cdot \beta^{\nu}$$

und setzen diese Reihe in (88) ein: Es ist

$$(90) \quad \kappa(\varrho) = \frac{1}{\varrho!} \cdot \frac{1}{4} \cdot \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\nu+1)}{2^{\nu}} \cdot \sum_{\mu=\nu}^{\nu} (-1)^{\mu} \cdot \binom{\nu}{\mu} \cdot \int_0^{\infty} dz \cdot z^{\varrho} \cdot e^{-(\mu+1)z}$$

denn (89) ist wegen $0 \leq \beta \leq 1$ für $z \in [0, \infty)$ gleichmäßig konvergent. Integration und Summation in (90) sind daher vertauschbar. Wegen (26) ist

$$(91) \quad \int_0^{\infty} dz \cdot z^{\varrho} \cdot e^{-(\mu+1)z} = \left(\frac{1}{\mu+1}\right)^{\varrho+1} \cdot \int_0^{\infty} dx \cdot x^{\varrho} \cdot e^{-x} = \left(\frac{1}{\mu+1}\right)^{\varrho+1} \cdot \varrho!$$

und damit folgt aus (90) das Ergebnis:

$$(92) \quad \kappa(\varrho) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\nu+1)}{2^{\nu+2}} \cdot \sum_{\mu=0}^{\nu} (-1)^{\mu} \cdot \binom{\nu}{\mu} \cdot (\mu+1)^{-(\varrho+1)} =: \frac{1}{4} \cdot \sum_{\nu=0}^{\infty} B_{\nu}(\varrho)$$

In der folgenden Tabelle 4 haben wir für $n=2\varrho+1$, $\varrho = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$, die Zahlen $B_{\nu}(\varrho)$, sowie $\kappa_{\varrho}(\varrho)$ und zum Vergleich $\frac{1}{2} \cdot Z(\varrho+1)$ und $Z(\varrho+1)$ angegeben.

=====
Tabelle 4
=====

| ϱ | n | B_1 | B_2 | B_3 | B_4 | B_5 |
|-----------|-----|--------|--------|--------|--------|--------|
| 3/2 | 4 | 0.8236 | 0.5337 | 0.3161 | 0.1790 | 0.0987 |
| 1 | 3 | 0.7500 | 0.4583 | 0.2604 | 0.1427 | 0.0766 |
| 1/2 | 2 | 0.6472 | 0.3652 | 0.1970 | 0.1044 | 0.054 |
| 0 | 1 | 0.5000 | 0.2499 | 0.1249 | 0.0625 | 0.031 |
| -1/2 | 0 | 0.2945 | 0.1248 | 0.0790 | 0.0280 | 0.014 |

| ϱ | n | $\frac{1}{2} Z(\varrho+1)$ | $\kappa_{\varrho}(\varrho)$ | $Z(\varrho+1)$ |
|-----------|-----|----------------------------|-----------------------------|----------------|
| 3/2 | 4 | 0.434 | 0.738 | 0.869 |
| 1 | 3 | 0.411 | 0.672 | 0.822 |
| 1/2 | 2 | 0.382 | 0.592 | 0.765 |
| 0 | 1 | 0.346 | 0.492 | 0.693 |
| -1/2 | 0 | 0.303 | 0.380 | 0.606 |

Die in Tabelle 4 für $\kappa(\varrho)$ angegebenen Werte sind die Teilsummen

$$\kappa_5(\varrho) = \frac{1}{4} \cdot \sum_{v=0}^5 B_v(\varrho)$$

Da in (89) alle Summanden der Reihenentwicklung positiv sind, sowie wegen

$$(93) \quad \kappa(\varrho) = \lim_{m \rightarrow \infty} \kappa_m(\varrho)$$

stellen die endlichen Teilsummen $\kappa_m(\varrho)$ nicht nur eine Näherung, sondern darüberhinaus eine neue Abschätzung von $\kappa(\varrho)$ nach unten dar,

$$(94) \quad \kappa_m(\varrho) \leq \kappa(\varrho) \quad ,$$

die, wie die Tabelle 4 ausweist, wesentlich schärfer ist als $\frac{1}{2}Z(\varrho+1)$.

Für $J_\mu(\alpha)$ erhalten wir durch Einsetzen von (85,86) in (11a)

$$(95) \quad J_{2\varrho+1}(\alpha) = \frac{1}{2} \cdot \varrho! \cdot [Z(\varrho+1) + \alpha \cdot \kappa(\varrho) + O(\alpha^2)] .$$

b) Die Integrale $V_g(\alpha, \nu)$ für schwache Entartung und $\nu = \pm 1$.

1. Fermistatistik

Für $(\nu = -1, \alpha > 0)$ entsprechend Fermistatistik mit "schwacher" Entartung kann im Integral $\alpha \gg \delta \cdot 0$

$$(96) \quad V_g(\alpha > 0, -1) := \frac{1}{g!} \cdot \int_0^{\infty} \dots \cdot (1 + z \cdot 1)^{-1} \cdot \int_0^{\infty} dz \cdot z^g \cdot e^{-\alpha z} \cdot (1 + e^{-\alpha z})^{-1}$$

der Nenner $(1 + e^{-\alpha z})^{-1}$ in eine geometrische Reihe entwickelt werden:

$$V_g(\alpha > 0, -1) = \frac{1}{g!} \cdot \sum_{\mu=0}^{\infty} (-1)^{\mu} \cdot e^{-\alpha(\mu+1)} \cdot \int_0^{\infty} dz \cdot z^g \cdot e^{-z(\mu+1)}$$

Mit den Substitutionen $u := z(\mu+1)$ und $v := (\mu+1)$ folgt:

$$V_g(\alpha > 0, -1) = \frac{1}{g!} \cdot \sum_{v=1}^{\infty} (-1)^{v+1} \cdot e^{-\alpha v} \cdot v^{-(g+1)} \cdot \int_0^{\infty} du \cdot u^g \cdot e^{-u}$$

und daraus wegen (26), (40) bzw. (46)

$$(97) \quad \begin{aligned} V_g(\alpha > 0, -1) &= - \sum_{v=1}^{\infty} (-e^{-\alpha})^v \cdot v^{-(g+1)} \\ &= - \mathcal{L}_{g+1}(-e^{-\alpha}) \\ &= F_g(\alpha) \end{aligned}$$

Wegen (49) geht (97) für $\alpha \rightarrow +0$ in $V_g(0, -1) = Z(g+1)$ über. (82)

Für große positive $\alpha, \alpha \gg 1$ erhalten wir aus () in dritter Näherung in $y := e^{-\alpha}$

$$(98) \quad V_g(\alpha, -1) = e^{-\alpha} - e^{-2\alpha} \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^{g+1} + e^{-3\alpha} \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^{g+1} - \dots, \alpha \gg 1$$

2. Bose-Statistik

Für $(l=+1, \alpha > 0)$ kann der Nenner des Integrals

$$(99) \quad V_S(\alpha > 0, +1) := \frac{1}{S!} \int_0^{\infty} dz \cdot z^S \cdot (e^{\alpha+z} - 1)^{-1}$$

ebenfalls entwickelt werden. Mit Hilfe der Rekursionsformel für $x := e^{\alpha+z} > 1$

$$(100) \quad (x-1)^{-1} = (x+1)^{-1} + 2 \cdot (x^2-1)^{-1}$$

läßt sich $(x-1)^{-1}$ darstellen als

$$(101) \quad (x-1)^{-1} = \sum_{\mu=0}^{\infty} 2^{\mu} \cdot (x^{2^{\mu}} + 1)^{-1}$$

Setzen wir dies in (99) ein und vergleichen mit (96), so haben wir die V_S -Integrale für Bosonen zurückgeführt auf solche für Fermionen:

$$(103) \quad V_S(\alpha, +1) = \sum_{\mu=0}^{\infty} 2^{-\mu \cdot S} \cdot V_S(2^{\mu} \cdot \alpha, -1), \quad \alpha > 0.$$

Zusammen mit (97) ist also $V_S(\alpha, +1)$ berechnet.

Für große $\alpha > 1$ ist es sinnvoll, den aus (102) mit (97) erhaltenen Ausdruck

$$(102) \quad V_S(\alpha, +1) = - \sum_{\mu=0}^{\infty} 2^{-\mu \cdot S} \cdot \sum_{v=1}^{\infty} (-)^v \cdot e^{-2^{\mu} \cdot v \cdot \alpha} \cdot v^{-(S+1)}, \quad \alpha > 0,$$

auszuschreiben und nach Potenzen von $e^{-\alpha}$ zu ordnen. Das Ergebnis lautet:

$$(104) \quad \begin{aligned} V_S(\alpha, +1) &= \sum_{v=1}^{\infty} (e^{-\alpha})^v \cdot \left(\frac{1}{v}\right)^{S+1} \\ &= \mathcal{L}_{S+1}^p(e^{-\alpha}). \end{aligned}$$

Aus (97), (102) und (104) folgt daher eine Relation, die $\mathcal{L}_{S+1}^p(x)$ mit $\mathcal{L}_{S+1}^p(-x)$ verknüpft:

$$(105) \quad \mathcal{L}_{S+1}^p(e^x) = - \sum_{v=0}^{\infty} 2^{-v \cdot S} \cdot \mathcal{L}_{S+1}^p(-x^{2^v}), \quad x > 0, |x| < 1.$$

Lebenslauf

Am 11.1.1935 wurde ich, Eberhard Rainer Herwart Hilf, als viertes der fünf Kinder des o.Professors der forstlichen Arbeitswissenschaft Dr. Hubert-Hugo Hilf und seiner Ehefrau Charlotte, geb. Büsgen, in Eberswalde/Mark Brandenburg geboren. Im Herbst 1941 wurde ich eingeschult. Nach dreijähriger Volksschulzeit bestand ich die Aufnahmeprüfung für das Gymnasium in Eberswalde. 1945 flüchteten wir in den Westen und fanden in Reinbek bei Hamburg eine neue Heimat. Dort legte ich Ostern 1954, nach 9 Schuljahren an der Sachsenwaldoberschule Reinbek, die Reifeprüfung ab und begann im gleichen Jahr mit dem Studium der Physik und Geophysik an der Universität Hamburg. Mehrere Semester studierte ich an der Universität München, der Technischen Universität Berlin und der Universität Frankfurt. Hier bestand ich im Juli 1963 die Diplomprüfung.

Am 10.7.1965 habe ich Sigrid Hilf, geb. Gehrels, aus Warstade N.E., geheiratet.

Seit März 1964 bin ich im Institut für theoretische Physik der Universität Frankfurt/M. mit der Verwaltung einer Assistentenstelle beauftragt.

Eberhard Hilf.

Meine akademischen Lehrer waren in:

- Theoretische Physik: Prof. Dr. Jordan, Prof. Dr. Haag
Prof. Dr. Lehmann, Prof. Dr. Theiss
Prof. Dr. Stüßmann, Prof. Dr. Molière,
Prof. Dr. Päsler, Priv.-Doz. Dr. Just
- Experimentalphysik: Prof. Dr. Neuert, Prof. Dr. Meyer
Prof. Dr. Gerlach, Prof. Dr. Raether
Prof. Dr. Boersch, Prof. Dr. Gobrecht
Prof. Dr. Heckmann,
Prof. Dr. Jentschke,
Prof. Dr. Honerjäger.
- Mathematik: Prof. Dr. Witt, Prof. Dr. Bureau
Prof. Dr. Braun, Prof. Dr. Stein
Prof. Dr. Seebach.
- Meteorologie: Prof. Dr. Raethjen, Prof. Dr. Brocks
Prof. Dr. Geiger, Prof. Dr. Hofmann
Prof. Dr. Georgii, Prof. Dr. Hollmann
- Chemie: Prof. Dr. Schlubach
- Botanik: Prof. Dr. Mevius, Prof. Dr. Hilf
- Arbeitswissenschaft: Prof. Dr. Hilf.
- Ethik und Religion: Prof. Dr. Thielicke.
- Philosophie: Prof. Dr. Engisch.

UB Frankfurt



55 380 260

