

III. Quantenstatistik

Die Grundlagen der klassischen SM lassen sich mühelos quantentheoretisch übersehen. An die Stelle der Masse $\rho d\Gamma$ auf dem Phasenraum treten nun die statistischen Operatoren (Dichtematrizen) und Phasenraumintegrale sind durch Erwartungswerte zu ersetzen. Dann bleiben die meisten grundlegenden Formeln (welche in § I.11 zusammengefasst sind) bestehen.

1. Statistische Operatoren

Die Verallgemeinerung der reinen Zustände auf Gemische wurde bereits in der QM I (s. Skript) ausführlich besprochen. Lokale entsprechen den Massen auf dem Phasenraum und werden mathematisch durch statistische Operatoren ρ mit den folgenden Eigenschaften beschrieben:

- (i) ρ ist positiv hermitesch: $\rho^* = \rho$, $\rho > 0$;
- (ii) ρ ist nuklear (in der Spurklasse) und $\text{Sp} \rho = 1$.

Für eine Diskussion der Spurklasse verweise ich auf die Vorlesung MHP II (s. Skript). Dort wird u.a. gezeigt, dass diese ein zweiseitiges $*$ -Ideal im Raum der beschränkten Operatoren $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ eines Hilbertraumes \mathcal{H} bildet. Da nukleare Operatoren kompakt sind, ist ρ

genau dann ein statistischer Operator, wenn ρ von der folgenden Form ist

$$\rho = \sum_j p_j P_j, \quad \sum p_j = 1 \quad (p_j \geq 0), \quad (1.1)$$

wobei $\{P_j\}$ orthogonale endliche dimensionale Projektoren sind. Die Eigenwerte $p_i \geq 0$ können sich höchstens im Nullpunkt häufen.

Wichtig sind auch die folgenden Eigenschaften der Spur:

$$\text{Sp}(\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2) = \alpha_1 \text{Sp} A_1 + \alpha_2 \text{Sp} A_2, \quad A_1, A_2 \text{ nuklear};$$

$$\text{Sp}(AB) = \text{Sp}(BA), \quad A \text{ nuklear}, B \text{ beschränkt}.$$

Der Erwartungswert einer Observablen A im Zustand ρ ist gleich

$$\text{Sp}(A\rho) =: \langle A \rangle_\rho. \quad (1.2)$$

Diese Formel ist i.a. nur sinnvoll für beschränkte Operatoren und definiert auf $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ ein stetiges positives lineares Funktional. Wir werden im folgenden mit dem Spw-Begriff teilweise recht formal operieren und z.B. auch von $\text{Sp}(H\rho)$ für unbeschränkte Operatoren H reden.

Die reinen Zustände (reinen Fälle) sind statistische Operatoren mit $\rho^2 = \rho$. Genau dann ist nämlich ρ ein 1-dimensionaler Projektor

$$\rho = P_\psi, \quad P_\psi = (\psi, \cdot) \psi, \quad \|\psi\| = 1 \quad (1.3)$$

und für diesen gilt

$$S_p(P_\psi A) = (\psi, A\psi). \quad (1.4)$$

Im allgemeinen ist ρ von der Form (siehe (1.1))

$$\rho = \sum_i \lambda_i P_{\psi_i}, \quad \sum_i \lambda_i = 1, \quad (1.5)$$

wobei die $\{\lambda_i\}$ die (höchstens endlich entarteten) Eigenwerte von ρ und $\{\psi_i\}$ eine zugehörige Basis von Eigenfunktionen sind. Für den Erwartungswert haben wir

$$\langle A \rangle_\rho = \sum_i \lambda_i (\psi_i, A\psi_i), \quad (1.6)$$

was sich in naheliegender Weise interpretieren lässt.

Die Menge der Zustände ist konvex: mit ρ_1 und ρ_2 ist auch $\mu_1 \rho_1 + \mu_2 \rho_2$ für $\mu_1, \mu_2 \geq 0, \mu_1 + \mu_2 = 1$ ein Zustand. Die extremalen Punkte dieser konvexen Menge sind gerade die reinen Zustände. Beweis: Sei ρ extremal. In der Darstellung (1.5) gibt es immer einen Eigenwert λ_1 der nicht verschwindet. Falls $\lambda_1 = 1$ ist gilt $\rho = P_{\psi_1}$ und ρ ist ein reiner Zustand. Wäre $\lambda_1 \neq 1$, so hätte ρ die Darstellung $\rho = \lambda_1 P_{\psi_1} + (1 - \lambda_1) \rho_2$, mit $\rho_2 = \sum_{i>1} \frac{\lambda_i}{1 - \lambda_1} P_{\psi_i}$, im Widerspruch zur Annahme. Die Umkehrung der Aussage wird in den Übungen bewiesen.

Eine interessante Charakterisierung der Abstrakten Operatoren gibt der Satz von Gleason (siehe QM I, § III.12).

In der Heisenberg-Darstellung sind die Observablen zeitabhängig gemäss

$$A_H(t) = U^{-1}(t) A_S U(t), \quad U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}, \quad (1.7)$$

wo H der Hamiltonoperator des autonom vorausgesetzten Systems ist, und die Zustände sind zeitunabhängig. Nun gilt für einen Zustand ρ_H

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\rho_H A_H(t)) &= \text{Sp}(\rho_H U^{-1}(t) A_S U(t)) = \text{Sp}(U(t) \rho_H U^{-1}(t) A_S) \\ &= \text{Sp}(\rho_S(t) A_S), \end{aligned}$$

mit der Schrödinger-Darstellung des Zustandes

$$\rho_S(t) = U(t) \rho_H U^{-1}(t). \quad (1.8)$$

In der Bewegungsgleichung für $\rho_S(t)$ erhalten wir gegenüber der Heisenbergschen Bewegungsgleichung für $A_H(t)$ nach (1.7) und (1.8) einen Vorzeichenwechsel:

$$\dot{\rho}_S = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho_S]. \quad (1.9)$$

Diese Gleichung nennt man oft die quantenmechanische Liouvillegleichung, oder die von Neumann-Gleichung.

Ein Zustand ρ ist stationär, falls ρ_S zeitunabhängig ist. Dies ist gleichbedeutend mit

$$[H, \rho] = 0. \quad (1.10)$$

2. Die Entropie eines Zustandes

Ähnlich wie in der klassischen Theorie, führen wir als Maß für die Ignoranz die Entropie $S(\rho)$ eines Zustandes ein. Wir setzen

$$S(\rho) = -k \text{Sp}(\rho \ln \rho) \quad (2.1)$$

Falls $\rho \in \mathcal{L}_p$ in der Spurklasse ist^{*)}, so ist sehen wir $S(\rho) = \infty$. Benutzen wir die Spektraldarstellung (1.1) für ρ , so ergibt sich

$$S(\rho) = -k \sum_i p_i \ln p_i (\dim F_i). \quad (2.2)$$

Wiederum ist für ein abgeschlossenes System die Entropie zeitlich konstant:

$$S(\rho_S(t)) = S(U(t)\rho U^{-1}(t)) = S(\rho), \quad (2.3)$$

daum^{*)}

$$\ln(U(t)\rho U^{-1}(t)) = U(t)(\ln \rho)U^{-1}(t).$$

Man sieht leicht, dass $S(\rho) \geq 0$ und $S(\rho) = 0$ genau dann, wenn ρ ein reiner Fall ist (s. Übungen).

Für die weiteren Eigenschaften der Entropie benötigen wir die folgende

Ungleichung von O. Klein: Für zwei positive Operatoren R, S aus der Spurklasse gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{Sp} [R(\ln R - \ln S) - R + S] &\geq 0, \\ &= 0 \iff R = S. \end{aligned} \quad (2.4)$$

^{*)} $\ln \rho$ ist mit Hilfe der Spektraldarstellung (1.1) so definiert: $\ln \rho = \sum_j (\ln p_j) F_j$. Da $U\rho U^{-1} = \sum_j p_j U F_j U^{-1}$ gilt $\ln(U\rho U^{-1}) = \sum_j \ln p_j (U F_j U^{-1}) = U(\ln \rho)U^{-1}$.

Beweis: R und S sind insbesondere zwei selbstadjungierte kompakte Operatoren mit Spektraldarstellungen

$$R = \sum_i \lambda_i E_i, \quad S = \sum_j \mu_j F_j.$$

Es sei $g(x,y) = x(\log x - \log y) - x + y$ für $x, y > 0$ (2.5)

und ferner

$$g(x,0) = \infty, \quad g(0,y) = y, \quad g(0,0) = 0. \quad (2.5')$$

Nach (I.4.2) ist

$$g(x,y) \geq 0, \quad = 0 \iff x=y. \quad (2.6)$$

Nun lässt sich das Argument in (2.4) so darstellen

$$R(\log R - \log S) - R + S = \sum_{i,j} g(\lambda_i, \mu_j) E_i F_j = g(R,S), \quad (2.7)$$

denn es ist

$$\sum_{i,j} (\lambda_i \log \lambda_i) E_i F_j = \sum_i (\lambda_i \log \lambda_i) E_i = R \log R$$

und

$$\sum_{i,j} \lambda_i \log \mu_j E_i F_j = \sum_i \lambda_i E_i \sum_j \log \mu_j F_j = R \log S.$$

Ist $g(R,S)$ ebenfalls in der Spurklasse, so folgt

$$\text{Sp}[g(R,S)] = \sum_{i,j} g(\lambda_i, \mu_j) \text{Sp}(E_i F_j) \geq 0,$$

d.h. die Ungleichung (2.4). Wenn $g(R,S)$ nicht in der Spurklasse ist, so definieren wir die Spur in (2.4) als $+\infty$ und die Ungleichung gilt wieder. Es bleibt die Untersuchung der

Gleichheitszeichen.

Dann ist $g(\lambda_i, \mu_j) \operatorname{Sp}(E_i F_j) = 0$ für alle i, j . Für beliebige Paare (i, j) gilt also

$$\lambda_i = \mu_j \quad \underline{\text{oder}} \quad E_i F_j = 0. \quad (*)$$

Für ein festes i betrachten wir die Menge $J_i = \{j \mid E_i F_j \neq 0\}$; nach (*) ist $\mu_j = \lambda_i$ für alle $j \in J_i$. Die Menge J_i ist nicht leer, da $\sum_j E_i F_j = E_i \neq 0$. Da andererseits die μ_j für verschiedene Indizes verschieden sind, besteht J_i aus genau einem Element, das wir mit $j(i)$ bezeichnen. Die Abbildung $i \mapsto j(i)$ ist injektiv: für $j(i) = j(i')$ folgt $\lambda_i = \mu_{j(i)} = \mu_{j(i')} = \lambda_{i'}$, also $i = i'$. Andererseits ist diese Abbildung auch surjektiv: wegen $\sum_j E_i F_j = F_j \neq 0$ existiert zu j wenigstens ein i mit $j = j(i)$.

Wir haben also

$$E_i F_{j(i)} \neq 0, \quad E_i F_j = 0 \quad \text{für } j \neq j(i).$$

Daraus ergibt sich

$$E_i = \sum_j E_i F_j = \underline{E_i F_{j(i)}}; \quad F_j = \sum_i E_i F_j = E_{i(j)} F_j$$

und $j(i(j)) = j$, also

$$F_{j(i)} = E_{i(j(i))} F_{j(i)} = \underline{E_i F_{j(i)}}.$$

Somit $E_i = F_{j(i)}$ und daher $S = \sum \mu_j F_j = \sum \mu_{j(i)} F_{j(i)} = \sum \lambda_i E_i = R$, was zu beweisen war.

Als erste Anwendung der Ungleichung (2.4) zeigen wir, dass die Entropie konkav ist: Sei

$$\rho = \lambda \rho_1 + (1-\lambda) \rho_2, \quad 0 \leq \lambda \leq 1,$$

dann gilt

$$S(\rho) \geq \lambda S(\rho_1) + (1-\lambda) S(\rho_2)$$

(= genau für $\rho_1 = \rho_2$).

(2.8)

Beweis: $S(\rho) - \lambda S(\rho_1) - (1-\lambda) S(\rho_2) = \lambda k \operatorname{Sp} [\rho_1 (\ln \rho_1 - \ln \rho)]$
 $+ (1-\lambda) k \operatorname{Sp} [\rho_2 (\ln \rho_2 - \ln \rho)] \stackrel{(2.4)}{\geq} 0 \quad (= 0 \Leftrightarrow \rho_1 = \rho_2).$

Neben diesem Mischungssatz beweisen wir nun auch noch den sog. Trennungssatz. Dabei betrachten wir ein System, das sich aus zwei Teilsystemen zusammensetzt. Der Hilbertraum \mathcal{H} ist entsprechend ein Tensorprodukt $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ und die Observablen der beiden Teilsysteme sind von der Form $A_1 \otimes 1$, bzw. $1 \otimes A_2$. Ein Zustand ρ des Gesamtsystems induziert Zustände ρ_1 und ρ_2 der beiden Teilsysteme durch

$$\langle A_1 \rangle_{\rho_1} = \operatorname{Sp} (\rho (A_1 \otimes 1)),$$

$$\langle A_2 \rangle_{\rho_2} = \operatorname{Sp} (\rho (1 \otimes A_2))$$

("partielle Spurbildung"). Die Entropie ist subadditiv im folgenden Sinne

$$S(\rho) \leq S(\rho_1) + S(\rho_2) = S(\rho_1 \otimes \rho_2)$$

(= umf für $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$).

Beweis: Ähnlich wie im klassischen Fall haben wir

$$\begin{aligned} S(\rho) - S(\rho_1) - S(\rho_2) &= -k \operatorname{Sp}(\rho \ln \rho) + k \operatorname{Sp}[(\rho_1 \otimes \rho_2)(\ln \rho_1 \otimes 1 + 1 \otimes \ln \rho_2)] \\ &= -k \operatorname{Sp}(\rho \ln \rho) + k \operatorname{Sp}[\rho(\ln \rho_1 \otimes 1)] + k \operatorname{Sp}[\rho(1 \otimes \ln \rho_2)] \\ &= -k \operatorname{Sp}[\rho(\ln \rho - \ln \rho_1 \otimes \rho_2)] \stackrel{(2.4)}{=} -k \operatorname{Sp}[\rho - \rho_1 \otimes \rho_2] = 0 \\ & (= \text{nur für } \rho = \rho_1 \otimes \rho_2). \end{aligned}$$

Interpretation: Nach Trennung der beiden Systeme in den Zuständen ρ_1 und ρ_2 zu einem unkorrelierten Gesamtzustand $\rho_1 \otimes \rho_2$ nimmt die Entropie nicht ab (verlieren Information).

3. Die mikrokanonische Gesamtheit in der Quantenstatistik

Die klassische super-mikrokanonische Gesamtheit hat kein vernünftiges quantentheoretisches Gegenstück, da für endliche Systeme in einem endlichen Volumen die Energien i.a. diskret sind. Hingegen hat das mikrokanonische Mass (I.2.6) die folgende quantentheoretische Übersetzung

$$\rho_{\text{m-kan}} = \Phi^\Delta(E)^{-1} \delta^\Delta(H-E), \quad (3.1)$$

wobei $\Phi^\Delta(E) = \operatorname{Sp}[\delta^\Delta(H-E)].$ (3.2)

Der Operator $\delta^\Delta(H-E)$ ist natürlich mit der Spektraldarstellung definiert:

$$\delta^\Delta(H-E) = \int \delta(\lambda-E) dE_H(\lambda).$$

Falls das Spektrum diskret ist, gilt

$$\delta^\Delta(H-E) = \sum_{E_\alpha \in (E-\Delta, E)} P_\alpha, \quad (3.3)$$

wo P_α die Projektoren auf die Eigenräume zu den Eigenwerten E_α sind. Natürlich ist dann

$$\Phi^\Delta(E) = \sum_{E_\alpha \in (E-\Delta, E)} \dim P_\alpha = \dim \mathcal{H}(E|\Delta), \quad (3.4)$$

wenn $\mathcal{H}(E|\Delta)$ den Unterraum aller Eigenwerte E_α mit $E_\alpha \in (E-\Delta, E)$ bezeichnet.

Der Entropieausdruck (I.2.7) (siehe auch (I.3.5)) bleibt erhalten

$$S = k \ln \Phi^\Delta(E) = k \ln (\dim \mathcal{H}(E|\Delta)). \quad (3.5)$$

Für grosse Systeme wird dieser Ausdruck asymptotisch wieder von der Breite Δ der Energiestufe unabhängig und man kann stattdessen den Raum $\mathcal{H}(\leq E)$ aller Eigenzustände mit Energie $\leq E$ wählen:

$$S(E) \simeq k \ln \Phi(E),$$

$$\Phi(E) = \dim \mathcal{H}(\leq E) = \text{Sp}[\theta(E-H)]. \quad (3.6)$$

Der Anschluss an die Thermodynamik lässt sich ähnlich wie in § I.3 herstellen. Es zeigt sich dabei wieder, dass die mikrokanonische Entropie asymptotisch mit der thermodynamischen Entropie identifiziert werden kann. (Für Einzelheiten sei z.B. auf das Buch von Weidlich, § 9 verwiesen.)

Als neues Resultat erhalten wir den 3. Hauptsatz der Thermodynamik. Für $T=0$ ist das System im Grundzustand und folglich ist $S = k \ln(g_0)$, $g_0 =$ Entartungsgrad des Grundzustandes.

Für einen eindeutigen Grundzustand ist natürlich $S(T=0)=0$. Aber auch wenn $g_0 \leq N$ ist ($N = \text{Zahl der Moleküle}$), erhalten wir $S(T=0)/N \leq (\ln N)/N$, d.h. asymptotisch verschwindet die Entropie pro Molekül bei $T=0$. (Siehe aber die ergänzenden Bemerkungen unten auf S. III.19.)

Für praktische Rechnungen ist die mikrokanonische Gesamtheit ungeeignet. (Siehe z.B. Huang, § 8.5, für die Behandlung der idealen Quantengase in der mikrokanon. Gesamtheit.) Wir wenden uns deshalb den kanonischen und grosskanonischen Gesamtheiten zu. Dazu könnten wir wieder die reduzierte Dichtematrix eines Teilsystems studieren, wenn dieses mit einem sehr grossen System in Wechselwirkung ist. Da die Rechnungen sehr ähnlich verlaufen wie in der klassischen Theorie, verzichten wir aber darauf. (Für Einzelheiten siehe etwa das Buch von Weidlich, § 10.) Stattdessen ziehen wir das Gibbs'sche Variationsprinzip als Rechtfertigung der Gesamtheiten heran.

4. Das Gibbs'sche Variationsprinzip

Interpretieren wir $S(\rho)$ als Mass für die Ignoranz im Zustand ρ , so stellt sich natürlicherweise folgende Aufgabe:

Gesucht ist der Zustand ρ_0 maximaler Entropie, falls die Erwartungswerte von gewissen Observablen Q_1, \dots, Q_n (Energie, Teilchenzahl, ...) gegeben sind.

Falls dieses Problem überhaupt eine Lösung hat, so ist diese von der Form

$$\rho_0 = Z^{-1} \exp\left(-\sum_{s=1}^n \mu_s Q_s\right), \quad Z = \text{Sp}\left(e^{-\sum_{s=1}^n \mu_s Q_s}\right). \quad (4.1)$$

Tabaddilich folgt aus den Nebenbedingungen

$$\langle \log p_0 \rangle_p = \langle \log p_0 \rangle_{p_0}$$

und somit

$$\begin{aligned} k^{-1}(S(p_0) - S(p)) &= \int p \ln p - p_0 \ln p_0 \\ &= \int p (\ln p - \ln p_0) = \int p (\ln p - \ln p_0) - p + p_0 \\ &\stackrel{(2.4)}{\geq} 0 \quad (= 0 \text{ nur für } p = p_0). \end{aligned}$$

Damit (4.1) die gesuchte Lösung darstellt, müssen zu gegebenen Erwartungswerten $\langle Q_k \rangle \equiv q_k$ Parameter μ_s existieren mit

$$Z^{-1} \int p(Q_k e^{-\sum \mu_s Q_s}) = q_k.$$

(Natürlich sollte auch $\exp(-\sum \mu_s Q_s)$ in der Spurklasse sein.) Es gilt offensichtlich

$$q_k = -Z^{-1} \frac{\partial Z}{\partial \mu_k} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \mu_k}. \quad (4.2)$$

Diese Gl. müssen also nach μ_k aufgelöst werden. Sehen wir $\Phi = -\ln Z$, so ergibt sich für die Entropie

$$\begin{aligned} S(p_0) &= -k \int p_0 (-\ln Z - \sum \mu_s Q_s) \\ &= -k [\Phi - \sum \mu_s q_s], \end{aligned}$$

oder mit (4.2)

$$S(p_0) = k \left(\sum \mu_s \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_s} - \Phi \right). \quad (4.3)$$

Die zweiten Ableitungen von Φ geben uns wieder die Schwankungen der Q_k falls diese kommutieren: Leiten wir nämlich

$$\mathcal{S}_p (e^{\Phi - \sum \mu_s Q_s}) = 1$$

zweimal nach den μ_s ab, so kommt

$$\mathcal{S}_p \left\{ \rho_0 \left[\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mu_k \partial \mu_l} + (Q_k - \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_k})(Q_l - \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_l}) \right] \right\} = 0$$

und folglich erhalten wir für die Korrelationen

$$\left\langle (Q_k - \langle Q_k \rangle)(Q_l - \langle Q_l \rangle) \right\rangle = - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mu_k \partial \mu_l} \quad (4.4)$$

Daraus folgt, dass die Matrix $-\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mu_k \partial \mu_l}\right)$ positiv semidefinit ist. Falls sie strikte positiv definit ist, haben die Gleichungen (4.2), d.h.

$$q_k = \frac{\partial \Phi}{\partial \mu_k} \quad (4.2')$$

genau eine Lösung. Diese Gleichung sowie (4.3) zeigen, dass S/k — als Funktion der q_k aufgefasst — die Legendre-Transformierte von Φ (als Funktion der μ_s) ist. Die q 's und die μ 's sind zueinander konjugiert. (Siehe dazu meine Bücher über Mechanik und Thermodynamik.)

In dieses Schema passen nun insbesondere die kanonische und die großkanonische Gesamtheit.

5. Kanonische und grosskanonische Gesamtheiten

Für die kanonische Gesamtheit ist nur der Mittelwert der Energie vorgegeben und deshalb ist

$$\rho_{\text{kan}} = Z_{\text{kan}}^{-1} \bar{e}^{\beta H}, \quad Z_{\text{kan}} = \text{Sp} \bar{e}^{\beta H}. \quad (5.1)$$

Da für die grosskanonische Gesamtheit die Teilchenzahl nicht feststeht, müssen wir an Stelle von (I.9.1) den Fockraum \mathcal{F} über dem Einteilchen-Hilbertraum zugrunde legen^{*)}. Für mehrere Teilchensorten ist das Tensorprodukt der Fockräume der verschiedenen Sorten zu nehmen.

Im Spezialfall einer Teilchensorte ist — neben der Energie — noch der Erwartungswert des Teilchenzahloperators N festgelegt und damit lautet der grosskanonische Zustand

$$\rho_{g\text{-kan}} = Z_{g\text{-kan}}^{-1} \bar{e}^{\beta(H - \mu N)}, \quad Z_{g\text{-kan}} = \text{Sp} \bar{e}^{\beta(H - \mu N)}. \quad (5.2)$$

Für den Anschluss an die Thermodynamik können wir die Überlegungen von § I.8 wiederholen. Dabei bleibt sich alles gleich, wenn wir überall Integrale mit $d\Gamma$ durch Spursummen ersetzen. Dies kann unmittelbar nachgeprüft werden, ausser vielleicht die folgende Variationsformel:

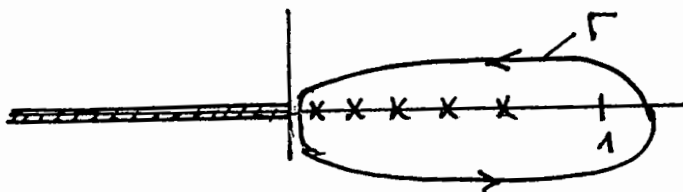
$$\delta \text{Sp} [\rho \ln \rho] = \text{Sp} [\delta \rho \ln \rho],$$

^{*)} Siehe dazu das Skript QM II, speziell die Abschnitte X.3 und XII.1 (erhältlich im Studentenladen).

für einen Zustand ρ . Diese Gleichung beweisen wir mit Hilfe der folgenden Darstellung

$$\rho \ln \rho = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \lambda \ln \lambda R(\lambda) d\lambda, \quad R(\lambda) = (\lambda - \rho)^{-1},$$

wobei Γ ein geschlossener Weg ist, der das Spektrum von ρ in seinem Inneren hat und die negative Halbadse nicht schneidet (s. Fig.). Die Richtigkeit dieser Gleichung folgt sofort



aus der Spektraldarstellung $R(\lambda) = \sum \frac{1}{\lambda - p_i} P_i$ und der Tatsache, dass $\lambda \ln \lambda$ in der längs der negativen Halbadse aufgeschnittenen Ebene holomorph ist. (Was passiert, wenn 0 ein Häufungspunkt der p_i ist?) Nun ist (Übung)

$$\delta R(\lambda) = R(\lambda) \delta \rho R(\lambda)$$

und folglich

$$\delta \text{Sp}(\rho \ln \rho) = \frac{1}{2\pi i} \text{Sp} \left\{ \int_{\Gamma} \lambda \ln \lambda R(\lambda) \delta \rho R(\lambda) d\lambda \right\}.$$

Rechts sehen wir noch die Spektraldarstellung von $R(\lambda)$ ein und erhalten so

$$\begin{aligned} \delta \text{Sp}(\rho \ln \rho) &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{j,k} \int_{\Gamma} d\lambda \frac{\lambda \ln \lambda}{(\lambda - p_j)(\lambda - p_k)} \underbrace{\text{Sp}(P_j \delta \rho P_k)}_{\delta_{jk} \text{Sp}(\delta \rho P_j)} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \sum_j \int_{\Gamma} d\lambda \frac{\lambda \ln \lambda}{(\lambda - p_j)^2} \text{Sp}(\delta \rho P_j) \\ &= \sum_j (\ln p_j + 1) \text{Sp}(\delta \rho P_j) = \text{Sp}[\delta \rho (\ln \rho + 1)]. \end{aligned}$$

Da $\delta q \delta p = 0$ folgt daraus die Behauptung.

Damit erhalten wir insbesondere, dass für die kanonische Gesamtheit die freie Energie durch

$$F = -kT \ln Z_{\text{kan}} \quad (5.3)$$

gegeben ist.

Für die grosskanonische Gesamtheit (5.2) ist die Entropie

$$\begin{aligned} S &= -k \mathcal{S}_p(\rho \ln \rho) = -k \langle (-\ln Z_{g\text{-kan}} - (\beta H + \mu \bar{N})) \rangle \\ &= k \ln Z_{g\text{-kan}} + \frac{1}{T} U - \frac{\mu}{T} \bar{N}. \end{aligned}$$

Identifikation mit der thermodynamischen Beziehung

$$\Omega = U - TS - \mu \bar{N} \quad (5.4)$$

ergibt für das grosskanonische Potential

$$\Omega(\beta, V, \mu) = -kT \ln Z_{g\text{-kan}}. \quad (5.5)$$

Als Bestätigung der thermodynamischen Beziehung

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \quad (5.6)$$

bekommen wir

$$\begin{aligned} U - \mu \bar{N} &= \langle H - \mu N \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{S}_p [e^{-\beta(H - \mu N)}] \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_{g\text{-kan}} = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta \Omega) = \Omega + \beta \frac{\partial \Omega}{\partial \beta} \\ &= \Omega - T \frac{\partial \Omega}{\partial T}. \end{aligned}$$

Zusammen mit (5.4) folgt in der Tat (5.6). Ähnlich ergibt sich

aus

$$\begin{aligned}
 -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} &= \beta^{-1} \frac{\partial \ln Z_{g-kan}}{\partial \mu} = \beta^{-1} \frac{1}{Z_{g-kan}} \operatorname{Sp} \left(\frac{\partial}{\partial \mu} e^{-\beta(H-\mu N)} \right) \\
 &= \frac{1}{Z_{g-kan}} \operatorname{Sp} (N e^{-\beta(H-\mu N)})
 \end{aligned}$$

die thermodynamische Beziehung

$$\bar{N} = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \quad (5.7)$$

Aus (4.4) erhalten wir ferner die Schwankung (hier ist $\phi = \beta \Omega$)

$$\sigma^2(N) = -kT \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2} \quad (5.8)$$

Diese Formel hatten wir auch in der klassischen Theorie (Gl. (I.9.12)). Wie dort folgt daraus rein thermodynamisch die Beziehung

$$\sigma^2(N) = -kT \left(\frac{\bar{N}}{V} \right)^2 \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T, \bar{N}}^{-1} \quad (5.9)$$

Für ideale Quantengase werden wir diese Schwankungen später eingehend diskutieren.

Eine letzte Bemerkung zur grosskanonischen Gesamtheit. Zerlegen wir den Hamiltonoperator bezüglich der direkten Summe

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n, \quad \mathcal{H}_n: n\text{-Teilchen Hilbertraum} \quad (5.10)$$

gemäss

$$H = \sum H_n, \quad H_n = H \upharpoonright \mathcal{H}_n \quad (5.11)$$

(H und N vertauschen in der nichtrelativistischen Theorie), so

ist

$$Z_{g\text{-kan}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{\beta \mu n} Z_n, \quad Z_n = \text{Sp} \bar{e}^{\beta H n}. \quad (5.12)$$

Die grosskanonische Zustandssumme ist also die erzeugende Funktion der kanonischen Zustandssummen.

Ergänzung: Ungleichung von Peierls

Diese besagt

$$\text{Sp} \bar{e}^{\beta H} \geq \sum_i \bar{e}^{\beta(\varphi_i, H \varphi_i)} \quad (5.13)$$

für jede orthonormierte Familie von Vektoren $\{\varphi_i\}$ (aus dem Definitionsbereich von H). Das Gleichheitszeichen wird für das System der Eigenfunktionen von H angenommen, falls H ein reines Punktspektrum hat.

Beweis: Wir zeigen zuerst

$$(\varphi, \bar{e}^{\beta H} \varphi) \geq \bar{e}^{\beta(\varphi, H \varphi)} \quad (5.14)$$

für jeden normierten Vektor φ . Dazu bezeichne $E(\cdot)$ das Spektralmass von H und $d\mu_{\varphi}$ sei das W -Mass $(\varphi, dE(\cdot)\varphi)$. Dann gilt nach der Jensen-Ungleichung

$$\begin{aligned} (\varphi, \bar{e}^{\beta H} \varphi) &= \int \bar{e}^{\beta \lambda} d\mu_{\varphi}(\lambda) \geq \exp\left(-\int \beta \lambda d\mu_{\varphi}(\lambda)\right) \\ &= \bar{e}^{\beta(\varphi, H \varphi)}. \end{aligned}$$

Aus (5.14) folgt natürlich auch (5.13).

Die Peierls-Ungleichung kann man zur Abschätzung der freien Energie F benutzen.

Rekapitulation

Die Grundlagen der Quantenstatistik sehen formal ausserordentlich ähnlich aus wie diejenigen der klassischen Theorie. Dies wird in der folgenden Tabelle nochmals festgehalten.

Begriff	klassische SM	Quantenstatistik
Zustandsraum	Phasenraum Γ	Hilbertraum \mathcal{H}
Zustände	$\rho d\Gamma$	Dichtekoperatoren ρ
Observablen	Funktionen auf Γ	selbstadj. Op. von \mathcal{H}
Erwartungswerte	$\langle A \rangle = \int A \rho d\Gamma$	$\langle A \rangle = \text{Sp}(A\rho)$
Zeitabhängigkeit	$\dot{\rho} = \{H, \rho\}$	$\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]$
Entropie eines Zustandes	$S(\rho) = -k \int \ln \rho d\Gamma$	$S(\rho) = -k \text{Sp}(\rho \ln \rho)$
allgem. Eigenschaften der Entropie	Mischung- und Trennungssätze, etc	
mikrokanonische Dichte	$\rho_{m.kan} = \frac{1}{\Omega(E)} \delta(H-E)$	dito
Gibbs'sches Variationsprinzip	formal gleich mit $\int_{\Gamma} d\Gamma \dots \longleftrightarrow \text{Sp}(\dots)$	
kanonischer Zustand	$\sum_{kan}^{-1} e^{-\beta H}$	dito
groskan. Zustandsraum	$\bigcup_{\nu=0}^{\infty} \Gamma_{\nu}$	$\mathcal{F} = \bigoplus_{\nu=0}^{\infty} \mathcal{H}_{\nu}$
groskan. Zustand	$\sum_{g-kan}^{-1} \sum_{\nu=0}^{\infty} e^{-\beta(H_{\nu} - \mu_{\nu})} \times d\Gamma_{\nu}$	$\sum_{g-kan}^{-1} e^{-\beta(H - \mu)}$

Ergänzungen zum 3. Hauptsatz der Thermodynamik

In der Planckschen Formulierung besagt der 3. Hauptsatz:

"Für jeden Stoff strebt die Entropie im Limes $T \downarrow 0$ gegen eine von Druck, Aggregatzustand und chemische Zusammensetzung unabhängige Konstante".

Wir haben bereits gesehen (S. III.11), dass am absoluten Nullpunkt die Entropie pro Teilchen für große Systeme verschwindet: $S/N \approx k \ln N/N$. Nun liegen aber die Energiewerte eines makroskopischen Systems i.a. ausserordentlich dicht. Z.B. ist für ein ideales Gas, welches in ein Volumen V eingeschlossen ist, die Energiedifferenz ΔE zwischen dem 1. angeregten Zustand und dem Grundzustand nach (6.16) (weiter unten) ungefähr $h^2/mV^{2/3}$. Für $V = 1 \text{ cm}^3$ und $m = m_p$ ist dafür $\Delta E/k \approx 5 \times 10^{15} \text{ K}$. Nur wenn T viel kleiner ist als diese lächerlich kleine Temperatur ist der Wert der Entropie für $T=0$ relevant. Das Verhalten der Entropie in einem experimentell zugänglichen Temperaturbereich wird durch die Zustandsdichte $\omega(E)$ in der Nähe von $E=0$ bestimmt. Die meisten Substanzen werden in der Nähe des absoluten Nullpunktes kristalline Festkörper. Für diese ist die Debye'sche Theorie zuständig. Nach dieser ist (s. §. III.7) $S(T)$ proportional zu T^3 . Auch ^4He , das bis zum absoluten Nullpunkt flüssig bleibt, verhält sich S annähernd wie in der Debye-Theorie. (Für Metalle s. S. III.33 unten)

Einen allgemeinen Beweis des 3. Hauptsatzes (in der obigen Formulierung) gibt es aber nicht.

6. Die ideale Quantengase

Wir betrachten im folgenden nur eine Sorte von Fermionen oder Bosonen. (Die Verallgemeinerung auf mehrere Teildensorten ist trivial.) \mathcal{F} bezeichne wie in (S.10) den zugehörigen antisymmetrischen, bzw. symmetrischen Fockraum (s. die Fussnote auf S. III.14). Zu jeder Einteilchenwellenfunktion f gehören in bekannter Weise Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren $a^\dagger(f), a(f)$, welche die üblichen Vertauschungsrelationen erfüllen.

Zu jeder orthonormierten Basis $\{f_k\}$ von Einteilchenwellenfunktionen gehört in natürlicher Weise eine ^{orthonormierte} Basis von \mathcal{F} : Setzen wir

$$a_k \equiv a(f_k), \quad a_k^\dagger \equiv a^\dagger(f_k) \quad (6.1)$$

so ist diese gegeben durch

$$|n_1, n_2, \dots, n_s\rangle = \prod_{k=1}^s \frac{1}{\sqrt{n_k!}} (a_k^\dagger)^{n_k} |0\rangle, \quad (6.2)$$

wo $|0\rangle$ das Fock-Vakuum bezeichnet. Für Fermionen ist $n_k = 0, 1$, während für Bosonen die Besetzungszahlen $n_k = 0, 1, 2, \dots$ beliebig sind.

Der Teilchenzahloperator N ist gegeben durch

$$N = \sum_{k=0}^{\infty} N_k, \quad N_k = a_k^\dagger a_k. \quad (6.3)$$

Es gilt

$$N_k |n_1, n_2, \dots\rangle = n_k |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (6.4)$$

Wählen wir für $\{f_k\}$ jetzt speziell die ortho-

normierte Basis $\{u_k\}$ der Eigenfunktionen des 1-Teilchen
Hamiltonoperators H_1 ,

$$H_1 u_k = \epsilon_k u_k, \quad (6.5)$$

so lautet der Hamiltonoperator (s.u.) für ein ideales Gas

$$H = \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon_k N_k = \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon_k a_k^\dagger a_k. \quad (6.6)$$

Nach (6.4) gilt

$$H |n_1, n_2, \dots\rangle = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \epsilon_k n_k \right) |n_1, n_2, \dots\rangle, \quad (6.7)$$

d.h. (6.4) ist für $\{f_k = u_k\}$ die orthonormierte Basis
von Eigenvektoren von H mit den Eigenwerten $\sum \epsilon_k n_k$.

Die großkanonische Zustandssumme kann nun leicht
berechnet werden:

$$Z_{gkan} = \text{Sp} e^{-\beta(H-\mu N)} = \text{Sp} \left[e^{-\beta \sum (\epsilon_k - \mu) N_k} \right]$$

$$= \sum_{\{n\}} \langle n_1, n_2, \dots | e^{-\beta \sum (\epsilon_k - \mu) N_k} | n_1, n_2, \dots \rangle$$

$$= \sum_{\{n\}} e^{-\beta \sum_k (\epsilon_k - \mu) n_k} = \sum_{\{n\}} \prod_k e^{-\beta (\epsilon_k - \mu) n_k}$$

$$= \prod_k \sum_{n_k} e^{-\beta (\epsilon_k - \mu) n_k}$$

$$= \begin{cases} \prod_k (1 - e^{-\beta (\epsilon_k - \mu)})^{-1} & \text{Bose-Einstein (BE),} \\ \prod_k (1 + e^{-\beta (\epsilon_k - \mu)}) & \text{Fermi-Dirac (FD).} \end{cases} \quad (6.8)$$

Damit haben wir für das großkanonische Potential

$$\Omega = \pm kT \sum_k \ln \left(1 \mp e^{-(\epsilon_k - \mu)/kT} \right) \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \quad (6.9)$$

Daraus ergeben sich alle thermodynamischen Eigenschaften der idealen Quantengase.

Aus

$$1 = \text{Sp} \rho_{g\text{-kan}} = \text{Sp} \left[e^{-\beta \sum (\epsilon_k - \mu) N_k} e^{\beta \Omega} \right]$$

folgt

$$0 = \frac{\partial}{\partial \epsilon_k} \text{Sp} \rho_{g\text{-kan}} = \beta \text{Sp} \left[\rho_{g\text{-kan}} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \epsilon_k} - N_k \right) \right],$$

also für die mittlere Besetzungszahl \bar{N}_k

$$\bar{N}_k = \frac{\partial \Omega}{\partial \epsilon_k} \stackrel{(6.9)}{=} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} \mp 1} \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \quad (6.10)$$

Durch eine weitere Ableitung nach ϵ_k finden wir analog für die Schwankungen

$$\begin{aligned} \beta \langle (N_k - \langle N_k \rangle)(N_k - \langle N_k \rangle) \rangle &= - \frac{\partial^2 \Omega}{\partial \epsilon_k^2} = - \frac{\partial \bar{N}_k}{\partial \epsilon_k} \\ &\stackrel{(6.10)}{=} \beta \delta_{\epsilon_k} \bar{N}_k (1 \pm \bar{N}_k) \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \end{aligned} \quad (6.11)$$

Im Grenzfall $\bar{N}_k \ll 1$ erhält man daraus das klassische Schwankungsgesetz $\langle \Delta N_k \Delta N_k \rangle \approx \delta_{\epsilon_k} \bar{N}_k$.

Der Verlauf der mittleren Besetzungszahlen \bar{N}_k ist für Fermionen und für Bosonen sehr verschieden. Die Funktionen $\bar{N}_k(x)$, $x = \beta(\epsilon_k - \mu)$ sind in der folgenden Figur skizziert.

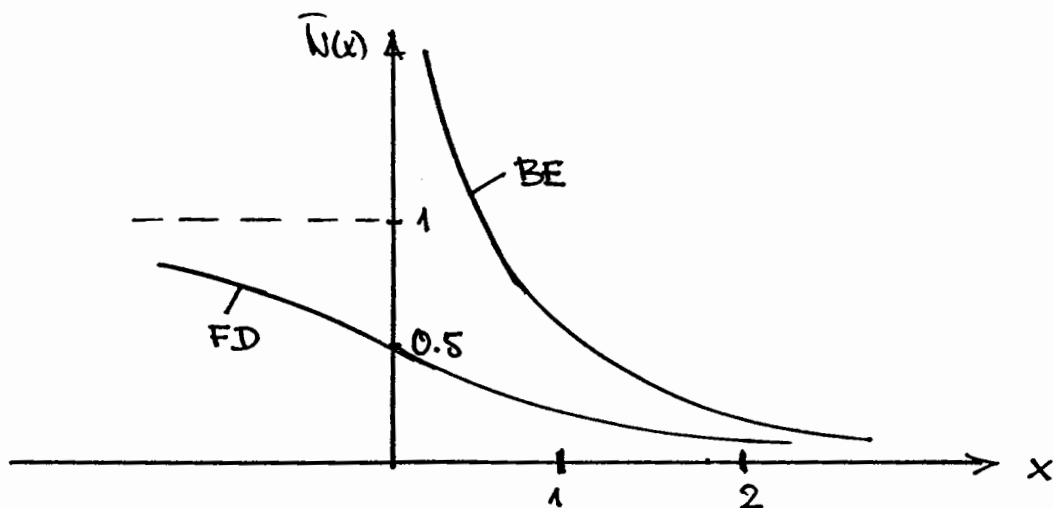


Fig. $\bar{N}(x)$ (Besetzungszahlen) als Funktion von $x = \beta(E - \mu)$.

Im Grenzfall $T=0$ ist die FD-Verteilung gleich $\theta(\mu - \epsilon)$, d.h. alle Zustände mit $\epsilon < \mu$ sind besetzt und alle Zustände mit $\epsilon > \mu$ sind unbesetzt (μ ist dann gleich der Fermienergie). Das chemische Potential μ kann ^{i.a.} irgend einen reellen Wert annehmen.

Damit für die BE-Verteilung \bar{N} im Intervall $[0, \infty)$ ist muss $x > 0$ sein. Wählen wir die Grundzustandsenergie $\epsilon_1 = 0$, so bedeutet dies, dass $\mu < 0$ sein muss. Für $T=0$ muss $\mu = 0$ sein; dann sind alle \bar{N}_k mit $\epsilon_k > 0$ gleich Null und die \bar{N}_k für $\epsilon_k = 0$ sind unbestimmt.

Der klassische Grenzfall entspricht $e^x \gg 1$; dann gehen beide Verteilungen in die Boltzmann-Verteilung $\bar{N}_k = \bar{e}^x = \bar{e}^{\beta(\epsilon_k - \mu)}$ über. Diese Bedingung für alle k ist erfüllt im Grenzfall

$$\mu/kT \rightarrow -\infty. \quad (6.12)$$

Die entgegengesetzten Grenzfälle $\frac{\mu}{kT} \rightarrow \begin{cases} +\infty & \text{FD} \\ 0 & \text{BE} \end{cases} \quad (6.13)$

entsprechen den Quantenregimes der Gase, in welchen sog. Erwartungswerte aufbauen.

Wir diskutieren nun im Detail die relativistischen Bose- und Fermigase für Spin s und Masse m . Diese seien in einem Kasten $\Lambda = \{ \underline{x} \in \mathbb{R}^3 \mid 0 \leq x_i \leq L \}$ eingeschüttet. Der Einleitenden-Hilbertraum ist also

$$\mathcal{H}_1 = L^2(\Lambda) \otimes \mathbb{C}^{2s+1} \quad (6.14)$$

und der Einleitenden-Hamiltonoperator sei

$$H_1 = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \text{const} \right) \otimes 1. \quad (6.15)$$

Dabei ist Δ die eindeutige selbstadjungierte Erweiterung des Laplace-Operators auf $C^2(V)$ mit Dirichlet'schen Randbedingungen (Verschwinden der Funktionen auf $\partial\Lambda$). Die Konstante in (6.15) wird so gewählt, dass der tiefste Eigenwert von H_1 verschwindet.

Das Spektrum von H_1 ist diskret und besteht aus den Eigenwerten

$$E_{\underline{n}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (\underline{n}^2 - 3) \quad , \quad \underline{n} = (n_1, n_2, n_3), \quad n_i = 1, 2, \dots \quad (6.16)$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen sind ($V = |\Lambda|$)

$$u_{\underline{n}, \sigma}(\underline{x}) = \left(\frac{8}{V} \right)^{1/2} \prod_{i=1}^3 \sin\left(\frac{\pi}{L} n_i x_i \right) \chi_{\sigma} \quad (\sigma = 1, \dots, 2s+1),$$

wobei die χ_{σ} eine orthonormierte Basis von \mathbb{C}^{2s+1} bilden. Zu gegebenem \underline{n} ist also jeder Eigenwert (6.16) $2s+1$ -fach entartet.

Aus dem großkanonischen Potential (6.9) wird jetzt

$$\Omega = \pm (2s+1) kT \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \ln \left(1 \mp e^{-(\epsilon_{\underline{n}} - \mu)/kT} \right) \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \quad (6.17)$$

Die mittleren Besetzungszahlen sind jetzt (s. Gl. (6.10))

$$\bar{N}_{\underline{n}, \sigma} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\underline{n}} - \mu)} \mp 1} \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \quad (6.18)$$

Daher ist die mittlere Teilchenzahl

$$\bar{N} = (2s+1) \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\underline{n}} - \mu)} \mp 1} \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \quad (6.19)$$

und die mittlere Energie

$$E = (2s+1) \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \frac{\epsilon_{\underline{n}}}{e^{\beta(\epsilon_{\underline{n}} - \mu)} \mp 1} \quad \begin{array}{l} \text{BE} \\ \text{FD} \end{array} \quad (6.20)$$

Für den Druck $p = -\partial\Omega/\partial V$ erhalten wir aus (6.17) und (6.16)

$$p = -(2s+1) \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \frac{\partial \epsilon_{\underline{n}} / \partial V}{e^{\beta(\epsilon_{\underline{n}} - \mu)} \mp 1} = + \frac{1}{V} \frac{2}{3} E.$$

Wie für klassische ideale Gase gilt also auch hier

$$pV = \frac{2}{3} E. \quad (6.21)$$

Nun ist es angezeigt, zum thermodynamischen Limes überzugehen. In diesem werden aus den Summen Integrale:

$$\left(\frac{\pi}{L}\right)^3 \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} f\left(\frac{\pi}{L} \sqrt{n_i^2 - 1}\right) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\underline{k}) d^3k \quad (6.22)$$

für stetige Funktionen f mit

$$|f(\underline{k})| \leq C (1 + |\underline{k}|)^{-3-\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0. \quad (6.23)$$

(Diese leicht zu beweisende Bedingung muss man im folgenden beim Bosegas für hohe Temperaturen im Auge behalten.)

6.1 Das ideale Fermigas

Beim Fermigas ist der thermodynamische Limes unproblematisch. Z.B. wird aus der mittleren Teilchendichte $n = \bar{N}/V$:

$$\begin{aligned} n &= (2s+1) \frac{1}{\pi^3} \int_{\mathbb{R}_+^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu)} + 1} d\underline{k} \\ &= (2s+1) \frac{1}{\pi^3} \frac{1}{8} 4\pi \int_0^\infty d|\underline{k}| |\underline{k}|^2 \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - \mu)} + 1}. \quad (6.24) \end{aligned}$$

Nach der Variablensubstitution $x = \beta \frac{\hbar^2}{2m} |\underline{k}|^2$ wird daraus

$$n = (2s+1) \left(\frac{2\pi m k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^{x-\beta\mu} + 1} dx.$$

$\underbrace{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}_{1/\Gamma(\frac{3}{2})}$

Wir benutzen im folgenden die Funktionen

$$f_\lambda(z) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1}}{z^{-1}e^x + 1} dx, \quad \lambda > 0. \quad (6.25)$$

Dann erhalten wir

$$n = (2s+1) \lambda(T)^{-3} f_{3/2}(z) \quad , \quad (6.26)$$

wobei $z = e^{\beta\mu}$ die Fugazität ist und $\lambda(T)$ wieder die thermische Wellenlänge

$$\lambda(T) = \frac{h}{\sqrt{2\pi m kT}} \quad (6.27)$$

bezeichnet.

Entsprechend erhalten wir aus (6.20) und (6.21)

$$p = (2s+1) \frac{kT}{\lambda^3(T)} f_{5/2}(z) \quad (6.28)$$

und für die innere Energiedichte

$$u = \frac{3}{2} p = 3 \frac{2s+1}{2} kT \lambda^{-3} f_{5/2}(z). \quad (6.29)$$

Die Entropiedichte s ist allgemein^{*)} gleich $(p + u - \mu n)/T$, also hier

$$s = \frac{1}{T} \left(\frac{5}{2} u - \mu n \right) = \frac{k}{\lambda^3} (2s+1) \left[\frac{5}{2} f_{5/2}(z) - \mu f_{3/2}(z) \right]. \quad (6.30)$$

Um die Größen p , u und s als Funktionen von T und n auszudrücken, müssen wir z eliminieren.

*) Es ist $\Omega = -pV = U - TS - \mu N$.

Dies können wir analytisch nur in gewissen Fällen beweisen.

a) schwache Entartung (z klein)

Für $|z| < 1$ finden wir aus (6.25) eine konvergente Reihenentwicklung

$$f_A(z) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{z^k}{k^2} \quad (|z| < 1) \quad (6.31)$$

(benutze $(1 + ze^{-x})^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l (ze^{-x})^l$). Damit folgt aus (6.26)

$$n = (2s+1) \left(\frac{2\pi m k T}{h^2} \right)^{3/2} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{z^k}{k^{3/2}} \quad (6.32)$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{z + O(z^2)}$$

Kleine z entspricht also kleinen Teilchendichten (oder grosser spezifischer Volumina v). Die Umkehrung von (6.32) hat die Form

$$z = \frac{\lambda^3 n}{2s+1} \left[1 + \frac{1}{2^{3/2}} \frac{\lambda^3 n}{2s+1} + \dots \right] \quad (6.33)$$

Für

$$\frac{p v}{k T} = \frac{f_{5/2}(z)}{f_{3/2}(z)} \quad (6.34)$$

erhalten wir näherungsweise

$$\frac{p v}{k T} = 1 + \frac{z}{2^{5/2}} + \dots = 1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{1}{2s+1} \left(\frac{h^2}{2\pi m k T} \right)^{3/2} n + \dots \quad (6.35)$$

Als Übungsaufgabe bestimme man den Anfang der Ent-wicklung auch für u , C_V und μ ; Resultat:

$$u = \frac{3}{2} nkT \left[1 + \frac{1}{2^{5/2}} \frac{1}{2s+1} \lambda^3 n + \dots \right], \quad (6.36)$$

$$C_V = \frac{3}{2} kT \left[1 - \frac{1}{2^{9/2}} n \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk} \right)^{3/2} T^{-3/2} + \dots \right], \quad (6.37)$$

$$\mu(T, n) = kT \ln \left[\frac{\lambda^3 n}{2s+1} + \frac{1}{2^{3/2}} \left(\frac{\lambda^3 n}{2s+1} \right)^2 + \dots \right]. \quad (6.38)$$

b) vollständige Entartung

Diese liegt bei $T=0$ vor. In diesem Grenzfall wird aus der Fermi-Funktion

$$\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1} \xrightarrow{(T \rightarrow 0)} \begin{cases} 1 & \text{für } \epsilon \leq \mu, \\ 0 & \text{für } \epsilon > \mu. \end{cases} \quad (6.39)$$

Dies ist ein Ausdruck des Pauliprinzips. In diesem Fall nennt man die Grenzenergie μ die Fermienergie. Für $s=1/2$ ist die Teilchendichte

$$n = \frac{2}{\pi^3} \frac{1}{8} \frac{1}{\hbar^3} \int_{|\mathbf{p}| \leq p_F} d^3 p = \frac{p_F^3}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (6.40)$$

und

$$\frac{p_F^2}{2m} = \epsilon_F := \mu. \quad (6.41)$$

Die Nullpunktsenergie ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{U}{V} &= \frac{2 \times 4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} p^2 dp = \frac{p_F^5 / 2m}{5\pi^2 \hbar^3} = \frac{3}{5} n \epsilon_F \\ &= \frac{1}{5\pi^2 \hbar^3} (2m)^{3/2} \epsilon_F^{5/2}. \end{aligned} \quad (6.42)$$

Der Nullpunktdruck ist

$$p = \frac{2U}{3V} = \frac{2}{5} n \epsilon_F = \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{5} \frac{\hbar^2}{m} n^{5/3}. \quad (6.43)$$

In § III.10 besprechen wir die Anwendung des vollständig entarteten Elektronengases auf die Weissen Folge.

c) starke Entartung ($z \gg 1$)

Für $z \gg 1$ können wir die folgende asymptotische Entwicklung für die Funktionen f_λ (gl. (6.25)) benutzen (siehe Anhang I): Sei $\hat{f}_\lambda(\ln z) := f_\lambda(z)$, dann gilt für $y > 1$

$$\hat{f}_\lambda(y) = y^\lambda \left\{ \sum_{k=0}^N \frac{c_{2k}}{\Gamma(\lambda+1-2k)} y^{-2k} + R_\lambda^{(N)}(y) \right\}, \quad (6.44)$$

wobei c_{2k} die Koeffizienten der Taylor-Reihe

$$\frac{\pi z}{\sin \pi z} = \sum_{k=0}^{\infty} c_{2k} z^{2k} \quad (|z| < 1)$$

sind und $|R_\lambda^{(N)}(y)| \leq C_\lambda^{(N)} y^{-(2N+2)}$ ist.

Die tiefsten Koeffizienten sind (siehe HMP)

$$c_0 = 1, \quad c_2 = \frac{\pi^2}{6}, \quad c_4 = \frac{7\pi^4}{360}, \quad \dots \quad (6.45)$$

Damit erhalten wir speziell

$$f_{3/2}(z) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\ln z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8(\ln z)^2} + \dots \right],$$

$$f_{5/2}(z) = \frac{8}{15\sqrt{\pi}} (\ln z)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8(\ln z)^2} + \dots \right]. \quad (6.46)$$

Dies gilt für (6.26) und (6.29) (für $s = \frac{1}{2}$):

$$\frac{\lambda^3 n}{2} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\ln z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8(\ln z)^2} + \dots \right], \quad (6.47)$$

$$\frac{U}{V} = 3kT \frac{8}{15\sqrt{\pi}} \frac{1}{\lambda^3} (\ln z)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8(\ln z)^2} + \dots \right]. \quad (6.48)$$

Aus (6.47) erhalten wir

$$\begin{aligned} \ln z &= \left[\frac{3\sqrt{\pi}}{4} \frac{\lambda^3 n}{2} \left(1 + \frac{\pi^2}{8(\ln z)^2} + \dots \right)^{-1} \right]^{2/3} \\ &= \frac{E_F}{kT} \left(1 + \frac{\pi^2}{8(\ln z)^2} + \dots \right)^{-2/3} \\ &= \frac{E_F}{kT} \left(1 - \frac{\pi^2}{12(\ln z)^2} + \dots \right). \end{aligned} \quad (6.49)$$

Dabei ist die Fermienergie gemäß (6.40) und (6.41) definiert. Damit können wir $\ln z = \mu/kT$ näher bestimmen. In

In nullter Näherung ist natürlich

$$\frac{\mu^{(0)}}{kT} = \frac{\epsilon_F}{kT} = \frac{\mu(T=0, n)}{kT}.$$

Setzen wir dies rechts in (6.49) ein, so ergibt sich

$$\frac{\mu}{kT} = \frac{\epsilon_F}{kT} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right]. \quad (6.50)$$

Damit erhalten wir für kleine T für die Energiedichte (6.48)

$$\frac{U}{V} = \frac{3}{5} n kT \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^{3/2} \left(\frac{\epsilon_F}{kT} \right)^{5/2} \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right],$$

$$\frac{U}{V} = \frac{3}{5} n \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right]. \quad (6.51)$$

Daraus ergibt sich

$$p = \frac{2}{3} \frac{U}{V} = \frac{2}{5} n \epsilon_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right] \quad (6.52)$$

und

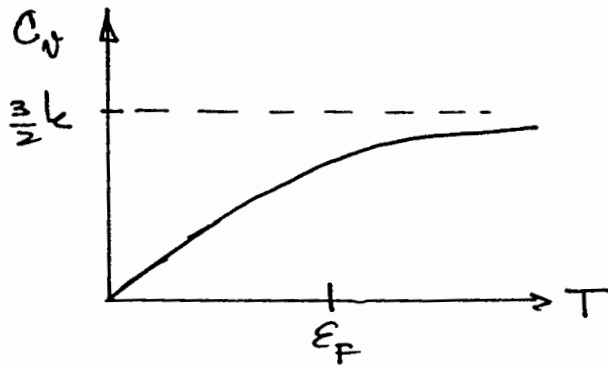
$$C_V/N = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{\pi^2 k^2}{2 \epsilon_F} T + \mathcal{O}(T^2). \quad (6.53)$$

Für die Entropiedichte erhalten wir aus (6.30)

$$\begin{aligned} \frac{S}{V} &= \frac{1}{T} \left(\frac{5}{3} \frac{U}{V} - \mu n \right) = \frac{1}{T} \left[n \epsilon_F \left(1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right) \right. \\ &\quad \left. - n \epsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\epsilon_F} \right)^2 + \dots \right) \right] \\ &= \frac{\pi^2 k^2}{2 \epsilon_F} T + \mathcal{O}(T^2). \end{aligned} \quad (6.54)$$

Somit gilt auch für das Elektronengas der Planck-Nerust'sche Wärmesatz (im Gegensatz zum klassischen idealen Gas).

Qualitativ hat die spezifische Wärme c_v pro Teilchen die Form:



Das Gebiet der Entartung ist durch $T \ll \frac{E_F}{k} \equiv \underline{\text{Ent-}} \underline{\text{artungstemperatur}}$ charakterisiert. In grober Näherung kann man Metalle als Ionengitter auffassen, in dem sich die Leitungselektronen als ideales Fermi-Gas verhalten. Für dieses ist die Entartungstemperatur typisch einige 10^4 K. Bei Zimmertemperatur ist also das Elektronengas stark entartet und liefert einen vernachlässigbar kleinen Beitrag zur spezifischen Wärme. Für $T \rightarrow 0$ dominiert aber die spezifische Wärme der Elektronen, da der Beitrag des Ionengitters nach der Debye-Theorie wie T^3 gegen null geht.

Wesentlich idealer verhalten sich die Elektronen in einem Weissen Zwang (siehe § III. 10).

* * *

6.2 Die Einstein-Kondensation

Wir stellen zunächst für ein endliches ^{nichtrelativistisches} Bosegas die wichtigsten Formeln nochmals zusammen:

$$\Omega = (2s+1) kT \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \ln(1 - z e^{-\beta \epsilon_{\underline{n}}}) \quad (1)$$

$$\bar{N}_{\underline{n},s} = \frac{1}{\frac{1}{z} e^{\beta \epsilon_{\underline{n}}} - 1} \quad (2)$$

$$\bar{N} = (2s+1) \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\underline{n}}} - 1} \quad (3)$$

$$E = (2s+1) \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \frac{\epsilon_{\underline{n}}}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\underline{n}}} - 1} \quad (4)$$

$$pV = \frac{2}{3} E \quad (5)$$

Dabei bezeichnet z wieder die Fugazität, $z = e^{\beta \mu}$.

In diesen Formeln kann man nicht ohne weiteres überall Summen in Integrale verwandeln, da für $z=1$ ($\mu=0$) eine Divergenz auftritt, wenn die Grundzustandsenergie verschwindet. Es empfiehlt sich deshalb, wo dies nötig ist, den Beitrag des Grundzustandes explizit abzuspalten. Z.B. erhalten wir für \bar{N} :

$$\bar{N} = (2s+1) \frac{z}{1-z} + (2s+1) \frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} dp p^2 \frac{1}{z^{-1} e^{\beta p^2/2m} - 1} \quad (6)$$

Dabei haben wir die Summe über alle angeregten Zustände durch ein Integral ersetzt. Wegen des Gewichtungsfaktors p^2 ist es nicht nötig eine untere Grenze > 0 einzuführen. Der

erste Term in (6) ist die mittlere Besetzungszahl des Grundzustandes:

$$\bar{N}_0 = (2s+1) \frac{z}{1-z}. \quad (7)$$

Wir benutzen in folgenden die Funktionen für $|z| < 1$

$$g_\lambda(z) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)_0} \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^\lambda}. \quad (8)$$

Beachte $g_\lambda(1) = \zeta(\lambda)$.

Damit können wir (6) folgendermaßen schreiben

$$\bar{N} = (2s+1) \left[\frac{z}{1-z} + \frac{V}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \right]. \quad (9)$$

Für den Druck haben wir nach (4) und (5)

$$p = \frac{z}{3} (2s+1) \frac{1}{V} \sum_{\underline{n} \in \mathbb{Z}_+^3} \frac{\epsilon_{\underline{n}}}{z^{-1} e^{\beta \epsilon_{\underline{n}}} - 1} \quad (10)$$

Dank des zusätzlichen Faktors $\epsilon_{\underline{n}}$ gibt hier keine Schwierigkeit auf und wir können die Summe durch ein Integral ersetzen:

$$p = (2s+1) \frac{kT}{\lambda^3} g_{5/2}(z). \quad (11)$$

Der Einfachheit halber setze ich in folgenden $s=0$. Nach (8) ist für die Teilchendichte $n = \frac{\bar{N}}{V}$ ($= \bar{v}^{-1}$)

$$n = \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} + \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z). \quad (9')$$

Zu gegebenem n definieren wir eine Übergangstemperatur

$T_c(n)$ — deren Bedeutung bald klar wird — durch

$$n = \frac{1}{\lambda^3(T_c)} g_{3/2}(1). \quad (12)$$

Wegen $g_{3/2}(1) = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612$ ist

$$T_c = \frac{3.31}{mk} \frac{1}{n^2} n^{2/3}. \quad (12')$$

Aus (9') und (12) folgt

$$n = \frac{1}{V} \frac{z}{1-z} = n \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)}. \quad (13)$$

Nun bestimmen wir für gegebene n und T die Fugazität z aus Gl. (9'). Dazu bemerken wir zuerst, dass $g_{3/2}(z)$ in $[0,1]$ qualitativ die folgende Form hat (s. Anhang).

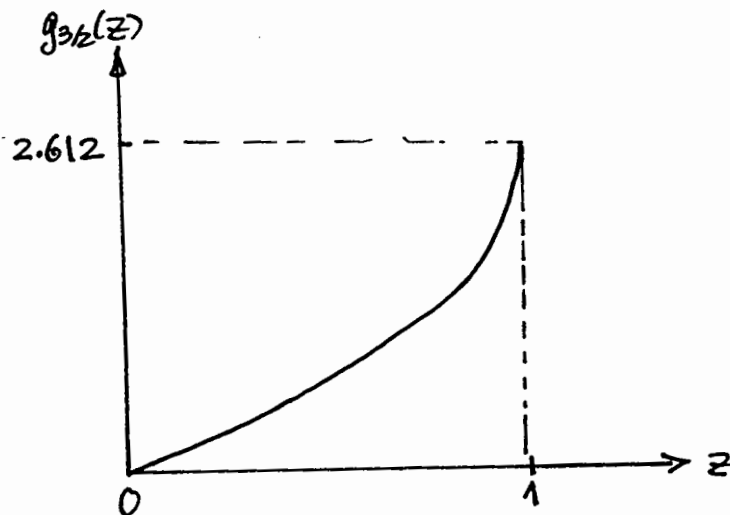


Fig. Die Funktion $g_{3/2}(z)$.

Die Tangente bei $z=1$ ist senkrecht. Die graphische Lösung von (9') in der Form

$$\frac{\lambda^3}{n} = \frac{\lambda^3}{V} \frac{z}{1-z} + g_{3/2}(z) \quad (9')$$

ist in der nächsten Figur gezeigt. Daneben ist z als Funktion von v/λ^3 aufgetragen. Beim Grenzübergang

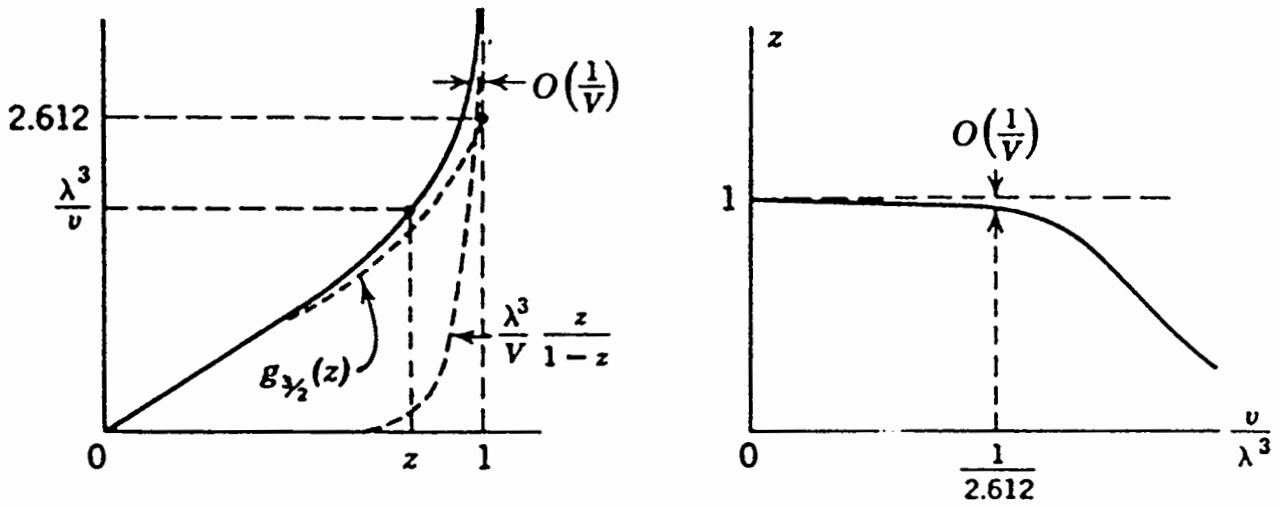


Fig. Links: graphische Lösung von Gl. (9'');

Rechts: Fugazität als Funktion von v/λ^3 .

$V \rightarrow \infty$ erhalten wir

$$z = \begin{cases} 1 & \text{für } \lambda^3/v \geq g_{3/2}(1), \\ \text{Nullstelle von } g_{3/2}(z) = \lambda^3/v & \text{für } \lambda^3/v \leq g_{3/2}(1). \end{cases} \quad (14)$$

Dies ist in der folgenden Figur dargestellt:

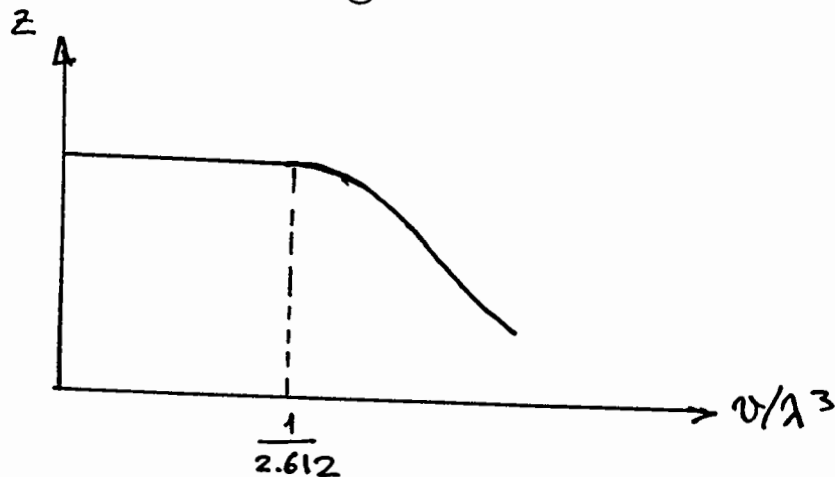


Fig. Fugazität für $V \rightarrow \infty$.

Nun ist folgendes sehr bemerkenswert: Für $T > T_c$ ist zwar $z < 1$ und also nach (7)

$$\frac{\bar{N}_0}{\bar{N}} \xrightarrow{(V \rightarrow \infty)} 0 \quad (T > T_c), \quad (15)$$

aber für $T < T_c$ ist ein endlicher Bruchteil der Teilchen im Grundzustand. In der Tat ergibt sich aus (13)

$$\frac{\bar{N}_0}{\bar{N}} \xrightarrow{(V \rightarrow \infty)} 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad (T \leq T_c). \quad (16)$$

Dies ist die Einstein-Kondensation (oft als Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet, obwohl Bose darüber kein Wort geschrieben hat). Die mittlere Besetzungszahl ist in der folgenden Figur skizziert.

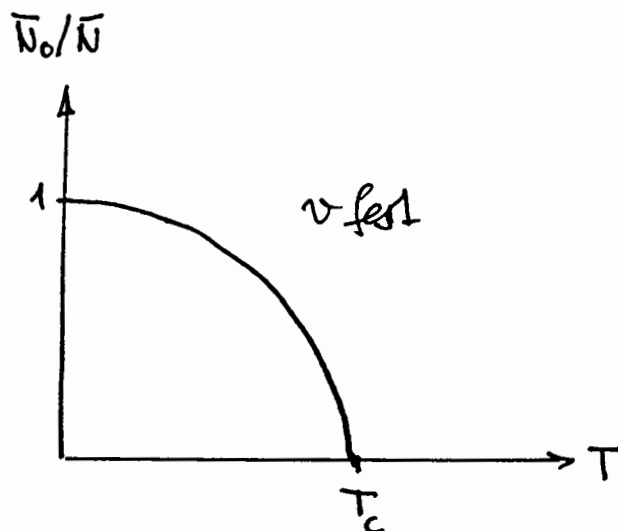


Fig. Bruchteil der Gasatome im Grundzustand für festes $v (= n^{-1})$.

Die Teilchendichte mit positiver Energie ist für $T < T_c$ nach (9) und (14)

$$n_{E>0} = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(1) \stackrel{(12)}{=} n \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} \quad (T \leq T_c). \quad (17)$$

Oberhalb T_c können wir den ersten Term in (9) weglassen:

$$u = \frac{1}{\lambda^3} g_{3/2}(z) \quad (T > T_c) . \quad (18)$$

Für die weitere Diskussion benutzen wir auch das kritische Volumen v_c zu gegebener Temperatur, definiert durch (vgl. mit (12)):

$$v_c = \frac{\lambda^3}{g_{3/2}(1)} . \quad (19)$$

Nach (11) und (14) lautet die Zustandsgleichung

$$p = \frac{kT}{\lambda^3} \begin{cases} g_{5/2}(z) & \text{für } v > v_c , \\ g_{5/2}(1) & \text{für } v < v_c \end{cases} \quad (20)$$

($g_{5/2}(1) = \zeta(5/2) = 1.342$). Dabei ist z durch die 2. Zeile in (14) definiert, d.h.

$$g_{3/2}(z) = \frac{\lambda^3}{v} . \quad (21)$$

Äquivalent dazu haben wir nach (19)

$$\frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} = \frac{v_c}{v} \quad (21')$$

oder nach (12) auch

$$\frac{g_{3/2}(z)}{g_{3/2}(1)} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} . \quad (21'')$$

Die Isothermen sind in der nächsten Figur dargestellt. Der

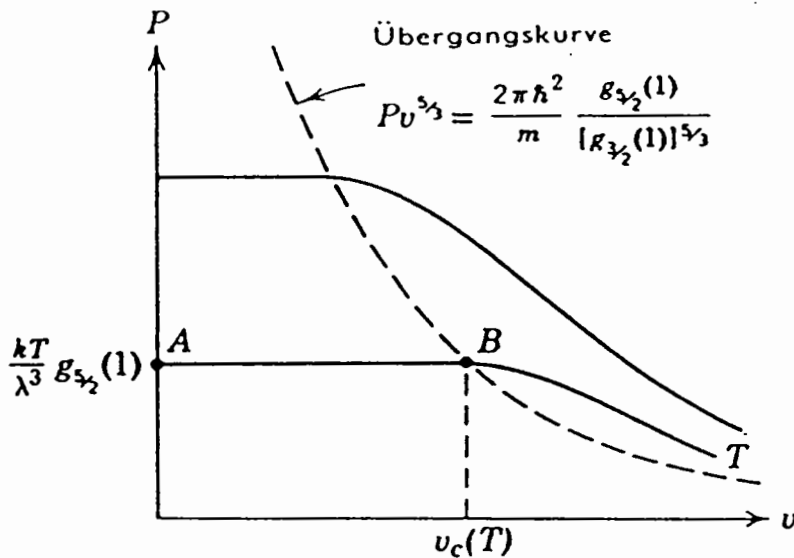


Fig. Isothermen des idealen Bose-Gases

Dabei ist nach (20) für $v < v_c$ nur eine Funktion von T und deshalb sind dort die Isothermen horizontal. Dieses "Kondensationsgebiet" wird in der p - v -Ebene begrenzt durch die Kurve

$$p = \frac{kT}{\lambda^3(T)} g_{5/2}(1), \quad v = v_c(T) = \frac{\lambda^3}{g_{3/2}(1)} \implies p v^{5/3} = \frac{\hbar^2}{2\pi m} \frac{g_{5/2}(1)}{[g_{3/2}(1)]^{5/3}}. \quad (22)$$

Wir nennen

$$p_0(T) = \frac{kT}{\lambda^3(T)} g_{5/2}(1) \quad (23)$$

die Dampfdruckkurve. Aus dieser Gl. folgt die Clausius-Clapeyron-Gleichung

$$\frac{dp_0(T)}{dT} = \frac{5}{2} \frac{k}{\lambda^3(T)} g_{5/2}(1) = \frac{1}{T v_c} \left[\frac{5}{2} kT \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \right]. \quad (24)$$

Wir wollen die rechte Seite im Sinne der phänomenologischen

Theorie als $L/T\Delta v$ (L = latente Übergangswärme pro Teilchen, Δv = Unterschied des spezifischen Volumens zwischen den beiden Phasen) darstellen. Dazu bestimmen wir zuerst Δv . Das Gibbs'sche Potential $g(T, p)$ pro Teilchen ist gleich dem chemischen Potential μ und es gilt $v = \partial g / \partial p = (\partial \mu / \partial p)_T$. Nun ist in der kondensierten Phase $\mu = 0$ und folglich verschwindet dafür das spezifische Volumen. In der Gasphase ist längs der Koexistenzkurve (23) das spezifische Volumen gleich v_c , also haben wir

$$\Delta v = v_c. \quad (25)$$

Damit muss die Übergangswärme L gleich der rechten Klammer in (24) sein:

$$L = \frac{5}{2} kT \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)}. \quad (26)$$

Da diese nicht verschwindet, ist die Einstein-Kondensation ein Phasenübergang 1. Ordnung. (Siehe dazu die nachfolgenden Bemerkungen.)

Wir bestimmen noch einige weitere thermodynamischen Größen für die beiden Phasengebiete. Die Entropie ist nach (5): $S = \frac{1}{T}(U + pV - \mu N) = \frac{1}{T}(\frac{5}{2} pV - \mu N)$, also nach (20)

$$\frac{S}{Nk} = \frac{1}{kT} (\frac{5}{2} p v - \mu) = \begin{cases} \frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - \ln z, & T > T_c \\ \frac{5}{2} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1) & , \quad T < T_c. \end{cases} \quad (27)$$

Für $T \downarrow 0$ verschwindet also die Entropie wie $T^{3/2}$ weshalb der 3. Hauptsatz erfüllt ist. Die kondensierte

Phase (die bei $T=0$ vorhanden ist) hat deshalb keine Entropie. Bei jeder endlichen Temperatur rührt die gesamte Entropie ausschließlich von der gasförmigen Phase her. Der Anteil von Teilchen in dieser Phase ist nach (17) gleich $(T/T_c)^{3/2} = \nu/\nu_c$ (beachte (21') und (21'')). Wenn wir S im Übergangsbereich in der Form

$$\frac{S}{N} = \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} s = \left(\frac{\nu}{\nu_c}\right) s \quad (28)$$

darstellen, finden wir für s

$$s = \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \frac{S}{Z} k \quad (29)$$

und dies ist die Entropie pro Teilchen der gasförmigen Phase. Der Unterschied in der spezifischen Entropie zwischen der gasförmigen und der kondensierten Phase ist deshalb

$$\Delta S = s = \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \frac{S}{Z} k. \quad (30)$$

Wir sehen, dass $T\Delta S$ gerade die Umwandlungswärme (26) ist, was zeigt, dass die Interpretation der Einstein-Kondensation als Phasenübergang erster Ordnung gerechtfertigt ist.

Schlussendlich bestimmen wir noch die innere Energie und die spezifische Wärme. Nach (5) und (20) ist

$$\frac{U}{N} = \frac{3}{2} p \nu = \begin{cases} \frac{3}{2} kT \frac{\nu}{\lambda^3} g_{5/2}(z), & T > T_c \\ \frac{3}{2} kT \frac{\nu}{\lambda^3} g_{5/2}(1), & T < T_c. \end{cases} \quad (31)$$

Die spezifische Wärme $c_v(T, v)$ erhalten wir daraus durch ableiten nach T bei festem v . Für $T < T_c$ ergibt sich sofort

$$c_v(T, v) = k \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(1) \quad (T < T_c). \quad (32)$$

Für $T > T_c$ ist zunächst

$$c_v = k \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) + \frac{3}{2} k T \frac{v}{\lambda^3} \frac{d}{dT} \left(g_{5/2}(z(T)) \right)_v.$$

$$\underbrace{\hspace{10em}}_{g'_{5/2}(z) \frac{dz(T)}{dT}}$$

Hier benutzen wir die Beziehung

$$z \cdot \frac{dg_\lambda(z)}{dz} = g_{\lambda-1}(z). \quad (33)$$

Die Ableitung $\frac{dz}{dT}$ bei festem v ergibt sich aus (21):

$$g'_{3/2}(z) \frac{dz}{dT} = - \frac{3}{2} \frac{\lambda^3}{v} \frac{1}{T} \quad \Rightarrow$$

$$\frac{dz}{dT} = - \frac{3}{2} \frac{\lambda^3}{v} \frac{z}{T g_{1/2}(z)}. \quad (34)$$

Setzen wir dies oben ein, so kommt

$$c_v = k \frac{15}{4} \frac{v}{\lambda^3} g_{5/2}(z) - k \frac{9}{4} \frac{g_{3/2}(z)}{g_{1/2}(z)} \quad (T > T_c). \quad (35)$$

Der qualitative Verlauf der spezifischen Wärme ist in der nächsten Figur skizziert.

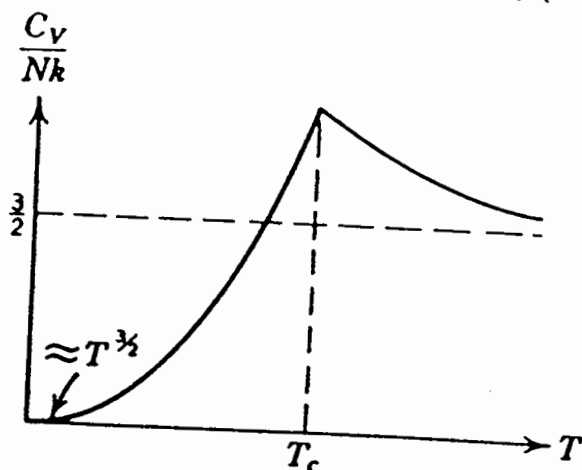


Fig. Spezifische Wärme des idealen Bose-Gases.

In der Nähe des absoluten Nullpunktes verschwindet C_V wie $T^{3/2}$ und nicht wie T^3 , wie in der Debye'schen Theorie. Dies beruht auf dem unterschiedlichen Dispersionsgesetz.

Übungsaufgabe: Berechne den Sprung der Ableitung $\partial C_V / \partial T$ bei T_c . Resultat: Die beiden Ableitungen sind

$$2.89 \frac{k}{T_c} \quad \text{resp.} \quad -0.78 \frac{k}{T_c} .$$

* * *

Die idealen Quantengase stellen natürlich nur einen etwas unphysikalischen Grenzfall dar. Bei der Behandlung von realen Gasen stößt man auf grosse Schwierigkeiten. So gibt es z.B. bis heute noch keine befriedigende Theorie von superfluidem He^4 .

7. Die Debye-Theorie des festen Körpers

Wir betrachten jetzt einen Bereich der Gesamtenergie eines Systems von N Atomen, bei dem diese sich im thermischen Gleichgewicht im festen Zustand befinden. Dies bedeutet, dass die Atome kleine Schwingungen um Ruhelagen $\underline{x}_j^{(0)}$ ausführen, welche das selbstkonsistent erzeugte Potential $U(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N)$ aller Atome minimisieren. In dieser Situation ist es naheliegend, die Bewegungsgleichungen zur Hamiltonfunktion

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N p_j^2 + U(\underline{x}_1, \dots, \underline{x}_N) \quad (7.1)$$

zu linearisieren. Dies ist äquivalent dazu, dass in einer Entwicklung von U um die Gleichgewichtslagen nur der quadratische Teil U_2 mitgenommen wird:

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 U(\underline{x}^{(0)})}{\partial x_i \partial x_j} q_i q_j, \quad q_i \equiv x_i - x_i^{(0)}. \quad (7.2)$$

Die linearisierten Gleichungen werden durch die Hamiltonfunktion

$$H_2 = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N p_j^2 + U_2(q) \quad (7.3)$$

beschrieben. Da U_2 eine quadratische Form ist, kann sie durch eine orthogonale Transformation diagonalisiert werden

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{3N} \mu \omega_{\alpha}^2 Q_{\alpha}^2. \quad (7.4)$$

(Die Eigenwerte sind nicht negativ, da U_2 eine positiv-semidefinite quadratische Form ist.) Werden auch die p 's der gleichen Transformation unterworfen, so liegt eine kanonische Transformation vor^{*)}. Die Hamiltonfunktion ist damit auf "Normalkoordinaten" transformiert

$$H_2 = \sum_{\alpha=1}^{3N} \left(\frac{1}{2m} P_{\alpha}^2 + \frac{m\omega_{\alpha}^2}{2} Q_{\alpha}^2 \right) \quad (7.5)$$

und beschreibt $3N$ ungekoppelte harmonische Oszillatoren.

Für einen einzelnen Oszillator mit Energieeigenwerten $\hbar\omega(u + \frac{1}{2})$ ($u = 0, 1, 2, \dots$) lautet die Zustandssumme

$$\sum_{u=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega(u + \frac{1}{2})} = \frac{e^{-\beta \hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta \hbar\omega}} \quad (7.6)$$

Damit lautet die kanonische Zustandssumme zu (7.5)

$$Z = \prod_{\alpha} \frac{e^{-\beta \hbar\omega_{\alpha}/2}}{1 - e^{-\beta \hbar\omega_{\alpha}}} \quad (7.7)$$

Die zugehörige innere Energie $U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$ ist

$$U = \sum_{\alpha} \left[\frac{\hbar\omega_{\alpha}}{2} + \frac{\hbar\omega_{\alpha}}{e^{\beta \hbar\omega_{\alpha}} - 1} \right] \quad (7.8)$$

^{*)} Allgemeiner ist $(q, p) \mapsto (Aq, (A^T)^{-1}p)$ eine kanonische Transformation für jede lineare Transformation A . In unserem Fall ist A orthogonal und folglich $(A^T)^{-1} = A$.

Um weiter zu kommen, müssen wir nun etwas über das Spektrum $\{\omega_{\underline{x}}\}$ wissen. Im Prinzip ist dieses natürlich durch das Gitterpotential U bestimmt. Nach Debye machen wir nun die folgende, für die Zwecke der Statistik bewährte Näherung zur Bestimmung des Spektrums: Bei nicht zu hohen Temperaturen spielen vor allem die kleinräumigen Ausregungen der Oszillatoren niedriger Frequenzen die Hauptrolle. Die zugehörigen langwelligeren Eigenschwingungen sind Schallwellen, deren Wellenlänge gross gegenüber dem Atomabstand des Gitters ist. Für diese Schwingungsmoden sind die Einzelheiten der Gitterstruktur belanglos und wir können diese durch die Kontinuumstheorie des elastischen Mediums beschreiben. Nach dieser gilt für den Auslenkungswektor $\underline{u}(\underline{x}, t)$ am Ort \underline{x} des Mediums die Grundgleichung^{*)}

$$\rho \partial_t^2 \underline{u} = \mu \Delta \underline{u} + (\lambda + \mu) \nabla (\nabla \cdot \underline{u}) \quad (7.9)$$

(ρ = Dichte, λ, μ = Lamésche Elastizitätskonstanten).

Für eine ebene Welle

$$\underline{u}(\underline{x}, t) = \underline{a} e^{i(\underline{k} \cdot \underline{x} - \omega t)} \quad (7.10)$$

gibt (7.9) die Bedingung

$$(\rho \omega^2 - \mu k^2) \underline{a} - (\lambda + \mu) (\underline{k} \cdot \underline{a}) \underline{k} = 0. \quad (7.11)$$

Für transversale Wellen $\underline{a} \perp \underline{k}$ führt dies zur Disper-

*) Siehe z.B. Landau-Lifshitz Bd. VII, speziell § 22.

Stausbedingung

$$\omega = c_t |\underline{k}|, \quad c_t = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}}. \quad (7.12)$$

c_t ist die transversale Schallgeschwindigkeit. Für longitudinale Wellen $\underline{a} \parallel \underline{k}$ erhalten wir

$$\omega = c_l |\underline{k}|, \quad c_l = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}}. \quad (7.13)$$

Für ein Volumen $V = L^3$ mit periodischen Randbedingungen sind nur die Wellenzahlen

$$\underline{k} = \frac{2\pi \underline{n}}{L}, \quad \underline{n} \in \mathbb{Z}^3 \quad (7.14)$$

zugelassen. Die Anzahl der transversalen (longitudinalen) Moden im Frequenzbereich $[\omega, \omega + d\omega]$ ist (für großes V)

$$2 \times \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{c_t^3}, \quad \text{bzw.} \quad \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi \omega^2 d\omega}{c_l^3}. \quad (7.15)$$

Der Faktor 2 im ersten Ausdruck berücksichtigt, dass es zwei linear unabhängige transversale Moden für jedes \underline{k} gibt. Die Zustandsdichte ist also

$$g(\omega) d\omega = 3 \times \frac{V}{2\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega \quad (7.16)$$

mit

$$\frac{1}{c^3} := \frac{1}{3} \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right). \quad (7.17)$$

(c ist eine Art mittlerer Schallgeschwindigkeit.) Natürlich müssen wir das Spektrum bei einer Grenzfrequenz ω_D abbrechen,

da insgesamt nur $3N$ Moden existieren:

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N \Rightarrow \omega_D^3 = 6\pi^2 c^3 \frac{N}{V}. \quad (7.18)$$

Die Debye-Frequenzdichte lautet daher

$$g_D(\omega) d\omega = \begin{cases} \frac{9N \omega^2 d\omega}{\omega_D^3} & \text{für } 0 \leq \omega \leq \omega_D, \\ 0 & \text{für } \omega > \omega_D. \end{cases} \quad (7.19)$$

In der Debye-Näherung lautet jetzt die innere Energie

$$(7.8) \quad U = U_0 + \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} g_D(\omega) d\omega, \quad (7.20)$$

wo U_0 die Nullpunkenergie ist:

$$U_0 = \frac{9}{8} Nk \Theta_D, \quad \Theta_D := \frac{\hbar\omega_D}{k} : \text{Debye-Temperatur.} \quad (7.21)$$

Wir erhalten

$$\boxed{U = U_0 + 3NkT D\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)} \quad (7.21)$$

mit der Debye-Funktion

$$D(y) := \frac{3}{y^3} \int_0^y \frac{x^3}{e^x - 1} dx. \quad (7.22)$$

Näherungsweise gilt (Übung)

$$D(y) \approx \begin{cases} \frac{4}{5} y^{-3} & \text{für } y \gg 1, \\ 1 & \text{für } y \ll 1. \end{cases} \quad (7.23)$$

Entsprechend haben wir für die innere Energie

$$U \approx \begin{cases} \frac{3\pi^4}{5} Nk \frac{T^4}{\Theta_D^3} + U_0 & \text{für } T \ll \Theta_D, \\ 3NkT + U_0 & \text{für } T \gg \Theta_D \end{cases} \quad (7.24)$$

und für die spezifische Wärme

$$\frac{C_V}{N} \approx \begin{cases} k \cdot \frac{12\pi^4}{5} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 & \text{für } T \ll \Theta_D, \\ 3k & \text{für } T \gg \Theta_D. \end{cases} \quad (7.25)$$

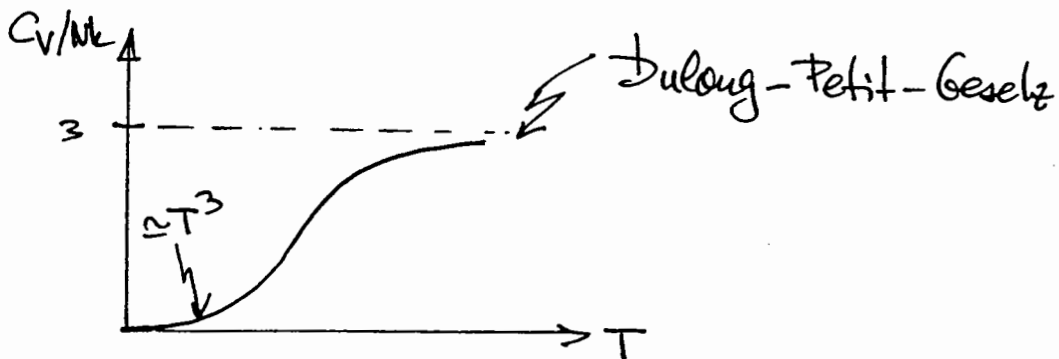


Fig. Spezifische Wärme eines Kristallgitters in der Debye-Theorie.

Dieses bestimmte T^3 -Gesetz bei tiefen Temperaturen stimmt mit der Erfahrung sehr gut überein. Der 3. Hauptsatz ist danach erfüllt. Für wesentlich höhere Temperaturen als die Debye-Temperatur gilt das Gesetz von Dulong-Petit.

Wir sehen auch, dass sich die quantisierten Gitterschwingungen wie ein ideales Bose-Gas mit verschwindendem chemischen Potential verhalten. Dieses sog. Phononengas verhält sich also sehr ähnlich wie ein Photongas.

8. Die halbklassische Näherung

Wir zeigen in diesem Abschnitt, dass die kanonische Zustandssumme in einer Entwicklung nach \hbar in führender Ordnung gleich der in früheren Kapiteln betrachteten halbklassischen Näherung ist (s. z.B. (I.6.7)). Wir zeigen dies über die sog. Bloch-Gleichung. (Für einen anderen Zugang siehe Huang, § 9.2.)

Wir sperren das Gas wieder in einen Kasten ein und berechnen die Spur von $e^{-\beta H}$ mit Hilfe der Basis

$$\begin{aligned} \Phi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N} &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\pi \in \mathcal{J}_N} \delta_{\pi} u_{\mathbf{k}_1} \otimes \dots \otimes u_{\mathbf{k}_N} \\ u_{\mathbf{k}}(\underline{x}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \underline{x}} \end{aligned} \quad (8.1)$$

(δ_{π} ist die Signatur der Permutation π für Fermionen und gleich eins für Bosonen). Für grosse V dürfen wir $\sum_{\mathbf{k}}$ durch $\frac{V}{h^3} \int d^3\mathbf{p}$ ersetzen:

$$\text{Sp} e^{-\beta H} = \frac{1}{N!} \frac{V^N}{h^{3N}} \int d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N (\Phi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N} e^{-\beta H} \Phi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N}). \quad (8.2)$$

Der Vorfaktor $(N!)^{-1}$ rührt davon her, dass eine Permutation der Impulse in $\Phi_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_N}$ denselben Zustand gibt. Einsetzen von (8.1) in (8.2) gibt

$$\begin{aligned} \text{Sp} e^{-\beta H} &= \frac{1}{h^{3N} (N!)^2} \sum_{\pi, \pi'} \int d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{x} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \sum_j \mathbf{k}_{\pi'(j)} \cdot \underline{x}_j\right] \\ &\quad \times e^{-\beta H} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_j \mathbf{k}_{\pi(j)} \cdot \underline{x}_j\right]. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Wir benutzen die Abkürzungen

$$\chi_{\pi}(x, p) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \sum_j p_{\pi(j)} \cdot x_j \right] \quad (8.4)$$

und

$$e^{-\beta H} \chi_{\pi} =: v_{\pi} \quad (8.5)$$

Die Funktion v_{π} erfüllt offensichtlich die Bloch'sche Gleichung

$$\frac{\partial v_{\pi}}{\partial \beta} + H v_{\pi} = 0 \quad (8.6)$$

und die Anfangsbedingung

$$v_{\pi} |_{\beta=0} = \chi_{\pi} \quad (8.7)$$

Wir benötigen nun eine Entwicklung, in der Quanteneffekte als kleine Korrekturen erscheinen. Physikalisch entspricht dies einer Hochtemperaturentwicklung. Eine Lösung der Bloch'schen Gleichung, welche dem entspricht, wurde von Kirkwood gefunden.

Wir machen den Ansatz

$$v_{\pi} = w_{\pi} \chi_{\pi} e^{-\beta H_c(x, p)} \quad (8.8)$$

wo H_c die klassische Hamiltonfunktion ist. Aus der Bloch'schen Gleichung leiten wir nun eine Gl. für $w(x, \beta)$ her. Es muss gelten

$$H \left[w_{\pi} \chi_{\pi} e^{-\beta H_c} \right] - w_{\pi} \chi_{\pi} H_c e^{-\beta H_c} + \chi_{\pi} e^{-\beta H_c} \frac{\partial w_{\pi}}{\partial \beta} = 0 \quad (8.9)$$

Der Hamiltonoperator habe die übliche Form:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^N \Delta_j + U(x)$$

$$\equiv H_0 + U. \quad (8.10)$$

Die klassische Hamiltonfunktion zerlegen wir entsprechend

$$H_c = E_{kin} + U. \quad (8.11)$$

Setzen wir dies in (8.9) ein, so kommt zunächst

$$\begin{aligned} H_0 [w_\pi \chi_\pi e^{-\beta H_c}] + U w_\pi \chi_\pi e^{-\beta H_c} - U w_\pi \chi_\pi e^{-\beta H_c} \\ - w_\pi \chi_\pi E_{kin} e^{-\beta H_c} + \chi_\pi e^{-\beta H_c} \frac{\partial w_\pi}{\partial \beta} = 0. \end{aligned}$$

Da der Operator H_0 nur auf die Koordinaten wirkt und E_{kin} nur von den Impulsen abhängt, hebt sich der Faktor $e^{-\beta E_{kin}}$ heraus, und wir erhalten

$$H_0 [w_\pi \chi_\pi e^{-\beta U}] - w_\pi \chi_\pi E_{kin} e^{-\beta U} + \chi_\pi e^{-\beta U} \frac{\partial w_\pi}{\partial \beta} = 0. \quad (8.12)$$

Für das erste Glied der linken Seite haben wir

$$\begin{aligned} H_0 [w_\pi \chi_\pi e^{-\beta U}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i \cdot \nabla_i [w_\pi \chi_\pi e^{-\beta U}] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum \nabla_i \cdot [\chi_\pi \nabla_i (e^{-\beta U} w_\pi) + e^{-\beta U} w_\pi \nabla_i \chi_\pi] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\chi_\pi \sum \Delta_i (e^{-\beta U} w_\pi) + 2 \sum (\nabla_i \chi_\pi) \cdot \nabla_i (e^{-\beta U} w_\pi) \\ &\quad + e^{-\beta U} w_\pi \sum \Delta_i \chi_\pi]. \end{aligned} \quad (8.13)$$

Nun folgt aus der Definition (8.4)

$$-i\hbar \sum_{j=1}^N \nabla_j \chi_{\pi} \cdot \nabla_j = \chi_{\pi} \left(\sum_j p_{\pi(j)} \nabla_j \right)$$

und ferner gilt

$$H_0 \chi_{\pi} = E_{\text{kin}} \chi_{\pi}.$$

Damit erhalten wir aus (8.13)

$$\begin{aligned} H_0 [w_{\pi} \chi_{\pi} e^{\beta U}] &= -\frac{\hbar^2}{2m} \chi_{\pi} \sum \Delta_j (e^{-\beta U} w_{\pi}) \\ &= i\frac{\hbar}{m} \chi_{\pi} \left[\sum_{j=1}^N p_{\pi(j)} \cdot \nabla_j (e^{-\beta U} w_{\pi}) \right] + e^{-\beta U} w_{\pi} E_{\text{kin}} \chi_{\pi}. \end{aligned}$$

Durch Einsetzen dieses Ausdrucks in (8.12) folgt schliesslich die gesuchte Differentialgleichung für w :

$$\frac{\partial w_{\pi}}{\partial \beta} - e^{\beta U} \left[\frac{i\hbar}{m} \left(\sum_{j=1}^N p_{\pi(j)} \cdot \nabla_j (e^{-\beta U} w_{\pi}) \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_j \Delta_j (e^{-\beta U} w_{\pi}) \right] = 0. \quad (8.14)$$

Die Randbedingung lautet nach (8.7)

$$w|_{\beta=0} = 1. \quad (8.15)$$

Beides zusammen ist äquivalent zur Integralgleichung

$$\begin{aligned} w_{\pi} &= 1 + \frac{i\hbar}{m} \int_0^{\beta} e^{U\tau} \left(\sum_{j=1}^N p_{\pi(j)} \nabla_j (e^{-\tau U} w_{\pi}) \right) d\tau \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^{\beta} e^{U\tau} \sum_{j=1}^N \Delta_j (e^{-\tau U} w_{\pi}) d\tau. \end{aligned} \quad (8.16)$$

Diese Gleichung lösen wir in einer Entwicklung nach \hbar :

$$w = \sum_{k=0}^{\infty} \hbar^k w^{(k)}. \quad (8.17)$$

Es ergibt sich

$$w_{\pi}^{(0)} = 1,$$

(8.18a)

$$w_{\pi}^{(1)} = -i \frac{\beta^2}{2m} \sum_{j=1}^N p_{\pi(j)} \nabla_j \cdot U,$$

(8.18b)

$$w_{\pi}^{(2)} = \frac{-1}{2m} \left\{ \frac{\beta^2}{2} \sum_j \Delta_j U - \frac{\beta^2}{3} \left[\sum_j (\nabla_j U)^2 + \frac{1}{m} \left(\sum p_{\pi(j)} \nabla_j \right)^2 U \right] \right.$$

$$\left. + \frac{\beta^4}{4m} \left(\sum_j p_{\pi(j)} \nabla_j U \right)^2 \right\}, \text{ etc.}$$

(8.18c)

Entsprechend haben wir für unseren Ansatz (8.8) die Reihenentwicklung

$$v_{\pi} = \chi_{\pi} e^{-\beta H_c} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} w_{\pi}^{(k)}$$

(8.19)

und für die Zustandssumme (8.3)

$$\begin{aligned} \text{Sp} e^{-\beta H} &= \frac{1}{h^{3N} (N!)^2} \int dp dx e^{-\beta H_c} \sum_{\pi, \pi'} \exp \left[\frac{i}{h} \sum_j (p_{\pi(j)} - p_{\pi'(j)}) \cdot x_j \right] \\ &\quad \times \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} w_{\pi}^{(k)}. \end{aligned}$$

(8.20)

Nun fassen wir in der Summe über π und π' zunächst die Terme zusammen, in denen $\pi = \pi'$ ist. Diese Zahl ist $N!$ und der Exponentialfaktor in (8.20) ist für diese Beiträge gleich Eins. Nach Integration über die Impulse liefern alle Terme das gleiche Resultat. Deshalb dürfen wir für diese Beiträge die Permutation π in den $w_{\pi}^{(k)}$ gleich der Identität wählen ($w_{\pi=id}^{(k)} \equiv w^{(k)}$).

Als nächstes fassen wir alle Terme zusammen, bei denen sich π und π' nur durch die Permutation von zwei Teilchen

unterscheiden. In diesem Falle bleiben im Exponentialfaktor in (8.20) die Glieder mit den Koordinaten und Impulsen dieser Teilchen stehen. Für ein bestimmtes Teilchenpaar (j,l) gibt es — was die Wirkung von π und π' auf (k,l) betrifft — die folgenden Möglichkeiten:

π	π'	Exponent
Id	$j \leftrightarrow l$	$(p_j - p_l) \cdot x_j + (p_l - p_j) \cdot x_l = (p_j - p_l) \cdot (x_j - x_l)$
$j \leftrightarrow l$	Id	$(p_l - p_j) \cdot x_j + (p_j - p_l) \cdot x_l = -(p_j - p_l) \cdot (x_j - x_l)$

Für die zugehörigen $w_{\pi}^{(k)}$ schreiben wir $w_{j\ell}^{(k)}$, bzw. $w_{\ell j}^{(k)}$. Die spezielle Wahl des Paares ist natürlich ohne Bedeutung.

Man könnte in dieser Weise fortfahren. Wir wollen aber die höheren Terme nicht weiter diskutieren. Nach diesen Ausführungen ergibt sich aus (8.20)

$$\text{Sp} e^{-\beta H} = \frac{1}{h^{3N} N!} \int dp dx e^{-\beta H_c} \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} w^{(k)} + \frac{1}{2N!} \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{j \neq l} \left[e^{\frac{i}{\hbar} (p_j - p_l) \cdot (x_j - x_l)} \sum_k \frac{1}{k!} w_{j\ell}^{(k)} + e^{-\frac{i}{\hbar} (p_j - p_l) \cdot (x_j - x_l)} \sum_k \frac{1}{k!} w_{\ell j}^{(k)} \right] + \dots \right\}.$$

Darin setzen wir die Werte $w_{\pi}^{(k)}$ in (8.18) ein und be-^(8.21) trachten dabei für die identische Permutation die drei ersten Terme, für den zweiten Teil des obigen Ausdrucks dagegen nur die beiden ersten Terme. Nach der Integration über die Impulse kommt ($\gamma_{j\ell} = |x_j - x_l|$):

$$\text{Sp} e^{-\beta H} = \lambda^{-3N} \frac{1}{N!} \int dx e^{-\beta U} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2 \beta^2}{12m} \sum_{j=1}^N [\Delta_j U - \frac{\beta}{2} (\nabla_j U)^2] + \dots \right\} \pm$$

$$\pm \frac{1}{N!} \sum_{j \neq l} e^{-u r_{j\ell}^2 / \beta \hbar^2} \left[1 + \beta (x_j - x_\ell) (\nabla_j U - \nabla_\ell U) + \dots \right] + \dots \} .$$

Der letzte Term verschwindet für $\lambda \rightarrow 0$ exponentiell. Wir erhalten also schliesslich (8.22)

$$\boxed{\text{Sp } e^{-\beta H} = \frac{1}{h^{3N} N!} \int e^{-\beta H} d\Gamma_N + O(\lambda^2)} . \quad (8.23)$$

Die Korrekturterme zur semiklassischen Näherung sind dabei gleich

$$-\frac{\hbar^2 \beta^2}{12u} \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int e^{-\beta U} \sum_{j=1}^N \left[\Delta_j U - \frac{\beta}{2} (\nabla_j U)^2 \right] d^3x . \quad (8.24)$$

Wir haben also

$$Z = Z_{\text{klassisch}} \left[1 + \hbar^2 \langle \chi_2 \rangle \right] . \quad (8.25)$$

Dabei ist $\langle \chi_2 \rangle$ der klassische Erwartungswert von

$$\chi_2 := \frac{\beta^3}{24} \frac{1}{u} \sum_i (\nabla_i U)^2 - \frac{\beta^2}{12} \frac{1}{u} \sum_i \Delta_i U . \quad (8.26)$$

Für die freie Energie ergibt sich daraus

$$-\beta F = -\beta F_{\text{kl}} + \ln \underbrace{\left[1 + \hbar^2 \langle \chi_2 \rangle \right]}_{\approx 1 + \hbar^2 \langle \chi_2 \rangle} ,$$

$$\text{d.h.} \quad F = F_{\text{kl}} - \frac{\hbar^2}{\beta} \langle \chi_2 \rangle . \quad (8.27)$$

Ja für die Mittelwerte, welche in $\langle X_2 \rangle$ eingehen, folgendes gilt

$$\langle \Delta_i U \rangle = \beta \langle (\nabla_i U)^2 \rangle$$

(partielle Integration und Vernachlässigung von Oberflächeneffekten), so gilt auch

$$F = F_{cl} + \frac{\hbar^2 \beta^2}{24} \frac{1}{m} \sum_i \langle (\nabla_i U)^2 \rangle. \quad (8.28)$$

Die Korrektur des klassischen Wertes ist also immer positiv und durch das mittlere Quadrat der auf die Teilchen wirkenden Kräfte bestimmt. Diese Korrektur nimmt mit zunehmender Teilchenmasse und abnehmender Temperatur ab, wie zu erwarten war.

* * *

9. Der Magnetismus des Elektronengases

A. Schwache Felder

Für schwache Magnetfelder setzt sich die Magnetisierung des Elektronengases aus zwei unabhängigen Teilen zusammen:

(i) Das magnetische Moment des Elektrons führt zum Paulischen Paramagnetismus (W. Pauli, 1927).

(ii) Die Quantisierung der Bahnbewegung^{*)} der Elektronen züht den Landauschen Diamagnetismus nach sich (Landau, 1930).

Im folgenden berechnen wir die zugehörigen Suszeptibilitäten, wobei wir das Elektronengas als stark entartet annehmen (siehe § 6.1c), d.h. es gelte $kT \ll \epsilon_F$. Unter schwachen Magnetfeldern \mathcal{B} verstehen wir solche, für die $\mu_B \mathcal{B} \ll kT$ ist ($\mu_B = \text{Bohrsches Magneton} = \hbar e c / 2 m c$).

Wir arbeiten in der großkanonischen Gesamtheit. Wenn das großkanonische Potential $\Omega(T, V, \mu, \mathcal{B})$ bekannt ist, ergibt sich die Magnetisierung aus

$$M = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mathcal{B}}. \quad (9.1)$$

Wir behandeln nun einzeln die paramagnetischen und dia-

*) Nach dem Van-Leeuwenstein Theorem gibt es keinen klassischen Diamagnetismus (s. Übungen).

magnetischen Anteile.

a) paramagnetische Suszeptibilität

Die Spinenergie eines einzelnen Elektrons im Magnetfeld ist gleich $\pm \mu_B B$. In der großkanonischen Zustandssumme (6.8) sind deshalb die Einteilchenenergien $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m \pm \mu_B B$. Nun gehen diese aber nur in der Kombination $e^{-\mu}$ ein. Deshalb gilt - was die μ -Abhängigkeit von Ω betrifft -

$$\Omega(\mu) = \frac{1}{2} \Omega_0(\mu + \mu_B B) + \frac{1}{2} \Omega_0(\mu - \mu_B B), \quad (9.2)$$

wenn $\Omega_0(\mu)$ das Potential für $B=0$ bezeichnet.

Für schwache Felder haben wir

$$\Omega(\mu) \approx \Omega_0(\mu) + \frac{1}{2} \mu_B^2 B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} + \dots \quad (9.3)$$

und somit

$$M = -B \mu_B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} = - \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} \quad (9.4)$$

Die paramagnetische Suszeptibilität ist also

$$\chi_{para} = \mu_B^2 \left(\frac{\partial N}{\partial \mu} \right)_{T,V} \quad (9.5)$$

Sehen wir hier noch die Formel für den vollständig entarteten Fall

$$N = V \frac{(2m\mu)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \quad (9.6)$$

ein (s. (6.40), (6.41)), so kommt

$$\chi = V \mu_B^2 \frac{(2m)^{3/2} \sqrt{\mu}}{2\pi^2 \hbar^3} = V \mu_B^2 \frac{p_F m}{\pi^2 \hbar^3} \quad (9.7)$$

b) diamagnetische Suszeptibilität

Die Energieniveaus der Bahnbewegung eines Elektrons im Magnetfeld sind*)

$$\epsilon = \frac{p_z^2}{2m} + (2n+1) \mu_B B, \quad n=0,1,2,\dots, \quad p_z \in (-\infty, +\infty). \quad (9.8)$$

Bei gegebenem n ist die Zustandsdichte in der kontinuierlichen Variablen p_z gleich*)

$$2 \frac{V |e| B}{(2\pi \hbar)^2 c} dp_z. \quad (9.9)$$

Aus dem Ausdruck (6.9) für Ω wird deshalb

$$\Omega = 2 \mu_B B \sum_{n=0}^{\infty} f(\mu - (2n+1) \mu_B B), \quad (9.10)$$

mit

$$f(\mu) = - \frac{kT m V}{2\pi^2 \hbar^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu}{kT} - \frac{p_z^2}{2m kT} \right) \right] dp_z \quad (9.11)$$

Die Summe in (9.10) können wir mit der Formel

*) Siehe z.B. Landau-Lifshitz, Bd. III, § 112.

von Euler-McLaurin^{*)} auswerten. In genügender Genauigkeit ist danach

$$\sum_{n=0}^{\infty} F(n + \frac{1}{2}) \approx \int_0^{\infty} F(x) dx + \frac{1}{24} F'(0). \quad (9.12)$$

Die Bedingung für die Gültigkeit dieser Näherung ist, dass sich F im Intervall $(n, n+1)$ relativ langsam ändert. Dies bedeutet für die Funktion f in (9.11), dass das Feld schwach im oben erklärten Sinne ist ($\mu_B B \ll kT$).

Wir erhalten damit

$$\begin{aligned} \Omega &= 2\mu_B B \int_0^{\infty} f(\mu - 2\mu_B B x) dx + \frac{2\mu_B B}{24} \left. \frac{\partial f(\mu - 2\mu_B B x)}{\partial x} \right|_{x=0} \\ &= \int_{-\infty}^{\mu} f(x) dx - \frac{(2\mu_B B)^2}{24} \frac{\partial f(\mu)}{\partial \mu}. \end{aligned}$$

Da der erste Term unabhängig von B ist, muss er gleich $\Omega_0(\mu)$ sein. Deshalb gilt

$$\Omega = \Omega_0(\mu) - \frac{1}{6} \mu_B^2 B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0(\mu)}{\partial \mu^2}. \quad (9.13)$$

Der Vergleich mit (9.3) zeigt

$$\underline{\chi_{dia}} = \frac{1}{3} \mu_B^2 \frac{\partial^2 \Omega_0}{\partial \mu^2} = \underline{-\frac{1}{3} \chi_{para}}.$$

Die totale Suszeptibilität ist somit

$$\chi = \chi_{para} + \chi_{dia} = \frac{2}{3} \chi_{para}. \quad (9.14)$$

*) Siehe z.B. W.I. Smitnow, *Lehrbuch der höheren Mathematik*, speziell § 76 von Bd. III, 2.

B. Starke Felder

Wir lassen nun Felder zu für die $\mu_B B \gtrsim kT$ ist, es soll aber immer noch $\mu_B B \ll \mu$ gelten. Unter diesen Bedingungen können die Effekte der Quantisierung der Bahnbewegung und des Spins nicht mehr gebremst werden. Die Eigenwerte der z -Elektronenzustände sind jetzt

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{kz}{2m} + \underbrace{(2n+1)\mu_B B}_{= 2n\mu_B B} \pm \mu_B B, \quad n = 0, 1, \dots; \\
 &= 2n\mu_B B, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (9.15)
 \end{aligned}$$

↑ einfach entartet ↑ zweifach entartet

Wie oben erhalten wir für das großkanonische Potential

$$\Omega = 2\mu_B B \left\{ \frac{1}{z} f(\mu) + \sum_{n=1}^{\infty} f(\mu - 2\mu_B B n) \right\}. \quad (9.16)$$

Die weitere Auswertung dieses Ausdrucks ist etwas kompliziert. Für Einzelheiten verweise ich auf Landau-Lifschitz, Bd. V, § 60. Zum Verständnis des sog. de Haas-van Alphen-Effektes wollen wir hier nur den Grenzfall $T \rightarrow 0$ näher betrachten.

Um die Diskussion weiter zu vereinfachen, vernachlässigen wir ferner die Bewegung in der z -Richtung. Für das zweidimensionale Elektronengas lauten die Energieniveaus nach (9.8)

$$E_\nu = 2\mu_B B \left(\nu + \frac{1}{2} \right), \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (9.12)$$

mit den Entartungsgraden (siehe (9.9))

$$g = \frac{eB}{hc} L^2. \quad (9.18)$$

Es sei B_0 dasjenige Feld, oberhalb welchem alle N Elektronen im Grundzustand sein können: $N = \frac{eB_0}{hc} L^2$. Dieses ist also

$$B_0 = n \frac{hc}{e}, \quad n = \frac{N}{L^2} \text{ (Elektronendichte)}, \quad (9.19)$$

und (9.18) kann so geschrieben werden

$$g = \frac{B}{B_0} \cdot N. \quad (9.20)$$

Mit sinkendem $B < B_0$ müssen (für $T=0$) Elektronen teilweise in immer höhere Energieniveaus übergehen. In einer ersten Stufe, solange $g < N < 2g$, d.h. $\frac{1}{2} < B/B_0 < 1$, ist $\nu=0$ voll und $\nu=1$ teilweise besetzt. Allgemein sind für

$$\frac{1}{\nu+2} < \frac{B}{B_0} < \frac{1}{\nu+1}$$

alle Niveaus $\leq \nu$ voll besetzt und das Niveau $\nu+1$ ist teilweise besetzt. Die Energie des Grundzustandes der N Elektronen ist dann

$$E_0(B) = g \sum_{\nu'=0}^{\nu} \epsilon_{\nu'} + [N - (\nu+1)g] \epsilon_{\nu+1},$$

also

$$\frac{E_0(B)}{N} = \mu_B \frac{B}{B_0} \left[2\nu+3 - (\nu+1)(\nu+2) \frac{B}{B_0} \right]. \quad (9.21)$$

Daraus ergibt sich für die Magnetisierung ($x := B/B_0$)

$$M = \begin{cases} -\mu_B N & (x > 1) \\ \mu_B N \left[2(\nu+1)(\nu+2)x - (2\nu+3) \right], & \text{für } \frac{1}{\nu+2} < x < \frac{1}{\nu+1}. \end{cases} \quad (9.22)$$

und für die Suszeptibilität

$$X = \begin{cases} 0 & (x > 1) \\ \frac{2\mu_B N}{B_0} (\nu+1)(\nu+2) & \left(\frac{1}{\nu+2} < x < \frac{1}{\nu+1}\right) \end{cases} \quad (9.23)$$

Das sprunghafte Verhalten (s. Fig.) wird durch die z-Bewegung etwas geglättet, aber die rasche Veränderlichkeit von X an den kritischen Stellen bleibt bestehen. Dieser de Haas - van Alphen - Effekt ist für die Suszeptibilität der Leitungselektronen in metallischen Leitern bei tiefen Temperaturen und hohen Magnetfeldern beobachtet worden. (Konsultiere ein Buch über Festkörperphysik.)

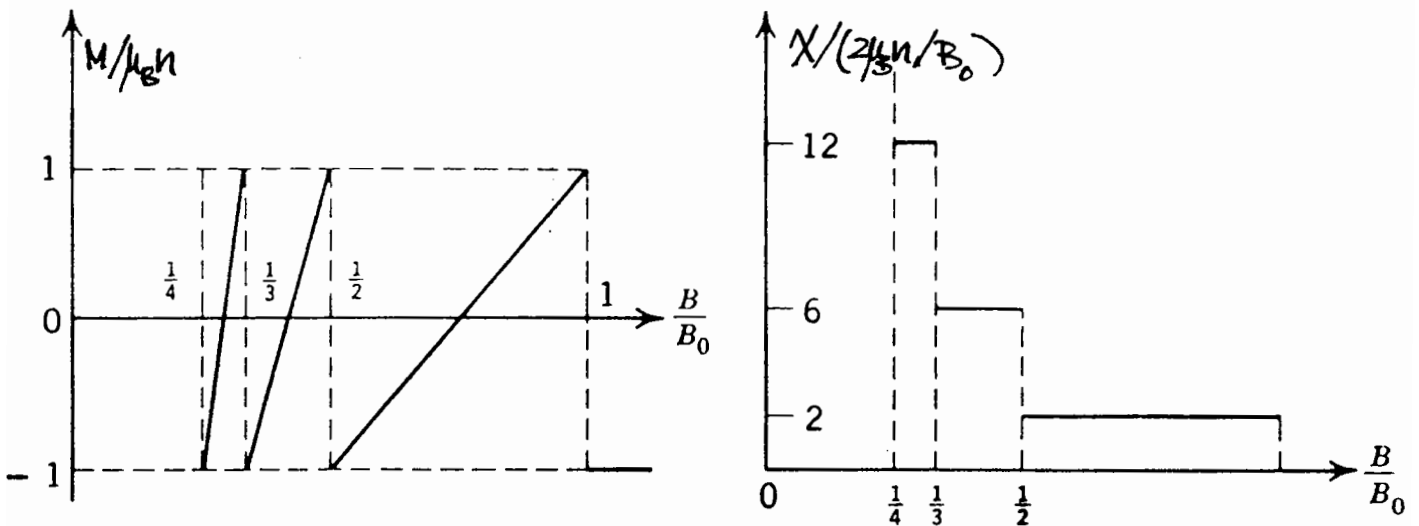


Fig. M und X gemäss (9.22), (9.23) (zum de Haas - van Alphen - Effekt).

* * *

10. Weiße Zwerg

Durch die Arbeiten von W. Adams war um 1925 eindeutig gesichert, dass Sirius B eine enorme Dichte von etwa 10^6 g/cm^3 hat.* Dank der neuen Quantenmechanik wurde nun sehr schnell klar, in welchem Zustand sich die Materie in einem weißen Zwerg befindet.

Am 26. August 1926 wurde die Dirac'sche Arbeit, welche die Fermi-Dirac Verteilung enthält, der Royal Society durch Fowler mitgeteilt. Bereits am 3. November unterbreitete Fowler der Royal Society eine eigene Arbeit, in welcher er die Quantenstatistik von identischen Teilchen systematisch darstellte und dabei die bekannte Darwin-Fowler Methode entwickelte. Kurz darauf, am 10. Dezember, trug er der Royal Astronomical Society eine neue Arbeit mit dem Titel 'Dense Matter' vor. Darin machte er klar, dass das Elektronengas in Sirius B im Sinne der Fermi-Dirac Statistik stark entartet ist. Diese Arbeit von Fowler schliesst mit folgenden Worten:

"The black-dwarf material is best likened to a single gigantic molecule in its lowest quantum state. On the Fermi-Dirac statistics, its high density can be achieved in one and only one way, in virtue of a correspondingly great energy content. But this energy can no more be expended in radiation than the energy of a normal atom or molecule. The only difference between black dwarf matter and a normal molecule is that the molecule can exist in a free state while the black-dwarf matter can only so exist under very high external pressure."

*) Masse = $1.05 M_{\odot}$, Leuchtkraft $L = 0.03 L_{\odot}$, effektive Temperatur $T_e = 27000 \text{ K}$. Nach Stefan-Boltzmann ist $L = 4\pi R^2 \sigma T_e^4$, $\sigma = ac/4$. Deshalb ist der Radius $R = 0.008 R_{\odot}$ (Erdradius = $0.00915 R_{\odot}$) und die mittlere Dichte ist $2.8 \times 10^6 \text{ g/cm}^3$.
(Die gravitative Rotverschiebung ist $89 \pm 16 \text{ km/sec}$.)

Struktur der Materie in weissen Zwergen

Wir interessieren uns im folgenden für den Zustand von "kalter" Materie bei Drücken, wie sie in weissen Zwergen vorkommen.

10.1 Ionisierung bei hohen Drücken

Wir wollen zunächst abklären, bei welchen Drücken die Materie auch für $T=0$ ionisiert ist.

Experimentell ist bekannt, dass mit steigendem Druck die Ionisierungsspannungen erniedrigt und die Linien der Atomspektren verbreitert werden. Das Linienspektrum des Plasmas geht dabei allmählich in ein Kontinuumspektrum über. Dies bedeutet, dass die Hüllenelektronen der äusseren und schliesslich auch der inneren Schalen mit steigendem Druck immer weniger von den freien Elektronen unterschieden werden können. Dies kann man qualitativ so verstehen.

Das Volumen eines Atoms bildet einen Potentialwall für jedes Elektron, welches sich in diesem befindet. Wenn nun die Atome immer näher aneinanderrücken, wird die Barriere zwischen benachbarten Wällen immer dünner. Damit können Elektronen von einem Atom zu benachbarten Atomen tunneln. Die Tunnelwahrscheinlichkeit steigt exponentiell mit abnehmender Barrierendicke (WKB!) und nimmt entsprechend ab mit dem Unterschied der Barrierenhöhe und der Teilchenenergie. Deshalb tunneln die Elektronen in höheren Zuständen leichter als diejenigen in der K-Schale.

Der Tunneleffekt führt natürlich zu einer Verbreiterung der Energieniveaus. Mit wachsender Dichte werden die Elektronen praktisch frei. Volle Ionisation erwarten wir, wenn der mittlere Abstand \bar{a} zwischen Nachbaratomen vergleichbar zum Radius der K-Schale wird, d.h. für

$$\bar{a} = C \frac{a_0}{Z}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m} = 0.5 \times 10^{-8} \text{ cm},$$

wo C eine Konstante der Größenordnung 1 ist (welche natürlich vom Material abhängt). Die Materie ist also vollständig ionisiert (auch bei $T=0$), falls für die Dichte ρ gilt (A: mittlere Massenzahl)

$$\begin{aligned} \rho &= A u_p \frac{1}{\bar{a}^3} \approx \frac{u_p}{C^3 a_0^3} Z^4 = C^{-3} Z^4 \underbrace{(\alpha^3 \tau_e^3 u_p)}_{\approx 10 \text{ g/cm}^3} \\ &\approx C^{-3} Z^4 (10 \text{ g/cm}^3). \end{aligned} \tag{1.1}$$

Quantenmechanische Rechnungen liefern z.B. für H : $C \approx 6$; die zugehörige rechte Seite von (1.1) ist 0.05 g/cm^3 . Für $Z \gg 1$ wird die vollständige Ionisation erst bei viel höheren Dichten erreicht. Dann verlieren die Atome ihre Individualität und die Materie wird ein Elektron-Kern-Plasma.

Für Ergänzungen siehe z.B. :

W. Geiger et al, Springer Tracts Modern Physics, Vol. 46, 1, 1968.

* * *

10.2 Das Fowler'sche Modell für das Elektron-Kern-Plasma und Chandrasekhar Theorie der Weißen Zwerge

Für das Innere von Weißen Zwergen legen wir nun als erste, recht gute Näherung das Fowler'sche Modell zugrunde, nach welchem die Elektronen als freies total entartetes Fermi-Gas beschrieben werden können und der Druck der Elektronen vollständig dominiert. Korrekturen zu diesem Modell werden wir weiter unten besprechen.

Bei welchen Dichten werden die Elektronen relativistisch?
Die Elektronendichte n ist ($\hbar = c = 1$):

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{p \leq p_F} d^3p = \frac{1}{3\pi^2} p_F^3. \quad (1.2)$$

Für $p_F = m$ wird $n = \frac{m^3}{3\pi^2}$ und also die Dichte

$$\rho = \frac{A}{Z} n m_p = \frac{A}{Z} m_p m^3 = 0.97 \times 10^6 \text{ g/cm}^3 \cdot \left(\frac{A}{Z}\right).$$

Allgemein ist

$$\rho = 0.97 \times 10^6 \text{ (g/cm}^3) \frac{A}{Z} \left(\frac{p_F}{m}\right)^3. \quad (1.3)$$

In Weißen Zwergen sind also die Elektronen relativistisch.

Die Entartungstemperatur ist $T_0 = \frac{E_F - m}{k}$. Um einen Eindruck zu erhalten, setzen wir wieder $p_F = m$. Dann ist $T_0 = (\sqrt{2}-1)m/k$; aber $m/k \approx 6 \times 10^9 \text{ K}$. Dies zeigt, dass thermische Effekte klein sind.

Im Fowler'schen Modell ist der Elektronendruck

$$P = \frac{1}{3} \frac{2 \times 4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} \frac{p^2/m}{\sqrt{1+(p/m)^2}} p^2 dp. \quad (1.4)$$

Eine elementare Integration liefert ($x = p_F/m$):

$$P = A f(x), \quad (1.5)$$

wobei

$$A = \frac{\pi m^4 c^5}{3 h^3} = 6.01 \times 10^{22} \text{ dyu/cm}^2, \quad (1.6)$$

$$f(x) = x \sqrt{x^2+1} (2x^2-3) + 3 \ln(\sqrt{1+x^2} + x). \quad (1.7)$$

Für die Energiedichte findet man

$$\begin{aligned} u &= \frac{2 \times 4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{p_F} \sqrt{p^2 + m^2} p^2 dp \\ &= A g(x), \end{aligned} \quad (1.8)$$

mit

$$g(x) = 8x^3 (\sqrt{1+x^2} - 1) - f(x). \quad (1.9)$$

Wir schreiben noch die Dichte (1.3) in der Form

$$\begin{aligned} \rho &= B x^3, \\ B &= \frac{8\pi m^3 c^3 \mu_p}{3 h^3} \mu_e = 0.97 \times 10^6 \mu_e \text{ (g/cm}^3\text{)}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

wobei

$$\mu_e = \langle A/Z \rangle$$

das mittlere Nucleonenzahl pro Elektron ist ($1/\mu_e$ ist die Zahl der Elektronen pro Nucleon, oft als ν_e bezeichnet).

Übung: Leite (1.4) aus (1.8) nach den Regeln der Thermodynamik ab.

Wir kehren noch die wichtigen Grenzfälle:

(i) nichtrel. Grenzfall ($x \ll 1$):

$$f(x) = \frac{8}{5} x^5 + \dots, \quad g(x) = \frac{12}{5} x^5 + \dots$$

\Rightarrow

$$\left. \begin{aligned} u &= \frac{12A}{5} x^5 \\ P &= \frac{8A}{5} x^5 \end{aligned} \right\} \Rightarrow u = \frac{3}{2} P$$

und folglich mit (1.10)

$$\left| \begin{aligned} P &= \frac{8}{5} A B^{-5/3} \rho^{5/3}, \\ \frac{du}{d\rho} &= \frac{5}{3}. \end{aligned} \right. \quad (\text{Polytrope!}) \quad (1.11)$$

(ii) extrem relativistischer Grenzfall: $x \gg 1$

$$f(x) = 2x^4 \left(1 + O\left(\frac{1}{x}\right)\right), \quad g(x) = 6x^4 \left(1 + O\left(\frac{1}{x}\right)\right)$$

$\Rightarrow u = 3P$ (wie bei Photonen);

$$\left| \begin{aligned} P &= 2AB^{-4/3} \rho^{4/3}, \\ \frac{du}{d\rho} &= 4/3. \end{aligned} \right. \quad (\text{Polytrope!}) \quad (1.12)$$

Eine Zustandsgl. der Form

$$P = \text{const } \rho^\gamma \quad (1.13)$$

heißt man eine Polytrope; die Größe $n = \frac{1}{\gamma-1}$ ist der polytrope Index.

Nach (I.5.4) und (I.5.5) ist im hydrostatischen Gleichgewicht

$$\left| \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(\frac{r^2}{\rho(r)} \frac{dP(r)}{dr} \right) = -4\pi G \rho(r). \right. \quad (1.14)$$

Substitution von (1.5) und (1.10) gibt

$$\frac{A}{B} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dt} \left(\frac{r^2}{x^3} \frac{df(x)}{dt} \right) = -4\pi G B x^3.$$

Nun zeigt man aber leicht, dass

$$\frac{1}{x^3} \frac{df(x)}{dt} = 8 \frac{d}{dt} \sqrt{x^2+1}$$

und damit erhalten wir

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dt} \left[r^2 \frac{d}{dt} \sqrt{x^2+1} \right] = -\pi G \frac{B^2}{2A} x^3.$$

Nun sei

$$z^2 = x^2 + 1 = \left(\frac{E}{u} \right)^2. \quad (1.15)$$

Für $z(t)$ gilt die Differentialgl.

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dt} \left[r^2 \frac{dz}{dt} \right] = -\frac{\pi G B^2}{2A} (z^2 - 1)^{3/2}. \quad (1.16)$$

Die zentralen Werte von x und z seien x_c und z_c , respektive.
Wir setzen

$$r = \alpha \xi, \quad z = z_c \phi,$$

wo α eine noch zu definierende Längeneinheit ist. Die Gleichung (1.16) wird dann

$$\frac{z_c}{\alpha^2} \frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d\phi}{d\xi} \right) = -\pi \frac{G B^2 z_c^3}{2A} \left(\phi^2 - \frac{1}{z_c^2} \right)^{3/2}.$$

Nun definieren wir α so, dass die multiplikativen Konstanten in dieser Gl. wegfallen

$$\alpha := \left(\frac{2A}{\pi G} \right)^{1/2} \frac{1}{B z_c}. \quad (1.17)$$

Die Grundgleichung lautet damit endgültig

$$\boxed{\frac{1}{\Sigma^2} \frac{d}{d\Sigma} \left(\Sigma^2 \frac{d\phi}{d\Sigma} \right) = - \left(\phi^2 - \frac{1}{z_c^2} \right)^{3/2}} \quad (1.18)$$

Die Anfangsbedingungen lauten

$$\phi(0) = 1, \quad \frac{d\phi}{d\Sigma}(0) = 0. \quad (1.19)$$

(Die 2. Gleichung muss gelten, damit die linke Seite der Diffgl. (1.18) im Ursprung nichtsingulär wird.)

Für jeden Wert der zentralen Dichte (bestimmt durch z_c) existiert eine eindeutige Lösung. Der Rand des Sterns ist so $z=1$ wird. Es sei Σ_1 der zugehörige Wert von Σ . An der Oberfläche gilt also:

$$\phi(\Sigma_1) = \frac{1}{z_c}. \quad (1.20)$$

Der Radius des Sterns ist

$$R = \alpha \Sigma_1 = \lambda_1 (\Sigma_1 / z_c), \quad (1.21)$$

wo

$$\lambda_1 = \alpha z_c = \left(\frac{2A}{\pi G} \right)^{1/2} \frac{1}{B}.$$

Setzt man hier die Ausdrücke für A und B ein, so findet man

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{3}{2} \left(\frac{\pi}{3} \right)^{1/3} \sqrt{z_c} \frac{1}{\mu_e} \left(\frac{\mu_{pe}}{\mu_p} \right) \\ &= 7.8 \times 10^8 \frac{1}{\mu_e} \text{ cm}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Dies vergleicht man mit dem Erdradius:

$$R_{\oplus} = 6.4 \times 10^8 \text{ cm}.$$

Die Masse ist

$$M = \int_0^R \rho(r) 4\pi r^2 dr = 4\pi \alpha^3 \int_0^{\Sigma_1} \rho \Sigma^2 d\Sigma.$$

Da

$$\rho/\rho_c = \frac{x^3}{x_c^3} = \frac{(z^2-1)^{3/2}}{(z_c^2-1)^{3/2}}$$

und $z = z_c \phi(\Sigma)$, gilt

$$\boxed{\frac{\rho}{\rho_c} = \frac{z_c^3}{(z_c^2-1)^{3/2}} \left(\phi^2 - \frac{1}{z_c^2}\right)^{3/2}} \quad (1.23)$$

und folglich

$$M = 4\pi \alpha^3 \rho_c \frac{z_c^3}{(z_c^2-1)^{3/2}} \int_0^{\Sigma_1} \Sigma^2 \left(\phi^2(\Sigma) - \frac{1}{z_c^2}\right)^{3/2} d\Sigma.$$

Darin benutzen wir die Dgl. (1.18) und erhalten

$$M = 4\pi \alpha^3 \rho_c \frac{z_c^3}{(z_c^2-1)^{3/2}} \Sigma_1^2 |\phi'(\Sigma_1)|.$$

Setzen wir noch die Def. (1.17) für α , sowie $\rho_c = B(z_c^2-1)^{3/2}$ ein, so kommt

$$M = 4\pi \left(\frac{2A}{\pi G}\right)^{3/2} \frac{1}{B^2} \Sigma_1^2 |\phi'(\Sigma_1)|,$$

oder

$$\boxed{M = \frac{\sqrt{3\pi}}{2} \frac{N_0 \mu_p}{\mu_e^2} \Sigma_1^2 |\phi'(\Sigma_1)|, \quad N_0 = \frac{\mu_{PR}^3}{\mu_p^3}} \quad (1.24)$$

Dies, sowie (1.21), d.h.

$$\boxed{R = \lambda_1 (\Sigma_1/z_c),} \quad (1.25)$$

gibt die Massen-Radius-Beziehung.

Für sehr grosse zentrale Dichten ($z_c \gg 1$) lautet die Dgl (1.18)

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \frac{d\phi}{d\xi} \right) + \phi^3 = 0 \quad (1.26)$$

und ξ_1 erfüllt ungefähr $\phi(\xi_1) = 0$ (siehe (1.20)). In diesem Sinne ist M unabhängig von der zentralen Dichte. Numerisch erhält man für die Nullstelle der polynomen Gleichung (1.26):

$$\xi_1 = 6.8968 \quad (1.27)$$

und ferner

$$\xi_1^2 \left| \frac{d\phi}{d\xi}(\xi_1) \right| = 2.01824. \quad (1.28)$$

Setzt man dies in (1.24) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} M(\rho_c \rightarrow \infty) &= \frac{\sqrt{3\pi}}{2} \times 2.01824 \frac{N_0 \mu_p}{\mu_e^2} = 3.1 \frac{N_0 \mu_p}{\mu_e^2} \\ &= \frac{5.84}{\mu_e^2} M_0. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Das ist der genaue Wert der Chandrasekhar-Grenze. Für Seite ist $\mu_e = \frac{A}{Z} = \frac{56}{26} = 2.152$ und $M(\rho_c \rightarrow \infty) = 1.25 M_0$.

$M(\rho_c)$ wächst monoton*) mit ρ_c und folglich ist $M(\rho_c \rightarrow \infty)$

*) Heuristisch kann man dies so sehen: Aus $\frac{dP}{dr} = - \frac{GM(r)\rho}{r^2}$ folgt $P_c \sim GM^2/R^4$. Zusammen mit $\rho_c \sim M/R^3$ ergibt sich $P_c \sim GM^{2/3} \rho_c^{4/3}$. Aber $P_c \propto \rho_c^\gamma$, mit $4/3 \leq \gamma \leq 5/3$. Deshalb $M^{2/3} \propto \rho_c^{\gamma-4/3} \rightarrow$ mit wachsendem ρ_c !

tabäquivalent eine Grenzmasse. Dies ist eine wichtige Konsequenz von Relativitätstheorie und Quantentheorie

Wir betrachten noch die mittlere Dichte. Mit

$$M(r) =: \frac{4\pi}{3} (\alpha r)^3 \bar{\rho}(r) \tag{1.30}$$

folgt - analog wie bei der Herleitung von M -

$$\bar{\rho}(r) = \rho \frac{3z_c^3}{(z_c^2 - 1)^{3/2}} (-r^2 \phi') / r^3. \tag{1.31}$$

Die mittlere Dichte für den ganzen Stern ist gegeben durch

$$\frac{\rho_c}{\bar{\rho}} = \frac{(1 - 1/z_c^2)^{3/2} \int_0^1 \xi^3}{3 \int_0^1 \xi^2 |\phi'(\xi)|}. \tag{1.32}$$

Nichtrelativistischer Fall ($x \ll 1, z \approx 1$): Hier ist

$$\phi = \frac{z}{z_c} = \frac{\sqrt{1+x^2}}{\sqrt{1+x_c^2}} \approx 1 + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{2}x_c^2 + \dots,$$

$$\frac{d\phi}{dr} \approx \frac{1}{z} \frac{d}{dr} x^2, \quad \left(\phi^2 - \frac{1}{z_c^2}\right)^{3/2} \approx (x^2)^{3/2}.$$

Sei $r' = \sqrt{z} r$, dann folgt

$$\frac{1}{r'^2} \frac{d}{dr'} \left(r'^2 \frac{d}{dr'} (x^2) \right) = - (x^2)^{3/2}.$$

Dies ist die Lane-Emden-Gl. für $n = 3/2$.

Übung: Zeige, dass in diesem Fall die Masse-Radius-Beziehung wie folgt lautet (Fowler)

$$M R^3 = \text{const} = ? \tag{1.33}$$

Numerische Resultate: Die folgende Fig. zeigt R/λ_1 als

Funktion von M/M_{chand} .

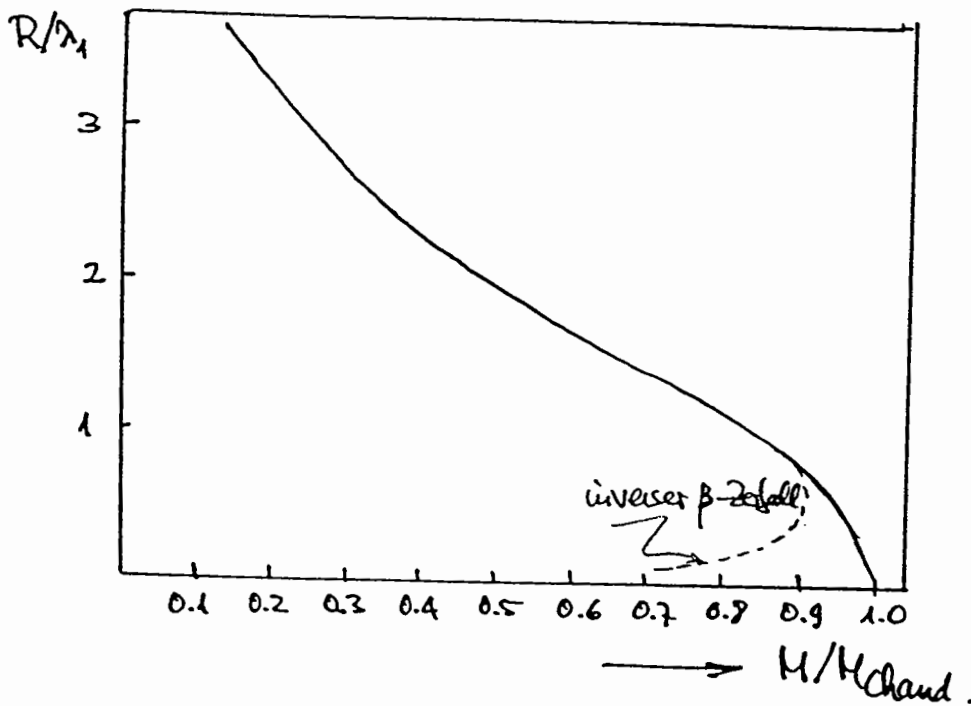


Fig. Dimensionloser Radius R/λ_1 als Funktion von M/M_{chand} für ein ideales vollständig entartetes Elektronengas. (Für die gestrichelte Linie siehe unten.)

Für M nicht allzu nahe bei M_{ch} ist $R \sim \lambda_1 \sim \text{Erdradius}$. Weitere numerische Resultate gibt die folgende Tabelle.

NUMERICAL RESULTS FOR COMPLETELY DEGENERATE CONFIGURATIONS

$1/z_c^2$	ζ_1	$\left(-\zeta^2 \frac{d\phi}{d\zeta}\right)_1$	$\rho_c/\bar{\rho}$	M/M_3	R/ζ_1	$\mu_e^2 M$ (solar units)	ρ_c/μ_e (gm/cm ³)	$\mu_e R$ (km)*
0	6.8968	2.0182	54.182	1	0	5.84	∞	0
.01	5.3571	1.9321	26.203	0.95733	0.53571	5.60	9.48×10^8	4,170
.02	4.9857	1.8652	21.486	.92419	0.70508	5.41	3.31×10^8	5,500
.05	4.4601	1.7096	16.018	.84709	0.99732	4.95	7.98×10^7	7,760
.1	4.0690	1.5186	12.626	.75243	1.28674	4.40	2.59×10^7	10,000
.2	3.7271	1.2430	9.9348	.61589	1.66682	3.60	7.70×10^6	13,000
.3	3.5803	1.0337	8.6673	.51218	1.96102	2.99	3.43×10^6	16,000
.5	3.5330	0.7070	7.3505	.35033	2.49818	2.04	9.63×10^5	19,500
.8	4.0446	0.3091	6.3814	.15316	3.61760	0.89	1.21×10^5	28,200
1.0	∞	0	5.9907	0	∞	0	0	∞

* For comparison, the mean radius of the Earth is 6371 km.

Fortschreibung \rightarrow Astrophysik - Vorlesung

11. Heisenberg-Modelle, Keesom-Wagner-Theorem

Für Ising-Modelle wissen wir, dass für $d \geq 2$ eine spontane Magnetisierung bei genügend tiefen Temperaturen auftritt. Entsprechend ist die Symmetrie Z_2 spontan gebrochen. In § II.10 wurde gezeigt, dass klassische $O(n)$ -Spinmodelle für $d \geq 3$ unterhalb einer kritischen Temperatur ebenfalls ^{eine} spontane Magnetisierung aufweisen, dass dies aber in zwei Dimensionen ^{für $n > 1$} nicht mehr der Fall ist (§ II.10.4). Die letztere Aussage wollen wir nun auch für das quantenmechanische Heisenberg-Modell beweisen. (Wir folgen dabei Quelle, § 5.5.) Die Gruppe $O(n)$ wird also in $d=2$ nicht spontan gebrochen.

A. Formulierung der Heisenberg-Modelle

Jedem Gitterpunkt $x \in \mathbb{Z}^d$ ordnen wir den Hilbertraum $\mathcal{H}_x = \mathbb{C}^{2S+1}$ zu. Dieser trägt die Darstellung \mathcal{D}^S von $SU(2)$. Die zugehörigen Spinoperatoren bezeichnen wir mit $\vec{S}(x)$; es sei $S_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_1 \pm iS_2)$ (für jedes x). Für ein $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ endlich sei

$$\mathcal{H}_{\Lambda} = \bigotimes_{x \in \Lambda} \mathcal{H}_x.$$

H_{Λ} ist der folgende selbstadjungierte Operator auf \mathcal{H}_{Λ} :

$$H_{\Lambda} = - \sum_{x, x' \in \Lambda} J(x-x') \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(x') - h \sum_{x \in \Lambda} S_z(x); \quad (11.1)$$

$$J(0) = 0, J(-x) = J(x), H := \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} x^2 |J(x)|^2 < \infty. \quad (11.2)$$

Observable des Gebietes Λ sind selbstadjungierte Operatoren

$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_\lambda)$. Ihre Erwartungswerte sind

$$\langle A \rangle_\lambda = Z_\lambda^{-1} \operatorname{Sp}(A e^{-\beta H_\lambda}), \quad Z_\lambda = \operatorname{Sp} e^{-\beta H_\lambda}. \quad (11.3)$$

H_λ in (11.1) bezeichnet man als Herenberg-Hamiltonoperator.

B. Bogoliubov-Gleichung

Für unsere Hauptaufgabe (Abschnitt C) ist die folgende Ungleichung das wichtigste Werkzeug.

Sei \mathcal{H} ein euklididim. Hilbertraum, H ein selbstadjungierter Operator und $\beta > 0$. Ferner bezeichne $\langle X \rangle$ für ein $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ den Erwartungswert

$$\langle X \rangle = (\operatorname{Sp} e^{-\beta H})^{-1} \operatorname{Sp}(X e^{-\beta H}). \quad (11.4)$$

Dann gilt für beliebige Operatoren $A, C \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$

$$\frac{1}{2} \beta \langle A^*A + AA^* \rangle \cdot \langle [[C, H], C^*] \rangle \geq |\langle [C, A] \rangle|^2. \quad (11.5)$$

Beweis: Wir führen in $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ die folgende positiv-semidefinite hermitesche Form ein

$$(A, B) = \sum'_{\varphi, \psi} (\psi, A^* \varphi) (\varphi, B \psi) \frac{W_\psi - W_\varphi}{E_\psi - E_\varphi}. \quad (11.6)$$

Dabei wird über alle Paare (φ, ψ) von Elementen einer orthonormierten Basis von Eigenvektoren von H ($H\varphi = E_\varphi\varphi$) summiert, bis auf Paare mit $E_\varphi = E_\psi$. Ferner sei

$$W_\varphi = Z^{-1} e^{-\beta E_\varphi}, \quad Z := \operatorname{Sp} e^{-\beta H}. \quad (11.7)$$

Falls $E_\varphi < E_\psi$, so gilt

$$\frac{e^{-\beta E_\varphi} - e^{-\beta E_\psi}}{e^{-\beta E_\varphi} + e^{-\beta E_\psi}} = \tanh\left(\beta \frac{E_\psi - E_\varphi}{2}\right) < \frac{\beta}{2} (E_\psi - E_\varphi)$$

und somit

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{W_\psi - W_\varphi}{E_\psi - E_\varphi} &= \sum^{-1} \frac{e^{-\beta E_\varphi} - e^{-\beta E_\psi}}{E_\psi - E_\varphi} < \sum^{-1} \frac{1}{2} \beta (e^{-\beta E_\varphi} + e^{-\beta E_\psi}) \\ &= \frac{1}{2} \beta (W_\varphi + W_\psi). \end{aligned}$$

Deshalb ist

$$\begin{aligned} \langle A, A \rangle &\leq \frac{1}{2} \beta \sum_{\varphi, \psi} (\psi, A^* \varphi) (\varphi, A \psi) (W_\varphi + W_\psi) \\ &\quad (E_\varphi < E_\psi) \\ &\quad + \frac{1}{2} \beta \sum_{\varphi, \psi} (\varphi, A \psi) (\psi, A^* \varphi) (W_\varphi + W_\psi) \\ &\quad (E_\psi < E_\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{2} \beta \sum_{\varphi, \psi} [W_\varphi (\psi, A^* \varphi) (\varphi, A \psi) + W_\psi (\psi, A^* \varphi) (\varphi, A \psi)] \\ &= \frac{1}{2} \beta \langle AA^* + A^*A \rangle. \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis haben wir fest

$$\langle A, A \rangle \leq \frac{1}{2} \beta \langle AA^* + A^*A \rangle. \quad (11.8)$$

Das verwenden wir in der Schwarz'schen Ungleichung

$$\langle A, A \rangle \langle B, B \rangle \geq |\langle A, B \rangle|^2. \quad (11.9)$$

Darin wählen wir $B = [C^*, H]$. Dafür ist

$$(A, B) = (A, [C^*, H]) = \sum'_{\varphi, \psi} (\psi, A^* \varphi) (\varphi, [C^*, H] \psi) \frac{W_\psi - W_\varphi}{E_\psi - E_\varphi}$$

$$= \sum'_{\varphi, \psi} (\psi, A^* \varphi) (\varphi, C^* \psi) (W_\psi - W_\varphi).$$

Das vergleichen wir mit

$$\langle [C^*, A^*] \rangle = \sum_{\varphi, \psi} (\varphi, C^* \psi) (\psi, A^* \varphi) W_\psi - \sum_{\varphi, \psi} (\psi, A^* \varphi) (\varphi, C^* \psi) W_\varphi$$

$$= \sum'_{\varphi, \psi} (W_\psi - W_\varphi) (\psi, A^* \varphi) (\varphi, C^* \psi).$$

Wir sehen, dass

$$(A, B) = \langle [C^*, A^*] \rangle. \quad (11.10)$$

Speziell für $A = B$ gibt dies

$$(B, B) = \langle [C^*, [H, C]] \rangle. \quad (11.11)$$

Einschub von (11.8), (11.10) und (11.11) in (11.9) gibt die Behauptung (11.5).

C. Das Mermin-Wagner Theorem

Mit den obigen Bezeichnungen definieren wir

$$g(h) = \beta^{-1} \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} N(\Lambda)^{-1} \ln \text{Sp}_{\mathbb{Z}^d} (\bar{e}^{\beta H_\Lambda}), \quad (11.12)$$

$$\bar{\sigma}(h) = \frac{d}{dh} g(h)$$

($N(\Lambda)$ = Zahl der Gitterpunkte in Λ). Wir behaupten, dass die spontane Magnetisierung für $d \leq 2$ verschwindet:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \bar{\sigma}(h) = 0 \quad \text{für } d \leq 2. \quad (11.13)$$

Beweis: $J(x)$ habe zunächst eine endliche Anzahl von Nullstellen (d.h. $J(x) = 0$, ausser für endlich viele $x \in \mathbb{Z}^d$). Wir nehmen an, Λ sei in einem periodischen Kubus

$$\Lambda(a) = \{x \in \mathbb{Z}^d : 0 \leq x^i < a^i\} \quad (11.14)$$

(Identifikation von gegenüberliegenden Seiten) enthalten. Δ bezeichne die Menge

$$\Delta = \left\{ k \in \mathbb{R}^d : k^i = \frac{2\pi n^i}{a^i}, n^i \in \mathbb{Z}, -\frac{a^i}{2} < n^i \leq \frac{a^i}{2} \right\}. \quad (11.15)$$

Die Fouriersummen von S und J sind definiert durch

$$S_i(k) = \sum_{x \in \Lambda(a)} e^{-ik \cdot x} S_i(x), \quad (11.16)$$

$$J(k) = \sum_{x \in \Lambda(a)} e^{-ik \cdot x} J(x). \quad (11.17)$$

Diese haben die Umkehrungen für $x \in \Lambda(a)$:

$$S_i(x) = V(a)^{-1} \sum_{k \in \Delta} e^{ik \cdot x} S_i(k), \quad (11.18)$$

$$J(x) = V(a)^{-1} \sum_{k \in \Delta} e^{ik \cdot x} J(k). \quad (11.19)$$

mit $V(a) := N(\Lambda(a))$.

Für ein endliches System ist die Größe die $\bar{\sigma}(h)$ entspricht

gleich

$$\frac{d}{dh} \beta^{-1} V(a)^{-1} \ln \text{Sp} e^{-\beta \hat{H}_{\Lambda(a)}} = \left\langle V(a)^{-1} \sum_{x \in \Lambda(a)} S_3(x) \right\rangle_{\hat{H}_{\Lambda(a)}}. \quad (11.20)$$

Dabei ist $\hat{H}_{\Lambda(a)}$ folgendermassen definiert (vgl. mit (11.1)):

$$\hat{H}_{\Lambda(a)} = - \sum_{x, x' \in \Lambda(a)} \hat{J}(x-x') \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(x') - h \sum_{x \in \Lambda(a)} S_z(x), \quad (*)$$

wobei \hat{J} aus J hervorgeht, indem man die Spins modulo $a\mathbb{Z}^d = \{ua : u \in \mathbb{Z}^d\}$ identifiziert. Man kann zeigen, wie zu erwarten ist, dass der zugehörige thermodynam. Limes derselbe ist wie für freie Randbedingungen (siehe z.B. Israel, Kap. I, speziell Thm. I.3.6).

Es erweist sich für das folgende als günstig, statt $\hat{\sigma}(h)$ die folgende Grösse zu betrachten

$$\sigma(h) = \left\langle V(a)^{-1} \sum_{x \in \Lambda(a)} S_z(x) e^{ik \cdot x} \right\rangle, \quad (11.21)$$

wobei k so gewählt ist, dass $e^{ik \cdot x} = \pm 1$ für jedes $x \in \Lambda(a)$ und $\hat{H}_{\Lambda(a)}$, bezüglich dem der Erwartungswert zu bilden ist, gegenüber (*) ebenfalls etwas verallgemeinert wird

$$\hat{H}_{\Lambda(a)} = - \sum_{x, x' \in \Lambda(a)} \hat{J}(x-x') \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(x') - h \sum_{x \in \Lambda(a)} e^{-ik \cdot x} S_z(x). \quad (11.22)$$

Nun leiten wir aus der Bogoljubov-Umformung mit der folgenden Wahl eine Umformung für $\sigma(h)$ her:

$$A = S_-(k-k), \quad C = S_+(k), \quad H = \hat{H}_{\Lambda(a)} \quad (\text{gemäss (11.22)}). \quad (11.23)$$

Es ist in (11.5)

$$\langle AA^* + A^*A \rangle = \langle S_+(k+k)S_-(k-k) + S_-(k-k)S_+(k+k) \rangle, \quad (11.24)$$

$$\begin{aligned}
 \langle [C, A] \rangle &= \langle [S_+(k), S_-(k-k)] \rangle \\
 &= \sum_{x, y \in \Lambda(a)} e^{-ik \cdot x} e^{i(k+k) \cdot y} \underbrace{\langle [S_+(x), S_-(y)] \rangle}_{\delta_{xy} S_3(x)} \\
 &= \sum_{x \in \Lambda(a)} e^{ik \cdot x} \langle S_3(x) \rangle,
 \end{aligned}$$

d.h. $\langle [C, A] \rangle = V(a) \sigma(k). \quad (11.25)$

Zur Berechnung von $\langle [[C, H], C^*] \rangle$ berechnen wir zuerst

$$[C, H] = \sum_{y \in \Lambda(a)} e^{ik \cdot y} [S_+(y), \hat{H}_{\Lambda(a)}]. \quad (11.26)$$

Daher benötigen wir den Kommutator

$$\begin{aligned}
 [S_+(y), \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(x')] \\
 \underbrace{\phantom{[S_+(y), \vec{S}(x) \cdot \vec{S}(x')]}}_{S_+(x)S_-(x') + S_-(x)S_+(x') + S_3(x)S_3(x')}.
 \end{aligned}$$

Dann ist dieser nicht verschwindend, muss entweder $y=x$ oder $y=x'$ sein. Für $y=x$ haben wir den Beitrag

$$\underbrace{[S_+(x), S_-(x)]}_{S_3(x)} S_+(x') + \underbrace{[S_+(x), S_3(x)]}_{-S_+(x)} S_3(x')$$

und für $y=x'$

$$S_+(x) \underbrace{[S_+(x'), S_-(x')]}_{S_3(x')} + S_3(x) \underbrace{[S_+(x'), S_3(x')]}_{-S_+(x)}.$$

Dann erhalten wir für (11.26), wenn wir dort (11.22) einsetzen

$$[C, H] = 2 \sum_{x, x'} (\bar{e}^{ik \cdot x'} - e^{ik \cdot x}) \hat{J}(x-x') S_3(x) S_+(x') + h \sum_x \bar{e}^{i(k+k) \cdot x} S_+(x). \quad (11.27)$$

Dies setzen wir in $\langle [[C, H], C^*] \rangle$, $C^* = S_-(-k) = \sum_y e^{ik \cdot y} S_-(y)$ ein. Der letzte Term in (11.27) gibt dafür ($y=x$)

$$\langle h \sum_x \bar{e}^{ik \cdot x} \underbrace{[S_+(x), S_-(x)]}_{S_3(x)} \rangle = h V(a) \sigma(h).$$

Vom 1. Term in (11.27) erhalten wir den Beitrag

$$\begin{aligned} & 2 \sum_{x, x', y} (\bar{e}^{ik \cdot x'} - e^{ik \cdot x}) \hat{J}(x-x') \langle [S_3(x) S_+(x'), S_-(y)] \rangle e^{ik \cdot y} \\ & \quad \underbrace{y=x: e^{ik \cdot x} \langle [S_3(x), S_-(x)] S_+(x') \rangle}_{-S_3(x)} \\ & \quad \underbrace{y=x': e^{ik \cdot x'} \langle S_3(x) [S_+(x'), S_-(x')] \rangle}_{S_3(x')} \\ & = 2 \sum_{x, x'} (1 - \bar{e}^{ik \cdot (x-x')}) \hat{J}(x-x') \langle S_-(x') S_+(x) + S_3(x) S_3(x') \rangle. \end{aligned}$$

Damit kommt

$$\begin{aligned} \langle [[C, H], C^*] \rangle & = 2 \sum_{x, x'} (1 - \bar{e}^{ik \cdot (x-x')}) \hat{J}(x-x') \\ & \quad \times \langle S_-(x') S_+(x) + S_3(x') S_3(x) \rangle + h V(a) \sigma(h). \quad (11.28) \end{aligned}$$

Diese Grösse ist nach der Bogoltubov-Gleichung positiv. Addieren wir deshalb dieselbe Grösse rechts mit $k \rightarrow -k$, so erhalten wir die Abschätzung:

$$\langle [[C, H], C^*] \rangle \leq 2 \sum_{x, x'} (1 - \cos k \cdot (x-x')) \hat{J}(x-x') \\ \times \langle S_{\pm}(x') S_{\mp}(x) + S_{\mp}(x') S_{\pm}(x) + 2 S_{\pm}(x') S_{\pm}(x) \rangle + 2h V(a) \sigma(h). \quad (11.29)$$

Wenden wir die Cauchy-Ungleichung auf die positiv semidefinite hermitesche Form $(A, B) := \langle A^* B \rangle$ an, so folgt z.B.

$$|\langle S_{\mp}(x') S_{\pm}(x) \rangle| \leq \langle S_{\mp}(x') S_{\mp}(x') \rangle^{1/2} \langle S_{\pm}(x) S_{\pm}(x) \rangle^{1/2} \\ = \langle S_{\pm}(0) S_{\pm}(0) \rangle,$$

Wenn wir noch die Translationsinvarianz verwenden. Also ist

$$|\langle S_{\pm}(x') S_{\mp}(x) + S_{\mp}(x') S_{\pm}(x) + 2 S_{\pm}(x') S_{\pm}(x) \rangle| \\ \leq \langle S_{\pm}(0) S_{\mp}(0) + S_{\mp}(0) S_{\pm}(0) + 2 S_{\pm}(0)^2 \rangle \leq 2s(s+1).$$

Setzen wir dies in (11.29) ein und benutzen noch $1 - \cos t \leq t^2/2$ sowie (11.2), so erhalten wir

$$\langle [[C, H], C^*] \rangle \leq 2 \sum_x (1 - \cos k \cdot x) |J(x)| V(a) 2s(s+1) + 2V(a) |h\sigma(h)| \\ \leq 2V(a) \left[\underbrace{\sum_x k^2 x^2 |J(x)|}_{k^2 H} s(s+1) + |h\sigma(h)| \right] \\ = 2V(a) [H s(s+1) k^2 + |h\sigma(h)|]. \quad (11.30)$$

Jetzt benutzen wir (11.24), (11.25) und (11.30) in der Bogoliubov-Ungleichung (11.5) und finden

$$\langle S_{\mp}(k+k) S_{\pm}(-k-k) + S_{\pm}(-k-k) S_{\mp}(k+k) \rangle \\ \gg \frac{2\beta^{-1} V(a)^2 \sigma(h)^2}{2V(a) [H s(s+1) k^2 + |h\sigma(h)|]}. \quad (11.31)$$

Die summieren wir über $k \in \Delta$ und verwenden

$$\sum_{k \in \Delta} \langle \text{linkes. von (11.31)} \rangle = V(a) \sum_{x \in N(a)} \langle S_+(x) S_-(x) + S_-(x) S_+(x) \rangle$$

$$\leq V(a)^2 S(s+1),$$

oder

$$S(s+1) \geq \beta^{-1} \sigma(h)^2 \frac{1}{V(a)} \sum_{k \in \Delta} [H S(s+1) k^2 + |h \sigma(h)|]^{-1}. \quad (11.32)$$

Im Limes $a \rightarrow \infty$ wird aus dieser Ungleichung [$\sigma(h) \rightarrow \bar{\sigma}(h)$ (aber noch mit $e^{ik \cdot x}$ Faktor)]:

$$S(s+1) \geq \beta^{-1} \bar{\sigma}(h)^2 \int_{T^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} [H S(s+1) k^2 + |h \bar{\sigma}(h)|]^{-1}. \quad (11.33)$$

Speziell für $d=2$ ist das Integral rechts gleich

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{dk k}{\frac{1}{2} d(k^2)} [\dots]^{-1} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{H S(s+1)} \ln \left(1 + \frac{\pi^2 H S(s+1)}{|h \bar{\sigma}(h)|} \right)$$

und deshalb wird aus (11.33) für $d=2$:

$$\bar{\sigma}(h)^2 \leq 2\pi H [S(s+1)]^2 \beta \left[\ln \left(1 + \frac{\pi^2 H S(s+1)}{|h \bar{\sigma}(h)|} \right) \right]^{-1}. \quad (11.34)$$

Unter den Annahmen (11.2) kann jedes J durch eines mit endlicher Reichweite approximiert werden (siehe das Buch von Kuelle) und die Ungleichung (11.34) bleibt deshalb bestehen. Diese impliziert offensichtlich $\bar{\sigma}(h) \rightarrow 0$ für $h \rightarrow 0$. Dies sieht man auch an der Ungleichung

(11.33): Für $h \rightarrow 0$ hat das Integral $\chi(k)$ für $d=1,2$ eine Infrarotdivergenz, weshalb der Vorfaktor $\bar{\chi}(h)$ für $h \rightarrow 0$ gegen Null gehen muss. In höheren Dimensionen gibt es keine Infrarotdivergenz!

Auch Antiferromagnetismus kann mit der obigen Ungleichung für $d=1,2$ ausgeschlossen werden. Dazu betrachten wir die Untergitter $\{x : e^{ik \cdot x} = +1\}$, $\{x : e^{ik \cdot x} = -1\}$. Da der Faktor $e^{ik \cdot x}$ in (11.21) und (11.22) eingeführt wurde, schließt die Ungleichung (11.33) für $d=1,2$ "spontane Magnetisierung der Untergitter" aus.

* * *

12. Impuls Kondensation eines wechselwirkenden Fermi-Systems

Die Überlegungen dieses Abschnitts sind in der Theorie der Supraleitung und der Superfluidität (^3He , Neutronen in einem Neutronenstern) sehr wichtig.

Wir betrachten ein System identischer Fermionen (Elektronen, ^3He , Neutronen in einem Neutronenstern). Zwischen diesen bestehe eine (schwache) Anziehung, falls ihre kinetische Energien in der Nähe der Fermifläche sind. Aus Gründen die hier nicht diskutiert werden, nehmen wir ferner an, dass nur Paare von Fermionen mit entgegengesetzten Impulsen und entgegengesetzten Spin-Komponenten miteinander wechselwirken (Cooper-Paarbildung).

Da wir in der großkanonischen Gesamtheit arbeiten, ist der Fockraum zugrunde zu legen. Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren seien $a_{\underline{k},\lambda}^*$, $a_{\underline{k},\lambda}$ (\underline{k} : Wellenzahlvektor, λ : Spindichtung ($\lambda = \pm 1/2$)). [Das System sei in einem Kasten mit periodischen Randbedingungen (Torus) eingespannt, womit die Wellenzahlvektoren diskret werden.]

Der Hamiltonoperator hat also die Form

$$H = \sum_{\underline{k},\lambda} \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m} a_{\underline{k},\lambda}^* a_{\underline{k},\lambda} + \sum_{\underline{k},\underline{k}'} V_{\underline{k}'\underline{k}} a_{\underline{k}'\uparrow}^* a_{-\underline{k}'\downarrow}^* a_{-\underline{k}\downarrow} a_{\underline{k}\uparrow}, \quad (12.1)$$

wobei

$$V_{\underline{k}'\underline{k}} = \begin{cases} -V_0 & \text{für } |\mu - \frac{\hbar^2 \underline{k}^2}{2m}| \leq \Delta\varepsilon, |\mu - \frac{\hbar^2 \underline{k}'^2}{2m}| \leq \Delta\varepsilon \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (12.2)$$

Wir interessieren uns für die Thermodynamik dieses Systems. Nach dem Vorbild von BCS (Bardeen, Cooper und Schrieffer) berechnen wir diese in der 'Molekularfeldnäherung'. In dieser ersetzen wir H durch

$$H = \sum_{\underline{k}, \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\underline{k}, \lambda}^* a_{\underline{k}, \lambda} + \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} X_{\underline{k}'}^* V_{\underline{k}' \underline{k}} a_{-\underline{k} \downarrow} a_{\underline{k} \uparrow} + \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} a_{\underline{k} \uparrow}^* a_{-\underline{k} \downarrow}^* V_{\underline{k}' \underline{k}} X_{\underline{k}}, \quad (11.3)$$

und

$$X_{\underline{k}} = -\langle a_{\underline{k} \uparrow} a_{-\underline{k} \downarrow} \rangle, \quad X_{\underline{k}'}^* = -\langle a_{-\underline{k} \downarrow}^* a_{\underline{k} \uparrow}^* \rangle, \quad (11.4)$$

wobei $\langle \dots \rangle$ den Erwartungswert mit

$$\rho = Z^{-1} e^{-\beta(H - \mu N)} \quad (11.5)$$

bezeichnet. Das Nichtverschwinden von $X_{\underline{k}}$ bedeutet, dass die Phaseninvarianz $a \mapsto e^{i\alpha} a$ von (12.1) spontan gebrochen ist. Da H in (11.5) von den Erwartungswerten $X_{\underline{k}}$ abhängt, sind letztere selbstkonsistent bestimmt.

Wir schreiben zunächst $H' \equiv H - \mu N$ etwas kompakter.

Sei

$$\varepsilon_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu, \quad \Delta_{\underline{k}} = \sum_{\underline{l}} V_{\underline{k} \underline{l}} X_{\underline{l}} \quad (11.6)$$

so gilt

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{\underline{k}} (\varepsilon_{\underline{k}} a_{\underline{k} \uparrow}^* a_{\underline{k} \uparrow} - \varepsilon_{\underline{k}} a_{-\underline{k} \downarrow} a_{-\underline{k} \downarrow}^*) \\ &\quad + \sum_{\underline{k}} \Delta_{\underline{k}} a_{\underline{k} \uparrow}^* a_{-\underline{k} \downarrow} + \sum_{\underline{k}} \Delta_{\underline{k}}^* a_{-\underline{k} \downarrow} a_{\underline{k} \uparrow} \\ &= \sum_{\underline{k}} A_{\underline{k}}^* \mathcal{E}_{\underline{k}} A_{\underline{k}}, \end{aligned} \quad (11.7)$$

wobei

$$A_{\underline{k}} = \begin{pmatrix} a_{\underline{k}\uparrow} \\ a_{\underline{k}\downarrow}^* \end{pmatrix}, \quad \Sigma_{\underline{k}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\underline{k}} & \Delta_{\underline{k}} \\ \Delta_{\underline{k}}^* & -\varepsilon_{\underline{k}} \end{pmatrix}. \quad (11.8)$$

(Der Stern in $A_{\underline{k}}^*$ involviert auch den Übergang zu einem Zeilenvektor.)

Da der Hamiltonoperator H' quadratisch in den $A_{\underline{k}}$ ist, lässt er sich diagonalisieren. Wir machen den Ansatz

$$A_{\underline{k}} = U_{\underline{k}} \Gamma_{\underline{k}}, \quad (11.9)$$

$$U_{\underline{k}} = \begin{pmatrix} u_{\underline{k}}^* & v_{\underline{k}} \\ -v_{\underline{k}}^* & u_{\underline{k}} \end{pmatrix}, \quad \Gamma_{\underline{k}} = \begin{pmatrix} \gamma_{\underline{k},0} \\ \gamma_{\underline{k},1}^* \end{pmatrix} \quad (11.10)$$

mit $\det U_{\underline{k}} = 1$, d.h.

$$|u_{\underline{k}}|^2 + |v_{\underline{k}}|^2 = 1. \quad (11.11)$$

Die $\gamma_{\underline{k},0}^\#, \gamma_{\underline{k},1}^\#$ erfüllen wieder die Jordan-Wigner VR. Damit H' in den $\gamma_{\underline{k},\alpha}^\#$ diagonal ist, muss gelten

$$U_{\underline{k}}^* \Sigma_{\underline{k}} U_{\underline{k}} = E_{\underline{k}}, \quad (11.12)$$

wobei $E_{\underline{k}} = \text{diag}(E_{\underline{k},0}, E_{\underline{k},1})$ ist.

Durch quadrieren von (11.12) kommt

$$E_{\underline{k}}^2 = U_{\underline{k}}^* \Sigma_{\underline{k}} \underbrace{U_{\underline{k}} U_{\underline{k}}^*}_{1} \Sigma_{\underline{k}} U_{\underline{k}} = E_{\underline{k}}^2 \cdot 1, \quad \text{mit}$$

mit

$$E_{\underline{k}}^2 = \varepsilon_{\underline{k}}^2 + \Delta_{\underline{k}}^2.$$

Wir haben also

$$E_{\underline{k}} = \begin{pmatrix} E_{\underline{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\underline{k}} \end{pmatrix}, \quad E_{\underline{k}} = \sqrt{E_{\underline{k}}^2 + \Delta_{\underline{k}}^2}. \quad (11.13)$$

(Die Spur von $E_{\underline{k}}$ verschwindet!). Somit ist

$$H' = \sum_{\underline{k}, \alpha} E_{\underline{k}, \alpha} \chi_{\underline{k}, \alpha}^* \chi_{\underline{k}, \alpha}; \quad (11.14)$$

$$E_{\underline{k}, 0} = E_{\underline{k}}, \quad E_{\underline{k}, 1} = -E_{\underline{k}}.$$

Jetzt ist alles wie bei einem idealen Fermigas.

Für die Bestimmung der Gap-Funktion $\Delta_{\underline{k}}$ gehen wir so vor. Zunächst ist

$$\langle A_{\underline{k}} A_{\underline{k}}^* \rangle = \frac{1}{2} (1 + W_{\underline{k}}) \quad (11.15)$$

mit

$$W_{\underline{k}} = \begin{pmatrix} 1 - 2N_{\underline{k}, \uparrow} & -X_{\underline{k}} \\ -X_{\underline{k}}^* & -1 + 2N_{\underline{k}, \downarrow} \end{pmatrix} \quad (11.16)$$

und

$$N_{\underline{k}, \sigma} = \langle a_{\underline{k}, \sigma}^* a_{\underline{k}, \sigma} \rangle. \quad (11.17)$$

Wenn wir

$$\langle \Gamma_{\underline{k}} \Gamma_{\underline{k}}^* \rangle = \begin{pmatrix} 1 - n_{\underline{k}, 0} & 0 \\ 0 & n_{\underline{k}, 1} \end{pmatrix} \quad (11.18)$$

mit

$$n_{\underline{k}, \alpha} = \langle \chi_{\underline{k}, \alpha}^* \chi_{\underline{k}, \alpha} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\underline{k}, \alpha}} + 1}$$

$$= \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{\beta E_{\underline{k}, \alpha}}{2} \right). \quad (11.19)$$

Andererseits gilt natürlich

$$\langle A_{\underline{k}} A_{\underline{k}}^* \rangle = U_{\underline{k}} \langle \Gamma_{\underline{k}} \Gamma_{\underline{k}}^* \rangle U_{\underline{k}}^* .$$

Durch Vergleich mit (11.15) ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(1+W_{\underline{k}}) &= U_{\underline{k}} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\tanh(\beta E_{\underline{k}}/2) & 0 \\ 0 & 1-\tanh(\beta E_{\underline{k}}/2) \end{pmatrix} U_{\underline{k}}^* \\ &= \frac{1}{2} U_{\underline{k}} \left(1+\tanh \frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \right) U_{\underline{k}} \end{aligned}$$

und somit

$$\begin{aligned} W_{\underline{k}} &= U_{\underline{k}} \begin{pmatrix} \tanh \frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} & 0 \\ 0 & -\tanh \frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \end{pmatrix} U_{\underline{k}}^* \\ &= \frac{1}{E_{\underline{k}}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \right) U_{\underline{k}} \underbrace{\begin{pmatrix} E_{\underline{k}} & 0 \\ 0 & -E_{\underline{k}} \end{pmatrix}}_{E_{\underline{k}}} U_{\underline{k}}^* = \frac{1}{E_{\underline{k}}} \tanh \frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \sum_{\underline{k}} . \end{aligned} \quad (11.20)$$

Vergleichen wir (11.20) mit (11.16), so kommt:

$$1-2W_{\underline{k}} = \frac{E_{\underline{k}}}{E_{\underline{k}}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \right) \quad (11.21)$$

und

$$X_{\underline{k}} = - \frac{\Delta_{\underline{k}}}{E_{\underline{k}}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \right) . \quad (11.22)$$

Die letzte Gleichung multiplizieren wir mit $V_{\underline{k}}$ und summieren über \underline{k} . Dann ergibt sich mit der Definition (11.6) von $\Delta_{\underline{k}}$

$$\Delta_{\underline{l}} = - \sum_{\underline{k}} V_{\underline{l}\underline{k}} \frac{\Delta_{\underline{k}}}{E_{\underline{k}}} \tanh \left(\frac{\beta E_{\underline{k}}}{2} \right) . \quad (11.23)$$

Dies ist die berühmte gap-Gleichung, welche die Selbstkonsistenzgleichung für $\Delta_{\underline{k}}$ darstellt. (Beachte, dass $E_{\underline{k}}$ ebenfalls von $\Delta_{\underline{k}}$ abhängt!)

Wählen wir $V_{\underline{l}\underline{k}}$ gemäss (11.2), so wird daraus

$$\Delta_{\underline{l}} = V_0 \sum_{\underline{k}}' \frac{\Delta_{\underline{k}}}{E_{\underline{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\underline{k}}}{2}\right), \quad (11.24)$$

wo der Strich bei der Summe bedeutet, dass die Summation auf ΔE um die Fermifläche beschränkt werden soll. Da die rechte Seite nicht von \underline{l} abhängt, haben wir die Form

$$\Delta_{\underline{k}} = \begin{cases} \Delta(T) & \text{für } |\epsilon_{\underline{k}} - \mu| \leq \Delta E, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (11.25)$$

Setzen wir dies in (11.24) ein und ersetzen Summationen durch Integrationen, so erhalten wir die Gleichung

$$1 = V_0 \frac{k_f^3 V}{2\pi^2} \int_{-\Delta E}^{\Delta E} d\epsilon_{\underline{k}} \left(\frac{\partial k}{\partial \epsilon_{\underline{k}}} \right)_{k_f} \frac{\tanh\left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\epsilon_{\underline{k}}^2 + \Delta^2(T)}\right]}{\sqrt{\epsilon_{\underline{k}}^2 + \Delta^2(T)}} \quad (11.26)$$

oder, wenn $N(0) = mV k_f / \pi^2 \hbar^2$ die Zustandsdichte auf der Fermifläche bezeichnet,

$$1 = V_0 N(0) \int_0^{\Delta E} d\epsilon_{\underline{k}} \frac{\tanh\left[\frac{\beta}{2} \sqrt{\epsilon_{\underline{k}}^2 + \Delta^2(T)}\right]}{\sqrt{\epsilon_{\underline{k}}^2 + \Delta^2(T)}}. \quad (11.27)$$

Diese Gleichung bestimmt die Temperaturabhängigkeit der Energiebreite $\Delta(T)$.

Die Energie der Quasiteilchen zu $\gamma_{\underline{k},\kappa}^{\#}$ in (11.14) (ge-

massen von der Fermifläche) zum Impuls \underline{k} ist

$E_{\underline{k}} = [E_{\underline{k}}^2 + \Delta^2(T)]^{1/2}$, was zeigt, dass $\Delta(T)$ die Energielücke im Anregungsspektrum ist.

Bei der kritischen Temperatur T_c verschwindet diese Lücke, und H' beschreibt dann ein ideales Fermigas. Nach (11.27) ist die kritische Temperatur durch die folgende Gleichung bestimmt*)

$$1 = N(0) V_0 \int_0^{\Delta E} d\varepsilon_{\underline{k}} \frac{\tanh(\beta_c \varepsilon_{\underline{k}}/2)}{\varepsilon_{\underline{k}}} = N(0) V_0 \int_0^{\beta_c(\Delta E/2)} \frac{\tanh x}{x} dx$$

$$= N(0) V_0 \ln(1.13 \beta_c \Delta E).$$

Somit erhalten wir die berühmte BCS-Gleichung

$$kT_c = 1.13 \Delta E e^{-1/N(0)V_0} \quad (11.28)$$

Aus (11.27) ergibt sich auch die Energielücke für $T=0$ aus ($\tanh \infty = 1$):

$$1 = N(0) V_0 \int_0^{\Delta E} d\varepsilon_{\underline{k}} \frac{1}{[E_{\underline{k}}^2 + \Delta^2(0)]^{1/2}} = N(0) V_0 \operatorname{arsh}^{-1} \frac{\Delta E}{\Delta(0)}. \quad (11.29)$$

Für schwache Kopplung $N(0)V_0 \ll 1$ erhält man daraus

$$\Delta(0) = 2 \Delta E e^{-1/N(0)V_0} \quad (11.30)$$

Durch Vergleich mit (11.28) erhalten wir die interessante Be-

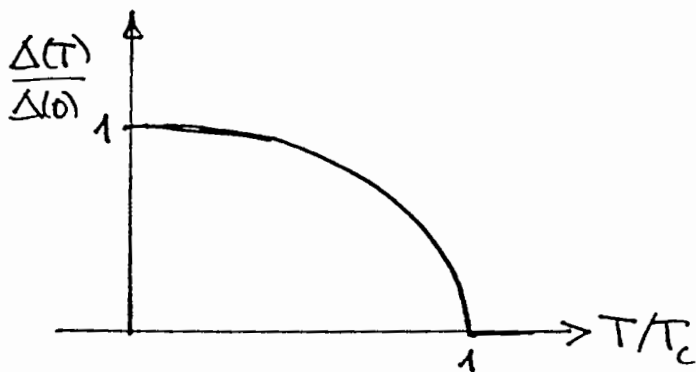
*) Es ist $\int_0^a \frac{\operatorname{arsh} x}{x} dx = \ln(2.26 a)$.

Zielerung

$$\frac{\Delta(0)}{kT_c} = 1.764. \quad (11.31)$$

Dies stimmt für klassische (BCS) Supraleiter gut mit dem Experiment überein.

Aus (11.27) kann man numerisch auch die T-Abhängigkeit von $\Delta(T)$ bestimmen und findet qualitativ den folgenden Verlauf:



In der Nähe der kritischen Temperatur gilt

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} = 1.74 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}. \quad (11.32)$$

Da die Quasiteilchen ein ideales Gas bilden, ist das grandkanonische Potential nach (6.9) (H' ist $H - \mu N$):

$$\Omega = -kT \cdot 2 \sum_{\underline{k}} \ln(1 + e^{-\beta E_{\underline{k}}}), \quad E_{\underline{k}} = \sqrt{\varepsilon_{\underline{k}}^2 + \Delta_{\underline{k}}^2},$$

$$\varepsilon_{\underline{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu. \quad (11.33)$$

Für die Entropie ergibt sich daraus nach einer kurzen Rechnung

$$S = - \frac{\partial \Omega}{\partial T} = -2k \sum \{ u_{\underline{k}} \ln u_{\underline{k}} + (1 - u_{\underline{k}}) \ln(1 - u_{\underline{k}}) \}. \quad (11.34)$$

Die spezifische Wärme ist deshalb ($n_k = [e^{\beta E_k + 1}]^{-1}$)

$$C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\beta \frac{\partial S}{\partial \beta} = 2\beta k \sum_{\underline{k}} \frac{\partial n_{\underline{k}}}{\partial \beta} \ln \left(\frac{n_{\underline{k}}}{1 - n_{\underline{k}}} \right)$$

$$= -2\beta k \sum_{\underline{k}} \frac{\partial n_{\underline{k}}}{\partial E_{\underline{k}}} \left(E_{\underline{k}}^2 + \frac{1}{2} \beta \frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right). \quad (11.35)$$

Der erste Term in diesem Ausdruck ist bei T_c stetig, aber nicht der zweite (siehe die T -Abhängigkeit von $\Delta(T)$ in der obigen Figur). In der Nähe von T_c ist $E_{\underline{k}} \approx \varepsilon_{\underline{k}}$ und damit lautet die Wärmekapazität gerade unterhalb T_c

$$C_V^< = 2\beta_c k \sum_{\underline{k}} (-1) \frac{\partial n_{\underline{k}}}{\partial |E_{\underline{k}}|} \left(\varepsilon_{\underline{k}}^2 + \frac{1}{2} \beta_c \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right)_{T_c} \right) \quad (T \approx T_c).$$

Gerade oberhalb T_c haben wir hingegen

$$C_V^> = 2\beta_c k \sum_{\underline{k}} (-1) \frac{\partial n_{\underline{k}}}{\partial E_{\underline{k}}} \varepsilon_{\underline{k}}^2 \quad (T \approx T_c). \quad (11.37)$$

Die Diskontinuität in der spezifischen Wärme bei der kritischen Temperatur ist somit

$$\Delta C_V = C_V^< - C_V^> = -\beta_c^2 k \sum_{\underline{k}} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \beta} \right)_{T_c} \frac{\partial n(|E_{\underline{k}}|)}{\partial |E_{\underline{k}}|}$$

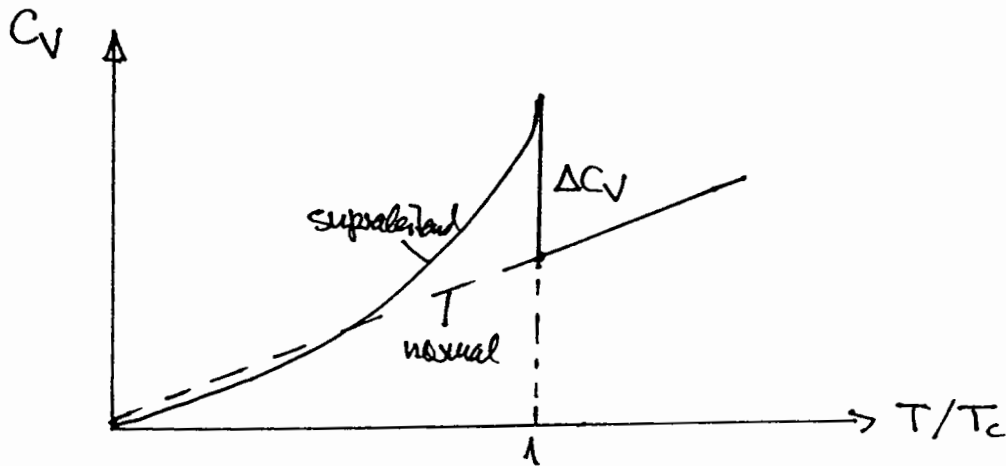
$$= N(0) \left(-\frac{\partial \Delta^2}{\partial T} \right)_{T_c}. \quad (11.38)$$

Beim letzten Gleichheitszeichen wurde $\partial n / \partial E \approx -\delta(E - E_f)$ gesetzt (kontrolliere die Einzelfheiten).

In der nächsten Figur wird die spezifische Wärme skizziert. Unterhalb T_c ergibt sich eine drastische Änderung gegenüber dem linearen Gesetz eines realen Fermigas (s.

6. (6.53). Für den relativen Sprung finden wir die universell gültige Beziehung (benutze (11.38), (11.37) und (11.32)):

$$\left| \frac{C_s(T) - C_n(T)}{C_n(T)} \right|_{T=T_c} = 1.43. \quad (11.39)$$



Für weitere Einzelheiten sei auf Lehrbücher über Supraleitung verwiesen (s. Literaturhinweise).

*

*

*

Anhang A : Wahrscheinlichkeitstheoretische Sätze, Birkhoff'scher Ergodensatz

Dieser Anhang gibt einige Ergänzungen zu § I.1.

Wir schliessen direkt an das Gesetz der grossen Zahlen an und interessieren uns für die Schwankungen der endlichen Partialsummen.

Zentraler Grenzwertsatz (spezielle Formulierung):

Es sei $(\xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ eine unabhängige Folge reeller, quadratisch integrierbarer, identisch verteilter Zufallsvariablen mit positiver Varianz σ . Dann konvergiert die Folge der Verteilungen P_{S_n} von

$$S_n = \frac{1}{\sigma \sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (\xi_i - \eta) \quad (A.1)$$

schwach*) gegen die Gauß'sche Normalverteilung $\mathcal{N}_{0,1}$:

$$d\mathcal{N}_{0,1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx. \quad (A.2)$$

Beweis : Siehe z.B. Bauer, Kap. IX, speziell §§ 50, 51.)

Damit können wir ungefähr die Wahrscheinlichkeit berechnen, mit welcher die Partialsummen $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i$ von η in (1.15) um einen gewissen Fehler abweichen. Es gilt nämlich:

*) Dies bedeutet

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int f dP_{S_n} = \int f d\mathcal{N}_{0,1}$$

für alle beschränkten stetigen Funktionen f auf \mathbb{R} .

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \alpha \leq \frac{1}{\sigma\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (\xi_i - \eta) < \beta \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\alpha}^{\beta} e^{-x^2/2} dx$$

(sogar gleichmässig in α und β). Deshalb werden die Zahlen

$$P \left\{ \gamma \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - \eta < \delta \right\} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{\gamma\sqrt{n}}{\sigma}}^{\frac{\delta\sqrt{n}}{\sigma}} e^{-x^2/2} dx$$

für grosse n beliebig wenig voneinander ab (und zwar gleichmässig in γ und δ). Insbesondere gilt

$$P \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - \eta \right| < \delta \right\} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{\delta\sqrt{n}/\sigma} e^{-x^2/2} dx.$$

Die W-Funktion für die Abweichung der $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i$ vom Mittelwert η ist also für grosse n gegeben durch

$$\rho(\delta) d\delta = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sqrt{n}}{\sigma} e^{-\delta^2 n / 2\sigma^2} d\delta. \quad (\text{A.3})$$

Insbesondere gilt für die mittlere Abweichung

$$\langle \delta^2 \rangle = \int_0^{\infty} \rho(\delta) \delta^2 d\delta = \sigma^2/n,$$

d.h.

$$\langle \delta^2 \rangle^{1/2} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}. \quad (\text{A.4})$$

Hokkeim können natürlich seltene Schwankungen auftreten, die grösser als σ/\sqrt{n} sind. Sehr feine Aussagen dazu macht das Gesetz des steilen Logarithmus. Bevor wir darauf zu sprechen kommen, zitieren wir noch einen Satz der aussagt, wie rasch die Konvergenz im zentralen Grenzwertsatz mindestens ist.

Satz (Berry-Esséen):

Es sei $(\xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ eine Folge von unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen mit $\langle \xi_k \rangle = 0$, $\langle \xi_k^2 \rangle = \sigma^2$ und $\langle |\xi_1|^3 \rangle < \infty$. Dann gilt für die Verteilungsfunktionen F_n der S_n in (A.1) $[F_n(x) = P\{S_n \leq x\}]$

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} |F_n(x) - \phi(x)| \leq \frac{C \langle |\xi_1|^3 \rangle}{\sigma^3 \sqrt{n}}, \quad (A.5)$$

mit
$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-y^2/2} dy, \quad (A.6)$$

wobei C eine Konstante im Intervall $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \leq C < 0.8$ ist.

(Beweis: Siehe Shiriyayev ^{2. Auflage}, § III.6 ¹¹, oder Gänscher-Stuk, § 4.2.)

Die Konvergenzordnung $n^{1/2}$ lässt sich i.a. nicht verbessern, wie einfache Beispiele zeigen.

Wir kommen nun zu einer berühmten bestmöglichen Aussage über das P -fast sichere Verhalten der Pfade $S_n(\omega) = \sum_{i=1}^n \xi_i(\omega)$, d.h. der zufälligen Wege, die entstehen, wenn man die Punkte $(n, S_n(\omega))$, $n=0,1,\dots$ durch lineare Strecken untereinander verbindet (s. Fig.).

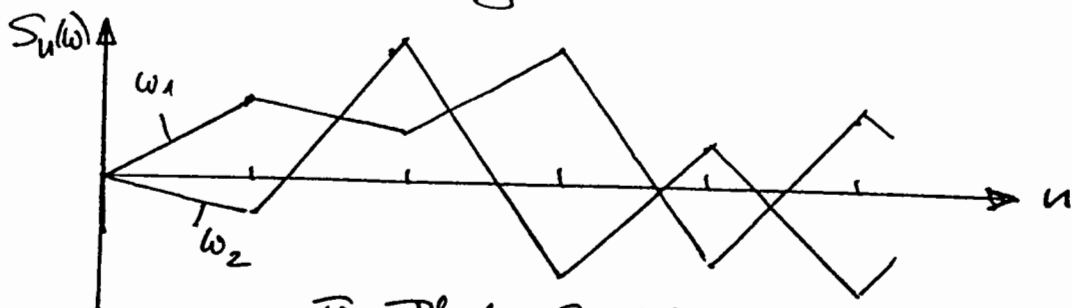


Fig. Pfade $S(\omega)$.

Dabei nehmen wir wieder an, dass $(\xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ eine Folge von unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen ist, welche zentriert seien ($\langle \xi_1 \rangle = 0$); wieder sei $\sigma = \langle \xi_1^2 \rangle$.

Aufgrund des starken Gesetzes der grossen Zahlen wissen wir, dass bis auf eine Menge vom \mathbb{P} -Mass null alle Pfade $S(\omega)$ schliesslich in dem durch die beiden Geraden $y = \pm \varepsilon x$ (für jedes $\varepsilon > 0$) gebildeten Winkelraum liegen. Ferner sagt der zentrale Grenzwertsatz aus, dass das Mass der Menge der ω , deren zugehörige $S(\omega)$ an der Stelle $x = n$ zwischen den beiden Parabelböden $y = \sigma \alpha \sqrt{x}$ und $y = \sigma \beta \sqrt{x}$ ($\alpha < \beta$) verlaufen, für grosse n durch $\Phi(\beta) - \Phi(\alpha)$ approximiert wird. Obgleich es demnach sehr unwahrscheinlich ist, dass für grosse n der standardisierte Weg zu (A.1), d.h. $\frac{1}{\sigma \sqrt{n}} S_n(\omega)$ (in unserer jetzigen Bezeichnung), z.B. das Niveau 10 überschreitet ($1 - \Phi(10) \approx 10^{-23}$), so können auch für noch so grosse n doch beliebig grosse Werte angenommen werden.

Wir führen nun den Begriff der Einküllenden der Pfade $S(\omega)$ ein. Darunter verstehen wir eine eventuell existierende Funktion $\psi(x)$ für die gilt:

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n}{\psi(n)} = 1, \quad \underline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n(\omega)}{\psi(n)} = -1 \quad \mathbb{P}\text{-fast sicher.} \quad (\text{A.7})$$

Zur Interpretation bemerken wir folgendes. Sei

$\Psi_{\varepsilon}^{\pm} = (1 \pm \varepsilon) \Psi$ ($\varepsilon > 0$), dann gilt — wie man leicht sehen kann (siehe Shiriyayev, p. 371) —

$S_n \leq \Psi_{\varepsilon}^+(n)$ mit Wahrsch. 1 für $n \geq n_0(\omega)$

$S_n \geq \Psi_{\varepsilon}^-(n)$ " " 1 für unendlich viele n .

Kann man dies auch so ausdrücken^{*}):

$$P\{ |S_n| \geq (1-\varepsilon)\Psi(n) \text{ i.o.} \} = 1, \quad (\text{A.8})$$

$$P\{ |S_n| \geq (1+\varepsilon)\Psi(n) \text{ i.o.} \} = 0. \quad (\text{A.9})$$

Man gilt der bemerkenswerte Sachverhalt:

Gesetz vom iterierten Logarithmus (Hartman-Winter):

Sei $(\xi_i)_{i \in \mathbb{N}}$ eine Folge von unabhängigen identisch verteilten Zufallsvariablen mit $\langle \xi_1 \rangle = 0$, $\langle \xi_1^2 \rangle = \sigma^2 < \infty$. Dann ist

$$\Psi(n) = \sqrt{2\sigma^2 n \log \log n} \quad (\text{A.10})$$

eine Einhüllende von $S(n)$.

(Beweis: Siehe Gäussler - Gule, §4.3)

* Es bedeutet (A_n eine Folge von Mengen)

$$\{A_n \text{ i.o.}\} \equiv \overline{\lim} A_n = \bigcap_{n=1}^{\infty} \bigcup_{k \geq n} A_k.$$

Beweis des Satzes von Cramér-Chernoff (s.p.I.16)

Ersetzt man die Folge (ξ_i) durch $(\xi_i - \eta - \varepsilon)$ bzw. $(-\xi_i)$, so erhält man anstelle von I_μ die Erzeugendefunktion

$$x \mapsto I_\mu(x + \eta + \varepsilon) \quad \text{bzw.} \quad x \mapsto I_\mu(-x).$$

Somit genügt es, für $\eta \leq 0$ die Ungleichung

$$P \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i \geq 0 \right\} \leq e^{-n I(0)} \quad (\text{A.11})$$

zu beweisen. Für $\eta \leq 0$ haben wir für alle $t \geq 0$

$$\begin{aligned} P \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i \geq 0 \right\} &= P \left\{ \xi_1 + \dots + \xi_n \geq 0 \right\} \\ &= P \left\{ e^{t(\xi_1 + \dots + \xi_n)} \geq 1 \right\} \leq \left\langle e^{t(\xi_1 + \dots + \xi_n)} \right\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} e^{t(x_1 + \dots + x_n)} d\mu(x_1) \dots d\mu(x_n) = \check{\mu}(t)^n, \end{aligned}$$

und daher

$$\log P \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i \geq 0 \right\} \leq n \log \check{\mu}(t) \quad \text{für alle } t \geq 0$$

oder

$$\frac{1}{n} \log P \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i \geq 0 \right\} \leq \sup \{ \log \check{\mu}(t) : t \in \mathbb{R}_+ \}. \quad (\text{A.12})$$

Nun ergibt sich aus (I.1.18) und $\eta \leq 0$ für alle $t < 0$

$$-\log \check{\mu}(t) \leq -\log \check{\mu}(t) + t\eta \leq 0.$$

Wegen $I_\mu \geq 0$ (siehe (I.1.20)) hat dies

$$I_\mu(0) = \sup \{ -\log \check{\mu}(t) : t \in \mathbb{R}_+ \}$$

zur Folge. Die Ungl. (A.12) besagt daher

$$\frac{1}{n} \log P \left\{ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i \geq 0 \right\} \leq \frac{I(0)}{\mu}$$

und dies ist gerade die Ungleichung (A.11). \square

Beweis des Birkhoff'schen Ergodensatzes

Wir betrachten einen Massraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ mit σ -endlichem Mass μ und eine masserhaltende Transformation $T: \Omega \rightarrow \Omega$. Der Birkhoff'sche Ergodensatz besagt folgendes: Für jedes $f \in L^1(\mu)$ konvergiert die Reihe

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i(\omega)) \quad (\text{A.13})$$

fast überall gegen eine Funktion $f^* \in L^1(\mu)$. Ferner gilt $f^* \circ T = f^*$ fast überall und für ein endliches Mass ($\mu(\Omega) < \infty$) gilt überdies

$$\int f^* d\mu = \int f d\mu. \quad (\text{A.14})$$

Im anschließenden Beweis spielt der folgende Operator $U_T: L^1(\mu) \rightarrow L^1(\mu)$ eine wichtige Rolle

$$(U_T f)(\omega) = f(T(\omega)), \quad f \in L^1(\mu). \quad (\text{A.15})$$

Da T masserhaltend ist gilt offensichtlich

$$\|U_T f\|_1 = \|f\|_1. \quad (\text{A.16})$$

U_T lässt den reellen Raum $L^1_{\mathbb{R}}(\mu)$ invariant und ist auf diesem positiv: aus $f \geq 0$ folgt $U_T f \geq 0$. Mit positiven Operatoren befasst sich der nächste Satz, der beim Beweis des Birkhoff'schen Ergodensatzes eine wichtige Rolle spielt.

Maximaler Ergodensatz. Sei $U: L^1_{\mathbb{R}}(\mu) \rightarrow L^1_{\mathbb{R}}(\mu)$ ein positiver linearer Operator mit $\|U\| \leq 1$. Ferner sei $N > 0$ eine ganze Zahl und $f \in L^1_{\mathbb{R}}(\mu)$. Wenn $f_0 = 0$, $f_n = f + Uf + U^2f + \dots + U^{n-1}f$ ($n \geq 1$) und $F_N = \max_{0 \leq n \leq N} f_n (\geq 0)$, dann gilt

$$\int_{\{\omega: F_N(\omega) > 0\}} f d\mu \geq 0. \quad (\text{A.12})$$

Beweis: Für $0 \leq n \leq N$ ist $F_N \geq f_n$, also (da F_N nichtnegativ in $L^1_{\mathbb{R}}(\mu)$ ist) $UF_N \geq Uf_n$ und somit $UF_N + f \geq f + Uf_n = f_{n+1}$. Dies gibt

$$\begin{aligned} UF_N(\omega) + f(\omega) &\geq \max_{1 \leq n \leq N} f_n(\omega) \\ &= \max_{\substack{0 \leq n \leq N \\ \uparrow}} f_n(\omega) \quad \text{für } F_N(\omega) > 0 \\ &= F_N(\omega). \end{aligned}$$

Also ist $f \geq F_N - UF_N$ auf der Menge $A = \{\omega: F_N(\omega) > 0\}$ und damit haben wir (beachte $F_N = 0$ auf $\Omega \setminus A$):

$$\begin{aligned} \int_A f d\mu &\geq \int_A F_N d\mu - \int_A UF_N d\mu = \int_{\Omega} F_N d\mu - \int_A UF_N d\mu \\ &\geq \int_{\Omega} F_N d\mu - \int_{\Omega} UF_N d\mu \quad \text{da } F_N \geq 0 \text{ und somit } UF_N \geq 0. \end{aligned}$$

Bemerken wir noch $\|U\| \leq 1$, so ist in der Tat $\int_A f d\mu \geq 0$. \square

Wichtig ist auch das folgende

Korollar. Sei $T: \Omega \rightarrow \Omega$ masserhaltend. Für $g \in L^1_{\mathbb{R}}(\mu)$ sei ferner

$$\mathbb{B}_\alpha = \left\{ \omega \in \Omega \mid \sup_{n \geq 1} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} g(T^i(\omega)) > \alpha \right\}.$$

Dann gilt

$$\int_{\mathbb{B}_\alpha \cap A} g d\mu \geq \alpha \mu(\mathbb{B}_\alpha \cap A) \quad \text{falls } T^{-1}A = A \text{ und } \mu(A) < \infty. \quad (\text{A.18})$$

Beweis: Wir beweisen die Behauptung zunächst für $\mu(\Omega) < \infty$ und $A = \Omega$. Setzen wir $f = g - \alpha$, so ist

$$\mathbb{B}_\alpha = \bigcup_{N=0}^{\infty} \left\{ \omega \mid F_N(\omega) > 0 \right\},$$

und damit nach dem maximalen Ergodensatz $\int f d\mu \geq 0$ oder $\int_{\mathbb{B}_\alpha} g d\mu \geq \alpha \mu(\mathbb{B}_\alpha)$. Im allgemeinen Fall wende \mathbb{B}_α an das oben Bewiesene an auf $T^N A$, was (A.18) ergibt. \square

Nun kommen wir endlich zum Beweis des Birkhoff'schen Ergodensatzes. Wir nehmen dabei $\mu(\Omega) < \infty$ an; der allgemeine Fall lässt sich leicht darauf zurückführen. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit dürfen wir in (A.13) $f \in L^1_{\mathbb{R}}(\mu)$ wählen. Für ein solches f setzen wir

$$f^*(\omega) = \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i \omega) \quad (\text{A.18})$$

und

$$f_*(\omega) = \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i \omega). \quad (\text{A.19})$$

Beide Funktionen sind unter T invariant, was aus der Identität

$$\frac{n+1}{n} a_{n+1}(\omega) - a_n(T\omega) = \frac{f(\omega)}{n}$$

für $a_n(\omega) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n f(T^i \omega)$ folgt. Wir müssen zeigen, dass $f^* = f_*$ fast überall und dass f^*, f_* zu $L^1(\mu)$ gehören.

Für reelle Zahlen α, β setzen wir

$$E_{\alpha, \beta} = \{ \omega \in \Omega \mid f_*(\omega) < \beta \text{ und } \alpha < f^*(\omega) \}.$$

Die Menge $N = \{ \omega \mid f_*(\omega) < f^*(\omega) \}$ lässt sich folgendermaßen darstellen

$$N = \bigcup \{ E_{\alpha, \beta} \mid \beta < \alpha, \alpha, \beta \in \mathbb{Q} \}.$$

Wenn wir also gezeigt haben, dass $\mu(E_{\alpha, \beta}) = 0$, so folgt $f^* = f_*$ fast überall. Da klarerweise $T^{-1}E_{\alpha, \beta} = E_{\alpha, \beta}$ und $E_{\alpha, \beta} \cap B_\alpha = E_{\alpha, \beta}$ für $B_\alpha := \{ \omega \in \Omega \mid \sup_{n \geq 1} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i \omega) > \alpha \}$, gilt nach dem obigen Lemma

$$\int_{E_{\alpha, \beta}} f d\mu = \int_{E_{\alpha, \beta} \cap B_\alpha} f d\mu \geq \alpha \mu(E_{\alpha, \beta} \cap B_\alpha) = \alpha \mu(E_{\alpha, \beta}),$$

d.h.

$$\int_{E_{\alpha, \beta}} f d\mu \geq \alpha \mu(E_{\alpha, \beta}).$$

Vertauschen wir f, α, β mit $-f, -\beta, -\alpha$, so folgt wegen $(-f)^* = -f_*$, $(-f)_* = -f^*$ auch

$$\int_{E_{\alpha, \beta}} f d\mu \leq \beta \mu(E_{\alpha, \beta}).$$

Zusammen gibt dies $\alpha \mu(E_{\alpha, \beta}) \leq \beta \mu(E_{\alpha, \beta})$, somit für $\beta < \alpha$ tatsächlich $\mu(E_{\alpha, \beta}) = 0$. Damit ist also $f_* = f^*$ fast überall, d.h.

$$\frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i \omega) \rightarrow f^* \text{ fast überall.}$$

Nun zeigen wir, dass $f^* \in L^1(\mu)$, indem wir den folgenden Teil des Fatou'schen Lemmas^{*)} benutzen: Ist $\{g_n\}$ eine Folge von nicht-negativen integrierbaren Funktionen mit $\liminf \int g_n d\mu < \infty$, welche (punktweise) konvergiert, so ist $\lim g_n \in L^1(\mu)$. Setzen wir nun $g_n(\omega) = \left| \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i \omega) \right|$, so gilt $\int g_n d\mu \leq \int |f| d\mu$ und wir können das Fatou-Lemma anwenden:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} g_n(\omega) = \left| \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} f(T^i \omega) \right| = |f^*(\omega)|$$

(fast überall) gehört zu $L^1(\mu)$.

Wir müssen noch zeigen, dass (für $\mu(\Omega) < \infty$)

$$\int f d\mu = \int f^* d\mu. \quad (A.20)$$

Dazu sei $D_k^u = \left\{ \omega \in \Omega \mid \frac{k}{n} \leq f^*(\omega) < \frac{k+1}{n} \right\}$, so $k \in \mathbb{Z}$, $n \geq 1$. Für jedes kleine $\varepsilon > 0$ ist $D_k^u \cap B_{\frac{k}{n} - \varepsilon} = D_k^u$, und

^{*)} Siehe z.B. H. Bauer, Mass- und Integralktheorie, § 15.2.

deshalb gilt nach dem obigen Korollar

$$\int_{D_k^n} f d\mu \geq \left(\frac{k}{n} - \varepsilon\right) \mu(D_k^n) \Rightarrow \int_{D_k^n} f d\mu \geq \frac{k}{n} \mu(D_k^n). (*)$$

Dann haben wir

$$\int_{D_k^n} f^* d\mu \leq \frac{k+1}{n} \mu(D_k^n) \stackrel{(*)}{\leq} \frac{1}{n} \mu(D_k^n) + \int_{D_k^n} f d\mu.$$

Summieren wir dies über k , so kommt

$$\int_{\Omega} f^* d\mu \leq \frac{\mu(\Omega)}{n} + \int_{\Omega} f d\mu \quad \text{für alle } n \geq 1;$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} f^* d\mu \leq \int_{\Omega} f d\mu.$$

Wenden wir dies auf $-f$ an, $\int_{\Omega} (-f)^* d\mu \leq \int_{\Omega} -f d\mu$, so schließen wir auch auf

$$\int_{\Omega} f_* d\mu \geq \int_{\Omega} f d\mu.$$

Da aber $f_* = f^*$ fast überall folgt aus dieser Ungl. die Behauptung (A.20). \square

Binokularer Ergodensatz für Flüsse

Wir können diesen leicht auf den Satz für Kaskaden zurückführen. Dazu setzen wir für $f \in L^1(\mu)$

$$g(x) = \int_0^1 f(\Phi_t(x)) dt$$

und notieren für $T = n \in \mathbb{N}$

- A13

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T f(\phi_t(x)) dt &= \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \int_k^{k+1} f(\phi_t(x)) dt \\ & \quad \underbrace{\phantom{\int_k^{k+1}}}_{\phi_{t-k}(\phi_k(x))} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \int_0^1 f(\phi_{t'}(\phi_k(x))) dt' = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} g(\phi_k(x)) \\ & \quad \underbrace{}_{(\phi_1 \circ \phi_1 \circ \dots \circ \phi_1)(x)} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} g(\phi_1^k(x)) \rightarrow f^*(x) \text{ fast überall.} \end{aligned}$$

Für ein beliebiges $T > 0$ und $n = [T]$ (Gaußsche Klammer) haben wir damit

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T f(\phi_t(x)) dt &= \frac{n}{T} \frac{1}{n} \int_0^n f(\phi_t(x)) dt + \frac{1}{T} \int_n^T f(\phi_t(x)) dt \\ & \quad \downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \\ & \quad f^*(x) \qquad \qquad \qquad 0 \end{aligned}$$

$\rightarrow f^*(x)$ fast überall.

Bemerkung zur Eindeutigkeit des mikrokan. Ensembles

Ist der Fluss auf der Energiemenge (bez. μ_E) ergodisch, so gibt es kein zweites, bezüglich μ_E absolut stetiges μ -Maß, welches ebenfalls ergodisch ist. Dies folgt aus einem allgemeinen Satz der Ergodentheorie (siehe P. Walters, loc. cit., Theorem 6.10, p. 152).

Anhang B. Zeitpfeil und Boltzmann - Entropie

Die Frage, wie es zur makroskopischen Bedingung der Zeitumkehrinvarianz - bzw. zeitumkehrinvarianten Mikrogesehen - kommt, gehört zu den Themen über die die Debatte offenbar nie abrisst. Ich bin aber der Meinung, dass wir - dank Boltzmann - den thermodynamischen Zeitpfeil für räumlich lokalisierte makroskopische Systeme grundsätzlich verstehen. Es gibt eben, wie Boltzmann (als Dufur in der Wüste) betonte, überwiegend viel mehr Mikrozustände, die zu einem makroskopischen Gleichgewichtszustand gehören, als für einen relativ geordneten Zustand weit weg vom Gleichgewicht. Deshalb erfolgt der Übergang von relativ geordneten zu ungeordneten Zuständen so viel wahrscheinlicher als der umgekehrte Vorgang, dass letzteres auch auf astronomischen Zeitskalen nie vorkommt. Dies soll im folgenden näher ausgeführt werden.

Wesentlich bei all diesen Betrachtungen ist, dass es für makroskopische Systeme mit ihren ungeheurer vielen Freiheitsgraden eine deutliche Trennung zwischen mikroskopischen und makroskopischen Skalen gibt. Nur deshalb können wir vom typischen Verhalten eines individuellen Systems - etwa einer Dampflokmaschine - sprechen. Dieses typische Verhalten ist auch weitgehend unabhängig von der spezifischen mikroskopischen Dynamik (ergodisch, mischend, chaotisch, ...) und hängt zudem nicht davon ab, ob gewisse Annahmen über die Verteilung der Mikrozustände (Gibbs a priori Wahrscheinlichkeiten, etc) erfüllt sind. Man sollte deshalb das irreversible makroskopische

Verhalten nicht mit dem deterministischen, aber zeitsymmetrischen Verhalten von vielen Systemen mit wenigen Freiheitsgraden verwechseln. Wie wesentlich der Übergang zu sehr vielen Freiheitsgraden ist, haben wir bereits in der kinetischen Gastheorie am Beispiel des Kac'schen Ringmodells erläutert (vgl. auch die Analyse des Ehrenfest'schen Urnenmodells im Anhang C). Erst in diesem Grenzfall bekommen wir deterministische makroskopische Gesetze vom Typus der Hydrodynamik (Bsp. Diffusionsgleichung), welche die uns bekannten charakteristischen irreversiblen Vorgänge beschreiben.

Die Boltzmann - Entropie

Zu jedem Makrozustand M (charakterisiert durch die ^{von}Werte von wenigen makroskopischen Observablen innerhalb makroskopischer Körnerfehler) gehört ein Gebiet Γ_M des Phasenraumes Γ ,

$$\Gamma_M = \{ \mu \in \Gamma \mid H(\mu) = M \}. \quad (\text{B.1})$$

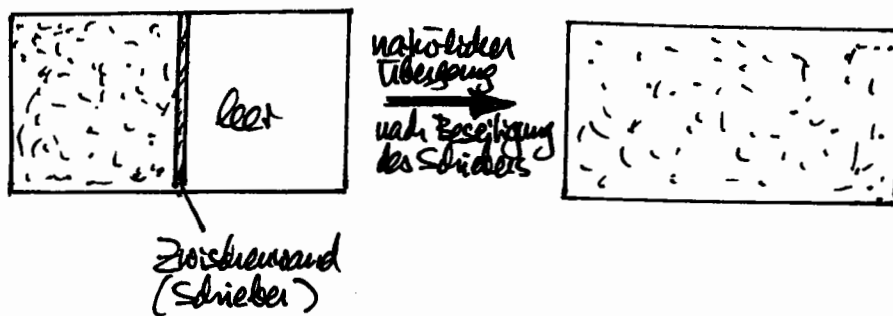
Das Liouville'sche Volumen von Γ_M bezeichnen wir mit $|\Gamma_M|$. Die Boltzmann - Entropie, $S_B(M)$, des Makrozustandes M ist

$$\boxed{S_B(M) = k \log |\Gamma_M|}. \quad (\text{B.2})$$

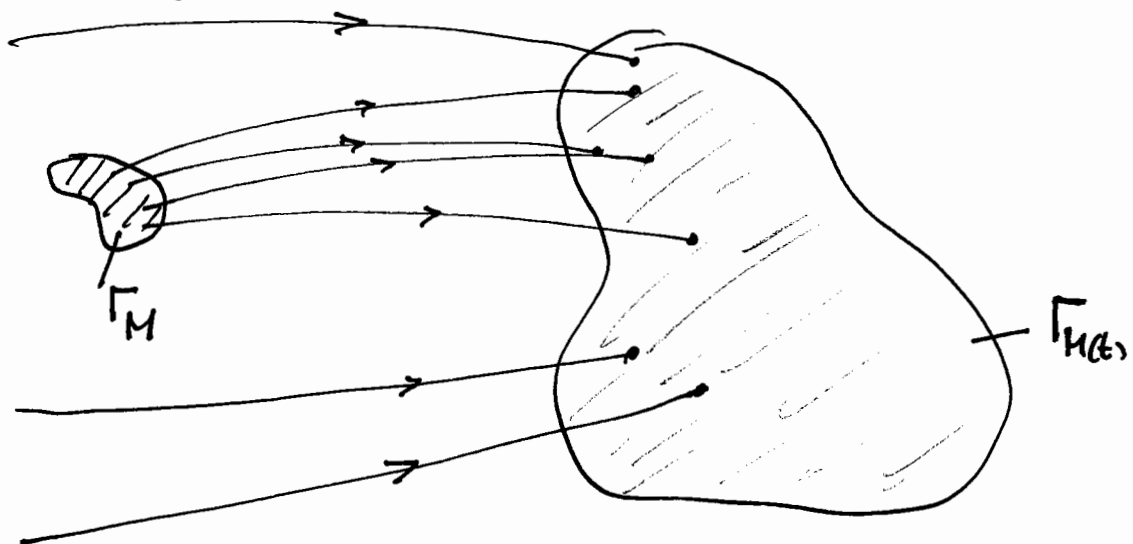
(Dies verallgemeinert die Formeln (I.2.7,8) und (I.5.3).)
Ein Mikrozustand $\mu \in \Gamma$ entwickelt sich zeitlich mit dem Fluss ϕ_t der mikroskopischen Dynamik (zum Haupttext)

Vektorfeld $X_{\#}$) : $u(t) = \phi_t^*(u)$. Zu $u(t)$ gehört ein zeit-
 abhängiger Makrozustand $M(t) = M(u(t))$ und dazu
 wiederum die zeitabhängige Boltzmann - Entropie $S_B(M(t)) =$
 $k \log |\Gamma_M(t)|$. Im Unterschied zu Gibbs'scher Entropie,
 $S_G = -k \int \rho \log \rho \, d\Gamma^*$ (S I.4), ändert sich diese mit der
 Zeit! Nur im Gleichgewicht stimmen die beiden überein.

Beobachten wir als präparierten Anfangszustand z.B. ein
 Gas wie im linken Teil der Figur:



und haben wir die makroskopische Zwangsbedingung auf
 (Beseitigung des Schiebers), so wird ein mikroskopischer
 Phasenpunkt "meistens" in neu geöffnete Gebiete von Γ
 wandern, für die Γ_M vergleichsweise sehr gross ist (s. Fig.).



Die Boltzmann - Entropie wird deshalb generell zunehmen.

Die obige Figur ist gewöhnlich unterbrieben, denn nach (I.2.11) ist für ein ideales Gas

$$\begin{aligned} \Phi^*(E, N) &= \int_{\{\sum_i p_i^2 / 2m \leq E\}} \prod_{i=1}^N d^3x_i d^3p_i / N! \\ &= \frac{V^N}{N!} (2mE)^{3N/2} \text{Vol} [B_{3N}(1)], \end{aligned} \quad (3.3)$$

und folglich ist das Verhältnis dieser Größe für die beiden Situationen in der ersten Figur (bei gleicher Energie)

$$\Phi_{\text{rechts}}^* / \Phi_{\text{links}}^* = 2^N \sim 10^{20^{23}} \approx 10^{10^{20}}, \quad (3.4)$$

eine wahrhaft gigantische Zahl. (Im Vergleich dazu ist das Verhältnis des Volumens des beobachtbaren Universums zur Ausdehnung eines Protons eine tatsächlich kleine Zahl!) Entsprechend ist das Verhältnis der beiden Boltzmann-Entropien

$$S_B^{\text{rechts}} / S_B^{\text{links}} = N \underset{\substack{\uparrow \\ \downarrow \\ 0}}{\text{klog}} 2. \quad (3.5)$$

Deshalb bleibt das System dem Gleichgewichtszustand zu. Ist dieser erreicht, so können wir nur noch kleine Schwankungen um diesen beobachten. Eine Rückkehr zum ursprünglichen Zustand wird über das Alter des Universums nicht vorkommen, denn die Poincaré-Wiederkehrzeiten sind unermesslich groß.

Phasenraum und Wahrscheinlichkeiten

Wesentlich für Boltzmanns Argumentation ist, dass es eine Beziehung gibt zwischen Phasenvolumen und Wahrscheinlichkeit.

Diese besteht, wie wir in § I.1 (siehe auch Anhang A) gesehen haben, stark für ergodische Systeme, denn für solche ist das Phasenvolumen eines Gebüdes Δ auf der Energiefläche (bezogen auf das induzierte Masses) proportional zur Verweilzeit eines Einzelsystems in Δ . Für Boltzmanns Auffassung muss aber keineswegs strikte Ergodizität bestehen, wie wir auch in anderem Zusammenhang in § I.1 betont haben. Das unvermeidliche Aufbrechen von deterministischen Chaos wird wohl dafür sorgen, dass zumindest eine milde "effektive" Form von Ergodizität gilt. Zudem wird es für die qualitativen Aspekte der Irreversibilität nicht so darauf ankommen, genau welches Mass zur Beurteilung von Wahrscheinlichkeiten verwendet wird.

Für eine befriedigende Klärung des Zeitpfeils müssten wir auch verstehen, wie es zu Anfangszuständen kleiner Entropie kommt. Im Laboratorium ist dies natürlich kein Problem, da Experimentalphysiker selbst in niedrigen Entropiezuständen sind. Wenn man aber dieser Frage weiter nachgeht, wird man am Ende unvermeidlich zu kosmologischen Beobachtungen gebracht. Mit Recht sagte Feynman: "It is necessary to add to the physical laws the hypothesis that in the past the universe was more ordered, in the technical sense, than it is today.... to make an understanding of the irreversibility" (R. Feynman, The Character of Physical Law).

In dieser Beziehung ist unser Verständnis natürlich noch sehr dünn und ein beliebiger Gegenstand von Spekulation.

lehnen^{*)}. Es ist dies nicht der Ort, darauf näher einzugehen.

Davon abgesehen, ist unser Verständnis auch insofern noch unbefriedigend, als wir wegen unserer beschränkten makroskopischen Fähigkeiten nicht in der Lage sind, die messbaren makroskopischen Gesetze vom Typus der Hydrodynamik konsequent aus einer realistischen mikroskopischen Dynamik abzuleiten. Dies gelingt nur für sehr vereinfachte Modelle, die lediglich Karikaturen der Wirklichkeit sind.

Für weiterführende Beobachtungen und Literaturhinweise verweise ich auf

J.L. Lebowitz, Boltzmann's Entropy and Time's Arrow,
Physics Today, Sept. 1993, p32.

Siehe auch die anschließende Kontroverse in
Physics Today.

* * *

*) Siehe, z.B., R. Peurbae, The Emperor's New Mind (Oxford University Press 1990), Kap. 7; deutsche Übersetzung:

ANHANG C. Mikroreversibilität und Makroirreversibilität am Beispiel des Ehrenfest'schen Uhrenmodells

Wir betrachten mit Ehrenfest $2N$ Kugeln, welche auf zwei Urnen U_0, U_1 verteilt sind. Ein Mikrozustand wird also durch (x_1, \dots, x_{2N}) ($x_i = 0, 1$) beschrieben, wobei $x_i = 0$ bedeutet, dass die i -te Kugel in U_0 ist und für $x_i = 1$ ist die Kugel in U_1 . Die Ziterevolution ist folgendermaßen definiert: Zu den Zeiten $t=1, 2, \dots$ wähle man zufällig eine Zahl aus $(1, \dots, 2N)$ und tausche die Kugel mit der betreffenden Nummer in die andere Urne.

Der mikrokanonische Zustand entspricht dem uniformen Wahrscheinlichkeitsmass auf dem Phasenraum $\Omega =$

$\{x = (x_1, \dots, x_{2N}) : x_i = 0, 1\}$, bestimmt durch $\mu(x) = \frac{1}{2^{2N}}$.

Wir interessieren uns für die "makroskopische Observable"

$X = \sum_{i=1}^{2N} x_i$. Bezüglich μ hat diese die Wahrscheinlichkeits-

Verteilung

$$\pi_n := \mu(X=n) = 2^{-2N} \binom{2N}{n}. \quad (1)$$

Für diese Binomialverteilung ist der Mittelwert $\langle X \rangle = N$ und die Varianz $V(X) = N/2$.

Hinsichtlich der makroskopischen Observablen X (= Anzahl der Kugeln in U_1) liegt eine Markoffsche-Kette vor. Es bezeichne X_t ($t=0, 1, 2, \dots$) die Zahl der Kugeln in U_1 zur Zeit $t=0, 1, \dots$. X_t hat also diskrete Werte im Zustandsraum $S = \{0, 1, \dots, 2N\}$, $X_t: \Omega \rightarrow S$.

Die probabilistischen Eigenschaften von $\{X_t\}_{t \in \mathbb{N}}$ sind durch die Matrix $\mathbf{P} = (p_{nm})$ der Übergangswahrscheinlichkeiten

$$p_{nm} = P(X_{t+1} = m | X_t = n) \quad (2)$$

(P -W-Mass auf Ω) bestimmt. In unserem Modell sind diese offensichtlich

$$p_{n, n-1} = \frac{n}{2N}, \quad p_{n, n+1} = 1 - \frac{n}{2N}, \quad \text{alle anderen} = 0. \quad (3)$$

(Die Zustände 0 und $2N$ sind reflektierende Barrieren.)

Offensichtlich ist $\{X_t\}$ eine irreduzible wiederkehrende Kette.

Ferner rechnet man leicht nach, dass $(\mathbf{P}^2)_{nn} > 0$, weshalb die Kette periodisch ist und die Periode $d=2$ hat. Damit

ist die Kette ergodisch und hat somit eine eindeutige stationäre Verteilung, welche gerade durch das ursprüngliche Mass (1) gegeben ist, und die mittleren Wiederkehrzeiten t_n der Zustände $n \in S$ sind nach einem bekannten Satz

$$t_n = \pi_n^{-1} = 2^{2N} \frac{n! (2N-n)!}{(2N)!}. \quad (4)$$

Wir studieren nun die "makroskopische Dynamik".

Die Vorwärtsgleichung für die Verteilungen $p_n(t) = P(X_t = n)$

* Wir benutzen im folgenden einige grundlegende Begriffe und Tabellen aus der Theorie der Markoff-Ketten; siehe dazu A.N. Shiryaev, § I.12 u. Kap. VIII, oder G.R. Grimmett & D.R. Stirzaker, Kap. 6.

laufen aufgrund der Markoff-Eigenschaft,

$$P(X_t = n | X_0, X_1, \dots, X_{t-1}) = P(X_t = n | X_{t-1}), \quad (5)$$

$$p_n(t+1) = \sum_m p_m(t) p_{mn} = p_{n-1}(t) p_{n-1,n} + p_{n+1}(t) p_{n+1,n}$$

oder mit (3)

$$p_n(t+1) = p_{n-1}(t) \left[1 - \frac{n-1}{2N} \right] + p_{n+1}(t) \frac{n+1}{2N}. \quad (6)$$

Ersieht sei an dieser Stelle noch, dass der Markoff-Prozess bezüglich der stationären Verteilung π reversibel ist,

$$\pi_n p_{nm} = \pi_m p_{mn}, \quad (2)$$

was man sofort nachprüft.

Wir betrachten nun X_t auf langen Zeitskalen $t = 2N\tau$, $\tau = O(1)$, und auf "makroskopischen Skalen", d.h. wir untersuchen

$$\xi(\tau) := \frac{X_{2N\tau}}{2N} \quad (8)$$

im Grenzfall $N \rightarrow \infty$. Es wird sich zeigen, dass in diesem Grenzfall die zeitliche Entwicklung von $\xi(\tau)$ völlig deterministisch verläuft. Dazu berechnen wir die Zeitentwicklung der Erwartungswerte

$$f_1(\tau) := \langle \xi(\tau) \rangle, \quad f_2(\tau) := \langle \xi^2(\tau) \rangle. \quad (9)$$

Dafür benötigen wir die bedingten Erwartungen $\langle \xi(\tau + \frac{1}{2N}) | \xi(\tau) = f \rangle$, $\langle \xi^2(\tau + \frac{1}{2N}) | \xi(\tau) = f \rangle$ für die Zeit-

Zunächst $\Delta\tau = 1/2N$ (entsprechend $\Delta t = 1$). Da

$$\begin{aligned} \langle X_{t+1} | X_t = u \rangle &= \sum_u u P(X_{t+1} = u | X_t = u) = \sum_u u p_{uu} \\ &\stackrel{(3)}{=} (u+1) \left(1 - \frac{u}{2N}\right) + (u-1) \frac{u}{2N} \end{aligned} \quad (10)$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle \Xi(\tau + \frac{1}{2N}) | \Xi(\tau) = f \rangle &= 2N \langle X_{t+1} | X_t = \frac{u}{2N} \rangle \\ &= (1-f) \left(f + \frac{1}{2N}\right) + f \left(f - \frac{1}{2N}\right); \end{aligned} \quad (11)$$

ebenso

$$\langle \Xi^2(\tau + \frac{1}{2N}) | \Xi(\tau) = f \rangle = (1-f) \left(f + \frac{1}{2N}\right)^2 + f \left(f - \frac{1}{2N}\right)^2. \quad (12)$$

Wir haben also

$$\langle \Xi(\tau + \frac{1}{2N}) | \Xi(\tau) = f \rangle = f + \frac{1-2f}{2N}, \quad (13)$$

$$\langle \Xi^2(\tau + \frac{1}{2N}) | \Xi(\tau) = f \rangle = f^2 + \frac{2f-4f^2}{2N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (14)$$

oder

$$\langle \Xi(\tau + \frac{1}{2N}) | \Xi(\tau) \rangle = \Xi(\tau) + \frac{1-2\Xi(\tau)}{2N}, \quad (15)$$

$$\langle \Xi^2(\tau + \frac{1}{2N}) | \Xi(\tau) \rangle = \Xi^2(\tau) + \frac{2\Xi(\tau) - 4\Xi^2(\tau)}{2N} + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (16)$$

Bringen wir davon die Erwartungswerte, so folgt mit den Def. (9)

$$f_1(\tau + \frac{1}{2N}) = f_1(\tau) + \frac{1}{2N} (1 - 2f_1(\tau)), \quad (17)$$

$$f_2(\tau + \frac{1}{2N}) = f_2(\tau) + \frac{1}{N} [f_1(\tau) - 2f_2(\tau)] + O\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (18)$$

Für $N \rightarrow \infty$ erfüllen f_1, f_2 die Differentialgleichungen

$$\left| \frac{df_1}{d\tau} = 1 - 2f_1, \quad \frac{df_2}{d\tau} = 2(f_1 - 2f_2) \right. \quad (19)$$

Die Varianz von $\Xi(\tau)$ ist $V(\tau) = f_2(\tau) - f_1^2(\tau)$ und erfüllt also

$$\frac{dV(\tau)}{d\tau} = -4V(\tau). \quad (20)$$

Mittelwert und Varianz von $\Xi(\tau)$ ändern sich folgendermassen im Limes $N \rightarrow \infty$ gemäss

$$\langle \Xi(\tau) \rangle = \frac{1}{2} + \text{const} e^{-2\tau}, \quad V(\Xi(\tau)) = \text{const} e^{-4\tau}; \quad (21)$$

d.h. $\langle \Xi(\tau) \rangle$ nähert sich auf der Zeitskala τ rasch dem Wert $\frac{1}{2}$ und die Schwankungen verschwinden sehr schnell.

Wir sehen also, dass sich $\Xi(\tau)$ für sehr grosse N mit hoher Genauigkeit deterministisch gemäss der "Boltzmann-Gl." $\frac{df}{d\tau} = 1 - 2f$ ändert, deren Lösungen rasch dem Gleichgewicht $f = \frac{1}{2}$ zustreben.

Um zu sehen, wie rasch sich das irreversible Verhalten für $N \rightarrow \infty$ einstellt, beobachten wir zuerst die mittleren Wiederkehrzeiten t_f für Zustände mit f in der Nähe von $\frac{1}{2}$ und für solche weg von $f = \frac{1}{2}$ (für grosse Abweichungen). Es ist nach (4)

$$t_f = \pi_n^{-1} \quad \text{für} \quad \frac{n}{2N} = f. \quad (22)$$

Für $f \approx \frac{1}{2}$ können wir t_f mit dem lokalen Gauß-
 wertsatz von Poivre-Laplace abschätzen. Danach können wir
 die Binomialverteilung (1) folgendermaßen approximieren^{*)}

$$\pi_{N+x\sqrt{\frac{N}{2}}} \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi N/2}} e^{-x^2/2} \quad (23)$$

Somit ist

$$t_f = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{2N}} \approx \frac{\sqrt{2\pi} \sqrt{2N}}{2} e^{x^2/2}$$

Auf der Skala $\pi = t/2N$ erhalten wir

$$\pi_{1/2 + \frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{2N}}} \approx \frac{\sqrt{2\pi}}{2} \frac{1}{\sqrt{2N}} e^{x^2/2} \quad (24)$$

Diese Wiederkehrzeiten innerhalb des "normalen" Fluktuations-
 regimes sind also (in der π -Skala) kurz. Halten wir
 aber $f = \frac{1}{2}$ für $N \rightarrow \infty$ fest, so werden die Wiederkehr-
 zeiten "überaschaunisch": Für $f = \frac{n}{2N} > \frac{1}{2}$ (fest), ist

$$\frac{t_f}{t_{1/2}} = \frac{n! (2N-n)!}{(N!)^2}$$

Mit der Stirlingschen Formel $n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n}$ folgt

*) Für die Binomialverteilung $P_n(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$ ($0 < p < 1$)
 gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{np(1-p)} P_n(k)}{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}} = 1$, wo $x = \frac{k-np}{\sqrt{np(1-p)}}$.

In (1) ist $n=2N$, $p=1/2$ ($\Rightarrow k = N + x\sqrt{\frac{N}{2}}$).

-C2

$$\frac{t_f}{t_{1/2}} \approx \frac{n^4 (2N-n)^{2N-n}}{(N^N)^2} = 2^{2N} [f^f (1-f)^{1-f}]^{2N}$$

$$= e^{2N [\ln 2 + f \ln f + (1-f) \ln(1-f)]}$$

dh.

$$\frac{t_f}{t_{1/2}} \approx e^{2N [h(\frac{1}{2}) - h(f)]}$$

oo

$$h(f) := - [f \ln f + (1-f) \ln(1-f)]$$

die Entropiefunktion ist. Bsp.: $f = \frac{1}{2} + 0.001$, $2N = 10^{23}$
 und $t_{1/2} = 10^{12}$ sec $\Rightarrow t_f \approx t_{1/2} e^{10^{12}} \sim 10^{10^{12}}$ sec. (Siehe dazu
 den Satz von Cameron u. Choquet, p. I. 116.)

Wir studieren schliesslich noch für endliche N kleine
 Fluktuationen um $f = \frac{1}{2}$. Im "normalen" Regime setzen
 wir (wie oben) $\xi(\tau) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} x(\tau) / \sqrt{2N}$. Für den Markov-Prozess
 $x(\tau)$ gilt nach (13,14) (wobei wieder $f = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} x / \sqrt{2N}$ gesetzt wird)

$$\langle x(\tau + \frac{1}{2N}) - x(\tau) \mid x(\tau) = x \rangle = 2\sqrt{2N} \langle \xi(\tau + \frac{1}{2N}) - \xi(\tau) \mid \xi(\tau) = f \rangle$$

$$= 2\sqrt{2N} \frac{1-2f}{2N} = - \frac{2x}{2N} ;$$

$$\langle (x(\tau + \frac{1}{2N}) - x(\tau))^2 \mid x(\tau) = x \rangle = \frac{1}{2N} .$$

Diese infinitesimalen Momente charakterisieren gerade
 die Diffusion zur stochastischen Differentialgleichung
 $dx(\tau) = -2x(\tau)d\tau + dW(\tau)$ mit Wessens Prozess $dW/d\tau$.

Diese stochastische Differentialgleichung^{*)} hat den Ornstein-Uhlenbeck-Prozess als Lösung^{*)}, mit der zugehörigen Vorwärtsgleichung^{*)}

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} (2xP)$$

Dies ist eine Gauß'sche Diffusion mit stationäres Verteilung $e^{-2x^2} / \frac{1}{2}\sqrt{2\pi}$.

Zusammenfassung. Für große N können wir $X_t/2N$ folgendermassen beschreiben:

- Starten wir mit $\frac{X_0}{2N} = f(0) \neq \frac{1}{2}$, so ergibt sich mit hoher Genauigkeit eine deterministische Evolution zum Gleichgewichtswert $1/2$ von $\xi(\tau) = \frac{X_t}{2N}$ ($\tau = t/2N$).
- Gelangen wir in das "normale" Regime, so sehen wir Fluktuationen von $x(\tau) := (\xi(\tau) - \frac{1}{2}) 2\sqrt{2N}$ ($\tau = t/2N$) von der Grössenordnung 1 auf kurzen Zeitskalen. deren Dynamik wird in guter Näherung durch einen Diffusionsprozess beschrieben, welcher reversibel ist und durch die deterministische Gleichung mit zusätzlichen weissen Rauschen bestimmt ist.

Ich empfehle, dieses Verhalten mit numerischen Simulationen zu bestätigen.

*) Siehe z.B. das Buch: L. Arnold, Stochastische Differentialgleichungen Oldenbourg-Verlag (1973). Speziell §§ 2.5, 2.6, 8.3, 9.6.

Anhang D: Das sphärische Modell (siehe Baxter, Kap. 5)

Dieses verdichtete Modell fügt sich folgendermaßen in das Schema von §II.1B ein: Es ist $E = \mathbb{R}$ (Spins sind \mathbb{R} -wertig) und die Hamiltonfunktion ist wie in (1.13)

$$H_\Lambda(S_\Lambda) = - \sum_{(i,j) \subset \Lambda} J_{ij} S_i S_j - B \sum_{i \in \Lambda} S_i. \quad (1)$$

Hingegen ist das W.-Mass etwas anders

$$P_{\Lambda, \beta, B}(dS_\Lambda) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, B)} e^{-\beta H_\Lambda(S_\Lambda)} \delta(N_\Lambda - \sum_{i \in \Lambda} S_i^2) \prod_{i \in \Lambda} dS_i, \quad (2)$$

wobei N_Λ die Zahl der Gitterpunkte (Spins) in Λ ist. Den Spins wird also die Zwangsbedingung

$$\sum_{i \in \Lambda} S_i^2 = N_\Lambda \quad (3)$$

aufgelegt. Die beiden letzten Faktoren in (2) geben das Standardmass der Sphäre $S_{\frac{N_\Lambda}{\sqrt{N_\Lambda}}}$. Die Zustandssumme ist damit

$$Z_\Lambda(\beta, B) = \int e^{-\beta H_\Lambda(S_\Lambda)} \text{Vol}_{S_{\frac{N_\Lambda}{\sqrt{N_\Lambda}}}}(dS_\Lambda). \quad (3)$$

Wir setzen für das folgende

$$h = \frac{B}{kT}, \quad k = \frac{J}{kT}, \quad (4)$$

wenn J_{ij} nur für ij ungleich Null und gleich J ist.

Dieses Modell wurde 1952 von Berlin und Kac gelöst. Sie betrachteten es als Näherung des Ising-Modells, da man für letzteres die Summe über die Spins (± 1) als Summe über die Ecken eines N -dim. Hyperkubus im Spinraum betrachten kann; im sphärischen Modell wird diese durch eine Integration über die Oberfläche einer Hypersphäre durch alle diese Ecken ersetzt. Das ist zwar eine plausible Approximation, wobei die Zwangsbedingung (3) unphysikalisch, da sie eine ^{starke} Kopplung zwischen allen Spins - auch entfernten - einführt.

Zugleich ist gezeigt worden (Stanley, Kac & Thompson, Peacock & Thompson), dass das sphärische Modell einem Grenzfall des N -Vektormodells mit ausschließlicher u -Kopplung entspricht und deshalb physikalisch als Modell für kritisches Verhalten akzeptabel und interessant ist.

Wir leiten im folgenden die exakte Zustandsgleichung für das sphärische Modell her und diskutieren die Frage der spontanen Magnetisierung.

A. Berechnung der Zustandssumme

Wir multiplizieren den Integranden in der Zustandssumme mit $e^{a(N_\lambda - \sum S_i^2)}$ ($= 1$) und drücken die δ -Distribution durch

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{isx} ds$$

aus. Dies gibt

$$Z_\lambda = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^{N_\lambda}} \prod_{i \in \Lambda} dS_i \int_{\mathbb{R}} ds \exp \left[\beta \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + h \sum_j S_j + (a+is) N_\lambda - (a+is) \sum_j S_j^2 \right]. \quad (5)$$

Wir führen folgende Bezeichnungen ein:

$\underline{S} = (S_1, \dots, S_{N_\lambda})^T$, $\underline{h} = (h, h, \dots, h)^T$, $J = (J_{ij})$ und V sei die $N_\lambda \times N_\lambda$ -Matrix mit

$$\underline{S}^T V \underline{S} = (a+is) \sum_j S_j^2 - \beta \underline{S}^T J \underline{S}. \quad (6)$$

Damit lautet der Exponent in (5)

$$[-\dots] = -\underline{S}^T V \underline{S} + \underline{h}^T \underline{S} + (a+is) N_\lambda.$$

Die beliebige Konstante a wählen wir jetzt so groß, dass alle Eigenwerte von V positive Realteile haben. Dann dürfen wir die Reihenfolge der Integrationen in (5) vertauschen. Für die Integration über die Spins machen wir die Substitution

$$\underline{\sigma} = \underline{S} - \frac{1}{2} V^{-1} \underline{h}$$

und erhalten für den obigen Exponenten

$$[-\dots] = -\underline{\sigma}^T V \underline{\sigma} + \frac{1}{4} \underline{h}^T V^{-1} \underline{h} + (a+is) N_\lambda.$$

Damit kommt (beachte, dass V von s abhängt)

$$Z_\lambda = \frac{1}{2\pi} \pi^{N_\lambda/2} \int_{\mathbb{R}} ds \frac{1}{(\det V)^{1/2}} e^{(a+is) N_\lambda} e^{\frac{1}{4} \underline{h}^T V^{-1} \underline{h}}. \quad (7)$$

Zur Berechnung von $\det V$ benötigen wir die Eigenwerte von V . An dieser Stelle spezialisieren wir auf u -Kopplung

(Kopplungsstärke J). Es ist dann nach (4) und (6)

$$\underline{S}^T \underline{V} \underline{S} = (\text{att}) \sum_j S_j^2 - k \sum_{\langle j,l \rangle} S_j S_l. \quad (8)$$

Wir diagonalisieren jetzt V mit Hilfe der Fouriertransformation. Dazu setzen wir wie auf S. II.102-

$$\hat{S}(\underline{k}) = \sum_{x \in \Lambda} S_x e^{-ik \cdot x}, \quad (9)$$

mit der Umkehrformel

$$S_x = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{k \in \Delta} \hat{S}(k) e^{ik \cdot x}. \quad (10)$$

Wir haben die Parseval-Gleichung

$$\sum_{x \in \Lambda} S_x^2 = \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{k \in \Delta} |\hat{S}(k)|^2. \quad (11)$$

Für die Paarkopplung ergibt sich (mit den Orthog.-Rel. der Charaktere $e^{ik \cdot x}$)

$$\begin{aligned} \sum_{\langle x, x' \rangle} S_x S_{x'} &= \frac{1}{2} \sum_x \sum_{\alpha=1}^d \sum_{\pm} S_x S_{x \pm e_\alpha} \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\alpha=1}^d \sum_{k \in \Delta} |\hat{S}(k)|^2 (e^{ik \cdot e_\alpha} + e^{-ik \cdot e_\alpha}) \end{aligned}$$

~~$$= \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{\alpha} J \cos k_{\alpha}, \quad k_{\alpha} = \frac{2\pi}{N_\Lambda} n_{\alpha}, \quad -\frac{N_\Lambda}{2} < n_{\alpha} \leq \frac{N_\Lambda}{2}$$~~

$$= \frac{1}{N_\Lambda} \sum_{k \in \Delta} (|\hat{S}(k)|^2 J \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha}). \quad (12)$$

Wir haben also mit (9)

$$V = F (\text{diag } \hat{V}(k)) \tilde{F} ,$$

so

$$F = (F_{xk}), F_{xk} = e^{ik \cdot x}, \tilde{F} = (\tilde{F}_{kx'}), \tilde{F}_{kx'} = e^{-ik \cdot x'},$$

und

$$\hat{V}(k) = \frac{1}{N_\Lambda} \left[\text{const} - k \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha \right].$$

$$\text{Da } F \tilde{F} = \sum_{k \in \Delta} e^{ik \cdot (x-x')} = N_\Lambda \delta_{xx'}, \text{ gilt } \tilde{F} = N_\Lambda F^{-1},$$

d.h.

$$V = F \cdot \text{diag} \left[\text{const} - k \sum_{\alpha} \cos k_\alpha \right] \cdot F^{-1}. \quad (14)$$

Die Eigenwerte von V sind also

$$\lambda(k_1, \dots, k_d) = \text{const} - k \sum_{\alpha} \cos k_\alpha, \quad k \in \Delta. \quad (15)$$

Deshalb ist

$$\ln \det V = \sum_{k \in \Delta} \ln \left[\text{const} - k \sum_{\alpha} \cos k_\alpha \right].$$

Für grosse N_Λ dürfen wir die Summe durch ein Integral ersetzen

$$\ln \det V = N_\Lambda (2\pi)^{-d} \int_{[0, 2\pi]^d} d^d k \ln \left[\text{const} - k \sum_{\alpha=1}^d \cos k_\alpha \right].$$

Wir haben also

$$\ln \det V = N_\Lambda \left[\ln k + g(z) \right], \quad (16)$$

wo

$$g(z) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{Td} d^d k \ln [z + d - \cos k_1 - \dots - \cos k_d]$$

(18)

und

$$z = \frac{a+is}{K} - d.$$

(19)

Das Ergebnis (17) setzen wir nun in (7) ein:

$$\begin{aligned} Z_\Lambda &= \frac{1}{2} \pi^{\frac{1}{2}N_\Lambda - 1} \int ds e^{(a+is)N_\Lambda - \frac{1}{2}N_\Lambda [\ln K + g(z)]} e^{\frac{1}{4} \underline{h}^T V^{-1} \underline{h}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\pi}{K}\right)^{N_\Lambda/2} \int ds e^{N_\Lambda [Kz + kd - \frac{1}{2}g(z)]} e^{\frac{1}{4} \underline{h}^T V^{-1} \underline{h}} \\ &= \frac{K}{2\pi i} \left(\frac{\pi}{K}\right)^{N_\Lambda/2} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{N_\Lambda \Phi(z)}. \end{aligned}$$

(20)

Dabei ist $c = \frac{a-Kd}{K}$ und

$$\Phi(z) = Kz + kd - \frac{1}{2}g(z) + \frac{1}{4} \underline{h}^T V^{-1} \underline{h}.$$

Da $V \underline{h} = (a+is - kd) \underline{h}$, haben wir

$$\Phi(z) = Kz + kd - \frac{1}{2}g(z) + \frac{h^2}{4K^2}.$$

(21)

Es bleibt die Bedingung von

$$-\frac{f}{KT} = \lim_{N_\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{N_\Lambda} \ln Z_\Lambda = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\pi}{K}\right) + \lim_{N_\Lambda \rightarrow 0} \frac{1}{N_\Lambda} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{N_\Lambda \Phi(z)}$$

(22)

Nach dem Ausdruck (15) für die Eigenwerte von V haben diese nur alle positive Realteile, wenn $a > kd$ ist; also muss c positiv sein. Die Funktion $\phi(z)$ ist holomorph für $\operatorname{Re} z > 0$ und deshalb ist die rechte Seite von dem Integral in (22) unabhängig von $c > 0$. Dies benutzen wir um den letzten Term in (22) mit der Sattelpunktmethode exakt zu berechnen.

Dazu behalten wir zunächst $\phi(z)$ für reelle positive z . Falls $k > 0$ und $h \neq 0$ geht diese Funktion für $z \rightarrow 0$ und für $z \rightarrow \infty$ gegen $+\infty$. Deshalb muss $\phi(z)$ längs der positiven reellen Achse ein Minimum annehmen. Eine kleine Rechnung zeigt, dass auf \mathbb{R}_+ immer $\phi''(z) > 0$ gilt und folglich gibt es genau ein Minimum. Wenn wir jetzt c gleich dieser Stelle z_0 wählen, dann hat $\phi(z)$ bei $z = z_0$ längs des Integrationsweges ein Maximum. Deshalb gilt nach der Sattelpunktmethode (siehe Übungen, 2. Serie)

$$\lim_{N_\lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{N_\lambda} \ln \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} e^{N_\lambda \phi(z)} dz = \phi(z_0).$$

Dann wird aus (22)

$$\boxed{-\frac{f}{kT} = \frac{1}{z} \ln\left(\frac{U}{K}\right) + \phi(z_0)}. \quad (23)$$

Für z_0 erhalten wir mit (21) aus $\phi'(z_0) = 0$

$$K = \frac{h^2}{4Kz_0^2} = \frac{1}{z} g'(z_0). \quad (24)$$

Da es genau ein positives z_0 als Lösung gibt, ist f gemäss (23) als Funktion von k und h wohldefiniert, vorausgesetzt dass $k > 0$ und $h \neq 0$. Die kritische Stelle z_0 ist in einfacher Weise mit der Magnetisierung pro Gitterplatz verknüpft: wir differenzieren f/kT bei festem k bez. h (beachte, dass z_0 von h abhängt):

$$-\frac{d}{dh} \left(\frac{f}{kT} \right) = \frac{h}{2kz_0} + \underbrace{\phi'(z_0)}_0 \frac{dz_0}{dh}$$

Dies gibt mit (4)

$$M = -\frac{\partial}{\partial H} f(h, T) = -\frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{f}{kT} \right) = \frac{h}{2kz_0} \quad)$$

d.h.

$$M = \frac{H}{2Jz_0} \quad (25)$$

Gl. (24) können wir deshalb so schreiben:

$$\boxed{2J(1-M^2) = kT g' \left(\frac{H}{2JH} \right)} \quad (26)$$

Dies ist die exakte Zustandsgleichung.

Wir berechnen noch analog die innere Energie u pro Gitterplatz,

$$u = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} (f/T) \quad (27)$$

Da bei der Differentiation J und H fest bleiben, folgt

aus (23)

$$u = \frac{1}{2}kT + kT^2 \frac{\partial \phi}{\partial T}(z_0) = \frac{1}{2}kT - J(z_0 + d) - \frac{H^2}{4Jz_0} \quad (28)$$

Hier eliminieren wir wieder z_0 mit (25) und erhalten

$$u = \frac{1}{2} kT - Jd - \frac{1}{2} H \left(H + \frac{1}{H} \right) \quad (29)$$

als exakte Beziehung zwischen innerer Energie und Magnetisierung.

B. Diskussion der Funktion $g'(z)$

Um die Implikationen der Zustandsgleichung (26) herzuleiten, benötigen wir einige Eigenschaften der Funktion $g'(z)$. Differenzieren wir (18) nach z und benutzen

$$\lambda^{-1} = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t} dt, \quad ,$$

so kommt

$$g'(z) = (2\pi)^{-d} \int_{T^d} dk \int_0^{\infty} dt \exp \left\{ -t \left[z + d - \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha} \right] \right\}. \quad (30)$$

Für $z > 0$ dürfen wir die Integrationsreihenfolge vertauschen und erhalten mit der Formel bekannten Integraldarstellung der nullten Besselfunktion J_0

$$J_0(it) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{t \cos k} dk \quad (31)$$

das Ergebnis

$$g'(z) = \int_0^{\infty} e^{-t(z+d)} [J_0(it)]^d dt. \quad (32)$$

Dieser Ausdruck ist besonders im Hinblick auf Dimensionsabhängigkeiten wichtig; d kann darin auch eine beliebige positive Zahl gewählt werden.

Das Integral in (32) konvergiert für $\Re z > 0$ und $g'(z)$ ist dort holomorph. Dies ergibt sich aus dem asymptotischen Verhalten von $J_0(it)$ für grosse t :

$$J_0(it) = \frac{1}{(2\pi t)^{1/2}} e^{-t} [1 + O(1/t)]. \quad (33)$$

Speziell existiert $g'(z)$ für reelle positive z und nimmt dort monoton ab; $g(z) \rightarrow 0$ für $z \rightarrow \infty$. Es wird sich bald zeigen, dass die kritischen Eigenschaften vom Verhalten der Funktion $g'(z)$ für kleine positive z abhängt. Für $z=0$ zeigen (32) und (33), dass das Integral in (32) für $d \leq z$ divergiert, während es für $d > z$ konvergiert:

$$g'(0) = \begin{cases} \infty & \text{für } 0 < d \leq z, \\ < \infty & \text{für } d > z. \end{cases} \quad (34)$$

Für $d > z$ benötigen wir das dominante Verhalten von $g'(0) - g'(z)$ für kleine z . Dazu bilden wir $g''(z)$ und argumentieren wie oben, mit dem Resultat

$$g''(0) = \begin{cases} \infty & \text{für } 0 < d \leq 4, \\ < \infty & \text{für } d > 4. \end{cases} \quad (35)$$

Im Fall $d < 4$ ($\neq 4$) ergibt sich das führende Verhalten von $g''(z)$ ^{für kleine z} durch Einsetzen von (33) ohne die $O(1/t)$ Korrektur in (32):

$$\begin{aligned} g''(z) &\approx - (2\pi)^{-d/2} \int_0^\infty t^{1-d/2} e^{-tz} dt \\ &= - (2\pi)^{d/2} \Gamma(2 - \frac{d}{2}) z^{\frac{1}{2}d - 2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Für $d=4$ ist eine etwas subtilere Rechnung nötig, um das Resultat

$$g''(z) \simeq -\frac{1}{(2\pi)^2} \ln z \quad (d=4). \quad (37)$$

Wir fassen diese Resultate so zusammen: Sei

$$A_d := \begin{cases} (2\pi)^{-d/2} \left(\frac{1}{z}d-1\right)^{-1} \Gamma\left(2-\frac{d}{z}\right) & \text{für } z < d < 4, \\ (2\pi)^{-2} & \text{für } d=4 \\ -g''(0) & \text{für } d > 4, \end{cases}$$

Dann gilt

$$g'(0) - g'(z) \simeq \begin{cases} A_d z^{\frac{1}{z}d-1} & (z < d < 4), \\ A_4 z \ln \frac{1}{z} & (d=4), \\ A_d z & (d > 4). \end{cases} \quad (38)$$

C. Existenz eines kritischen Punktes für $d > z$

Wir zeigen nun, dass das sphärische Modell für $d > z$ (aber nicht für $d \leq z$) ein typisches ferromagnetisches Verhalten zeigt.

Für die folgende Diskussion erinnern wir an (25) und (4):

$$M = \frac{H}{2Jz_0} = \frac{h}{2Kz_0}, \quad (39)$$

$$h = \frac{H}{kT}, \quad K = \frac{J}{kT}. \quad (40)$$

Falls also T und somit K festgehalten wird, erhalten

würde $K(H)$ aus der Funktion $z_0(h)$, welche durch (24), d.h.

$$K - \frac{h^2}{4Kz_0^2} = \frac{1}{2} g'(z_0) \quad , \quad (41)$$

bestimmt ist. Das Verhalten dieser Funktionen lässt sich am besten graphisch überschaen. Dazu dient die folgende Figur:

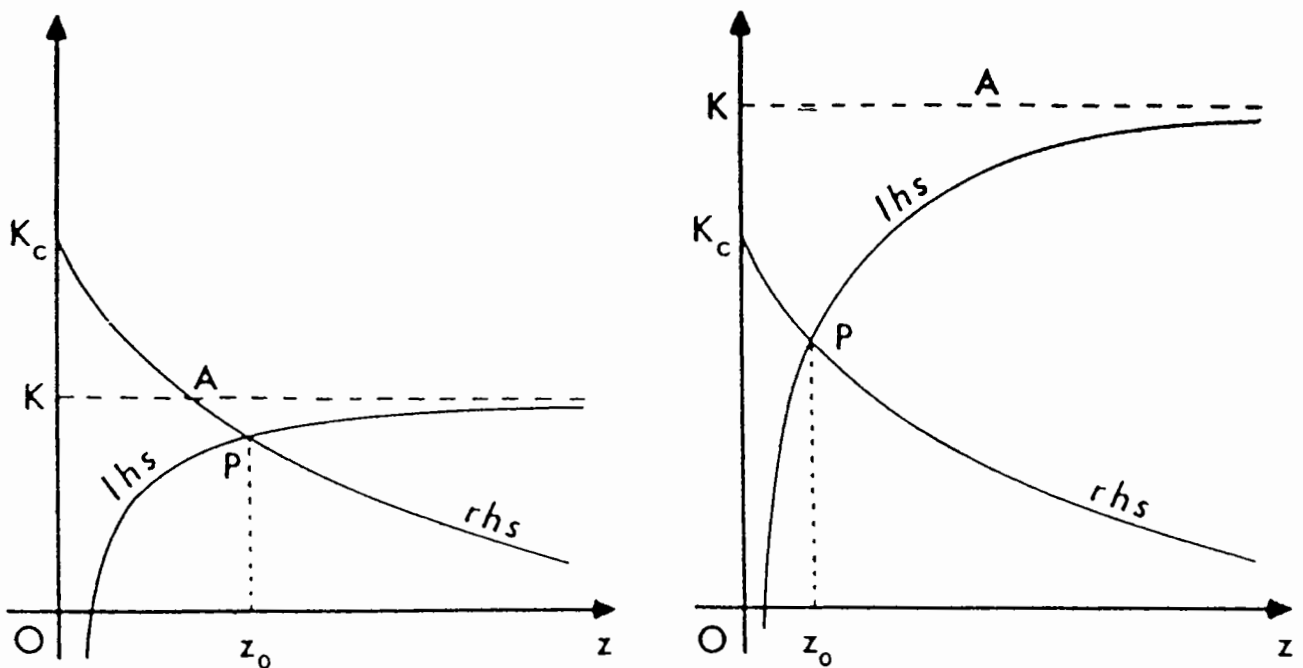


Fig. Graphische Lösung der Gl. (41).

Solange $h \neq 0$, ist z_0 ungefähr null und variiert glatt mit h ; z_0 ist dann sogar eine analytische Funktion von h . Deshalb ist auch M für $h \neq 0$ eine ungerade analytische Funktion von h .

Wir untersuchen nun den Grenzübergang $h^2 \rightarrow 0$. Dann wird aus dem Graphen der linken Seite von (41) (als Funktion von z) die Sprungfunktion $K\Theta(z)$. Der Schnittpunkt P rückt also nach links zum Schnittpunkt ^{von} OKA der Figur mit

dem Graphen von $\frac{1}{z}g'(z)$. Offensichtlich gibt es zwei verschiedene Fälle, je nach dem ob dieser Schnittpunkt auf der horizontalen Linie kA ist (linke Figur), oder auf der vertikalen Linie Ok liegt (rechte Figur). Wir definieren k_c, T_c durch

$$k_c = \frac{J}{kT_c} = \frac{1}{z}g'(0). \quad (42)$$

Der erste der beiden Fälle liegt für $T > T_c$ ($k < k_c$) vor und der zweite für $T < T_c$. Diese behandeln wir nun separat.

$T > T_c$: Dann ist $k < k_c = \frac{1}{z}g'(0)$, wie in der linken Figur. Für $h^2 \rightarrow 0$ konvergiert P gegen A und also z_0 nach (41) gegen den Wert $w \neq 0$, welcher durch

$$\frac{1}{z}g'(w) = k \quad (43)$$

bestimmt ist. Nun kann für genügend kleine h der Term $h^2/4kz_0^2$ in (41) als Störung behandelt werden und die Gleichung lässt sich iterativ nach z_0 lösen. Deshalb ist $z_0(h)$ eine nichtverschwindende analytische Funktion. Nach (39) ist deshalb M eine ungerade analytische Funktion bei $H=0$ und es ergibt sich deshalb keine spontane Magnetisierung.

Da für $d \leq z$, $g'(0)$ und k_c unendlich sind, liegt immer die gerade diskutierte Situation vor und

Wir schlüssen: Für $d \leq z$ hat das sphärische Modell keinen Phasenübergang.

$T < T_c$: Für $d > z$ ist K_c endlich und wir haben für $T < T_c$ ($K > K_c$) die Situation auf der rechten Seite der oberen Figur. Für $h^2 \rightarrow 0$ wandert dann P zum Punkt $(0, K_c)$ und z_0 geht gegen null. Da also die rechte Seite von (41) gegen K_c strebt, schlüssen wir aus dieser Gleichung

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{|h|}{z_0} = \sqrt{4K(K - K_c)} \quad (44)$$

Somit ergibt sich aus (39) und (40)

$$\lim_{h \rightarrow 0} M = \operatorname{sgn}(H) M_0, \quad (45)$$

mit
$$M_0 = \sqrt{1 - T/T_c}. \quad (46)$$

Also hat $M(H)$ bei $H=0$ eine Sprungsingularität. Es ergibt sich eine spontane Magnetisierung M_0 , welche durch die einfache Formel (46) gegeben ist.

Für $d > z$ zeigt also das sphärische Modell ein typisch ferromagnetisches Verhalten. Es gibt einen Curie Punkt (kritischen Punkt) bei $H=0, T=T_c$, wobei T_c durch Gl. (42) gegeben ist.

Für die Bestimmung der kritischen Exponenten verweise ich auf Baxter, Kap. 5.

Anhang E. Beweis des Satzes von Perron-Frobenius

Wir beweisen hier den Satz auf S. II.11. Λ sei eine endliche Menge, $|\Lambda| \geq 2$. Eine Matrix $T = (T(x,y))$ ist strikte positiv, falls $T(x,y) > 0$ für alle $x, y \in \Lambda$.

Nun sei R die Menge der Vektoren ψ aus $\mathbb{C}^\Lambda \setminus \{0\}$ mit $\psi(x) \in [0, \infty)$ für alle $x \in \Lambda$. (Die Komponenten sind alle nichtnegativ.) Auf R definieren wir die Funktion $f: R \rightarrow (0, \infty)$ durch

$$f(\psi) = \min_{x \in \Lambda: \psi(x) > 0} (T\psi)(x) / \psi(x). \tag{1}$$

f ist stetig und erfüllt $f(t\psi) = f(\psi)$ für alle $t > 0$. Deshalb stimmt das Bild $f(R)$ mit der Menge

$$f(\{\psi \in R: \sum_{x \in \Lambda} \psi(x) = 1\}) \subset (0, \infty)$$

überein. Da diese Menge kompakt ist, existiert die Grösse $\lambda_0 = \max f(R)$. Wir behaupten, dass λ_0 die Eigenschaften im Satz von Perron & Frobenius erfüllt.

Zunächst zeigen wir, dass λ_0 ein Eigenwert ist. Dazu sei $\psi_0 \in R$ so gewählt, dass $\lambda_0 = f(\psi_0)$. Ich behaupte, dass $T\psi_0 = \lambda_0 \psi_0$ gilt. Wäre $T\psi_0 \neq \lambda_0 \psi_0$, dann müsste $(T\psi_0)(x) \geq \lambda_0 \psi_0(x)$ für alle x sein, wobei für wenigstens ein x strikte Ungleichung bestehen müsste. [Beachte dazu: $\lambda_0 = \max f(R) = f(\psi_0) = \min_{x \in \Lambda: \psi_0(x) > 0} T\psi_0(x) / \psi_0(x) \Rightarrow T\psi_0(x) \geq \lambda_0 \psi_0(x)$; das Gleich-

heitszeichen kann nach Annahme nicht für alle x bestehen.]
Dann muss aber der Vektor $T(T\psi_0 - \lambda_0 \psi_0)$ strikte positive

Komponenten haben, und dies impliziert $f(T\psi_0) > \lambda_0$, was ein Widerspruch zur Definition von λ_0 ist. Damit ist also ψ_0 tatsächlich ein Eigenvektor von T mit dem Eigenwert λ_0 und es gilt somit

$$\psi_0(x) = \lambda_0^{-1} T\psi_0(x) > 0 \text{ für alle } x \in \Lambda.$$

Als nächstes betrachten wir einen anderen Eigenwert λ von T . Sei $\varphi \in \mathbb{C}^\Lambda$ ein zugehöriger Eigenvektor und $a = \min_{x \in \Lambda} T(x, x) > 0$. Aus der Gleichung $(T - aI)\varphi = (\lambda - a)\varphi$ schließen wir auf

$$\sum_{y \in \Lambda} (T(x, y) - a\delta(x, y)) |\varphi(y)| \geq |\lambda - a| |\varphi(x)|$$

und folglich gilt

$$\sum_y T(x, y) |\varphi(y)| \geq (|\lambda - a| + a) |\varphi(x)|.$$

Dies beweist $|\lambda - a| + a \leq \max f(T) = \lambda_0$. Daraus entnehmen wir, dass entweder $\lambda = \lambda_0$ oder $|\lambda| < \lambda_0$.

Schlüsselig sei neben ψ_0 auch noch χ ein Eigenvektor von T zum Eigenwert λ_0 . Ohne Einschränkung der Allgemeinheit können wir χ reell wählen. (Ansonsten zerlege man χ in Real- und Imaginärteile.) Nun sei

$$c = \min_{x \in \Lambda} \frac{\chi(x)}{\psi_0(x)}.$$

Dann ist also $\chi(x) \geq c \psi_0(x)$ für alle $x \in \Lambda$. Dies impliziert

$\chi = c \psi_0$, ansonsten hätten wir

$$\chi(x) - c \psi_0(x) = \frac{1}{\lambda_0} \sum_y T(x, y) (\chi(y) - c \psi_0(y)) > 0 \text{ für alle } x \in \Lambda,$$

was ein Widerspruch zur Wahl von c ist.

Die analytische Abhängigkeit von λ_0 von den Koeffizienten von T ergibt sich aus dem folgenden

Lemma. Seien c_1, \dots, c_n holomorphe Funktionen in der Kreisscheibe $E(R) = \{z \in \mathbb{C} : |z| < R\}$, $R > 0$. Sei $w_0 \in \mathbb{C}$ eine einfache Nullstelle des Polynoms $X^n + c_1(z)X^{n-1} + \dots + c_n \in \mathbb{C}[X]$. Dann gibt es ein r mit $0 < r \leq R$ und eine in der Kreisscheibe $E(r)$ holomorphe Funktion φ mit $\varphi(0) = w_0$ und

$$\varphi^n + c_1 \varphi^{n-1} + \dots + c_n = 0 \quad \text{über } E(r),$$

Beweis: Für $z \in E(R)$ und $w \in \mathbb{C}$ sei

$$F(z, w) = w^n + c_1(z)w^{n-1} + \dots + c_n(z).$$

Es gibt ein $\varepsilon > 0$, so dass die Funktion $w \mapsto F(0, w)$ auf der Kreisscheibe $\{w \in \mathbb{C} \mid |w - w_0| \leq \varepsilon\}$ die einzige Nullstelle w_0 hat. Wegen der Stetigkeit von F gibt es nun ein r mit $0 < r \leq R$, sodass die Funktion F auf der Menge

$$\{(z, w) \in \mathbb{C}^2 : |z| < r, |w - w_0| \stackrel{!}{=} \varepsilon\}$$

keine Nullstelle hat. Für festes $z \in E(r)$ gibt ^{dann} bekanntlich

$$n(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|w - w_0| = \varepsilon} \frac{F_w(z, w)}{F(z, w)} \quad (F_w := \frac{\partial F}{\partial w})$$

die Anzahl der Nullstellen der Funktion $w \mapsto F(z, w)$ in der Kreisscheibe mit dem Radius ε um w_0 an. Da $n(0) = 1$ und $n(z)$ stetig von z abhängt, ist $n(z) = 1$ für alle $E(r)$. Nach dem Residuensatz ist die Nullstelle von $w \mapsto F(z, w)$ in der Kreisscheibe $|w - w_0| < \varepsilon$ gleich

$$\varphi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{|w-w_0|=\varepsilon} w \frac{F_w(z,w)}{F(z,w)} dw.$$

Da der Integrand holomorph von z abhängt, ist die Funktion $z \mapsto \varphi(z)$ in $E(\star)$ holomorph und es gilt $F(z, \varphi(z)) = 0$ für alle $z \in E(\star)$. \square

*

*

*

ANHANG F. Bestimmung des größten Eigenwertes der Transfermatrix für das 2-dimensionale Isingmodell

Die Transfermatrix lautet nach (II.5.19, 15, 18)

$$T = V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2}, \quad (1)$$

wobei

$$V_1 = \exp \left[K \sum_{j=1}^M \pi_j^{(3)} \pi_{j+1}^{(3)} \right], \quad (2)$$

$$V_2 = (2 \sinh 2K)^{M/2} \exp \left[K \sum_{j=1}^M \pi_j^{(1)} \right]. \quad (3)$$

Dabei ~~erweisen~~ wir jetzt die Summe im Exponenten von V_1 ebenfalls bis M , was periodischen Randbedingungen in allen Richtungen entspricht. Zur Bestimmung der Eigenwerte der $2^M \times 2^M$ Matrix T benutzen wir die Technik der Fermioperatoren (Schultz, Mattis und Lieb, 1964).

a) Jordan-Wigner-Transformation

Gegeben seien unabhängige Pauli-Matrizen $\vec{\sigma}_i$ ($i=1, \dots, M$), welche also im Raum $(\mathbb{C}^2)^{\otimes M}$ operieren. Es sei

$$\sigma_j^\pm = \frac{1}{2} (\sigma_j^{(1)} \pm i \sigma_j^{(2)}) \quad (4)$$

und

$$\alpha_\ell = e^{i\pi \sigma_\ell^+ \sigma_\ell^-} = -\sigma_\ell^{(3)} \quad (\text{hermitesch!}). \quad (5)$$

Dann lautet die Jordan-Wigner-Transformation $\{\sigma_i^\pm\} \rightarrow \{c_i\}$:

$$c_j = \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{j-1} \sigma_j^\pm. \quad (6)$$

Die adjungierte Gleichung ist

$$c_j^* = \sigma_j^+ \alpha_1 \cdots \alpha_{j-1}. \quad (7)$$

Aus den Eigenschaften der σ -Algebra folgt leicht, dass die c_j, c_j^* Fermioperatoren sind:

$$\{c_j, c_k\} = 0, \quad \{c_j^*, c_k^*\} = \delta_{jk} \cdot 1. \quad (8)$$

Dazu bemerkt man neben $\{\sigma_j^+, \sigma_j^-\} = 1, (\sigma_j^+)^2 = (\sigma_j^-)^2 = 0,$
 $[\sigma_j^\pm, \sigma_k^\pm] = 0$ ($j \neq k$) die Identitäten

$$\alpha_\ell^2 = 1, \quad \alpha_\ell \sigma_\ell^\pm = -\sigma_\ell^\pm \alpha_\ell = \mp \sigma_\ell^\pm. \quad (9)$$

Z.B.:

$$\begin{aligned} 1) \quad \{c_j, c_{j+1}\} &= \underbrace{\alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \sigma_j^-}_{\sigma_j^- \alpha_j} \alpha_1 \cdots \alpha_j \sigma_{j+1}^- + \underbrace{\alpha_1 \cdots \alpha_j \sigma_{j+1}^-}_{\alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \sigma_{j+1}^- \sigma_j^-} \alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \sigma_j^- \\ &= \sigma_j^- \alpha_j \sigma_{j+1}^- + \sigma_{j+1}^- \alpha_j \sigma_j^- \stackrel{(9)}{=} -\sigma_j^- \sigma_{j+1}^- + \sigma_{j+1}^- \sigma_j^- = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2) \quad \{c_j^*, c_j\} &= \sigma_j^+ \alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \sigma_j^- + \alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \sigma_j^- \sigma_j^+ \alpha_1 \cdots \alpha_{j-1} \\ &= \sigma_j^+ \sigma_j^- + \sigma_j^- \sigma_j^+ = 1. \end{aligned}$$

Man sieht sofort, dass $\sigma_k^+ \sigma_k^- = c_k^* c_k$ und somit lautet die Umkehrtransformation von (6) und (7)

$$\sigma_j^- = \exp\left(i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_k^* c_k\right) c_j, \quad \sigma_j^+ = c_j^* \exp\left(-i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_k^* c_k\right). \quad (10)$$

Nun wollen wir V_1 und V_2 durch Fermi-Operatoren ausdrücken. Dabei steht zunächst die lineare Abhängigkeit von $\pi_j^{(1)}$ in (3). Würde dort $\pi_j^{(3)}$ stehen, so könnten wir dies leicht in

in Ferrunperioden übersehen, da $\tau_j^{(3)} = 2\tau_j^+ \tau_j^- - 1 = 2c_j^* c_j - 1$.
Wir machen deshalb zuerst noch eine Drehung

$$\tau_j^{(1)} \rightarrow -\tau_j^{(3)}, \quad \tau_j^{(3)} \rightarrow \tau_j^{(1)}, \quad \tau_j^{(2)} \rightarrow \tau_j^{(2)}, \quad (11)$$

bei der sich die Eigenwerte natürlich nicht ändern, und erhalten nach dem Gesagten für V_2 :

$$V_2 = (2 \sinh 2k)^{M/2} \exp \left[-2k^* \sum_{j=1}^M (c_j^* c_j - \frac{1}{2}) \right]. \quad (12)$$

Im transformierten V_1 ,

$$V_1 = \exp \left[k \sum_{j=1}^M \underbrace{\tau_j^{(1)} \tau_{j+1}^{(1)}}_{(\tau_j^+ + \tau_j^-)(\tau_{j+1}^+ + \tau_{j+1}^-)} \right]$$

beurteilen wir für $j < M$ die Beziehungen

$$\tau_j^+ \tau_{j+1}^- = c_j^* c_{j+1}, \quad \tau_j^+ \tau_{j+1}^+ = c_j^* c_{j+1}^*, \quad \tau_j^- \tau_{j+1}^+ = -c_j c_{j+1}^*, \quad \tau_j^- \tau_{j+1}^- = -c_j c_{j+1}. \quad (13)$$

z.B.
$$c_j^* c_{j+1}^* = \tau_j^+ \alpha_1 \dots \alpha_{j-1} \tau_{j+1}^+ \alpha_1 \dots \alpha_j = \tau_j^+ \alpha_j \tau_{j+1}^+ \stackrel{(9)}{=} \tau_j^+ \tau_{j+1}^+.$$

Ohne den letzten Term in V_1 , d.h. für freie Randbedingungen, ergibt sich

$$V_1^{\text{frei}} = \exp \left[k \sum_{j=1}^{M-1} (c_j^* - c_j)(c_{j+1}^* + c_{j+1}) \right]. \quad (14)$$

Um aber die Methode der Fouriertransformation verwenden zu können, möchten wir periodische (ev. antiperiodische) Randbedingungen verlangen. Dann macht aber der letzte Term $\tau_M^{(1)} \tau_1^{(1)}$ im Exponenten von V_1 gewisse Probleme. Es ist z.B. $\tau_M^+ \tau_1^- \neq c_M^* c_1$,

denn

$$\begin{aligned} \pi_H^+ \pi_1^- &= \exp\left(i\pi \sum_{j=1}^{N-1} c_j^* c_j\right) c_H^* c_1 = \exp\left(i\pi \sum_{j=1}^N c_j^* c_j\right) e^{-i\pi c_H^* c_H} c_H^* c_1 \\ &= -(-1)^N c_H^* c_1, \end{aligned}$$

so $N = \sum_{j=1}^N c_j^* c_j$ der Fermionzahloperator ist. Ebenso findet man

$$\pi_H^+ \pi_1^+ = -(-1)^N c_H^* c_1^*, \quad \pi_H^- \pi_1^+ = (-1)^N c_H c_1^*, \quad \pi_H^- \pi_1^- = (-1)^N c_H c_1$$

und somit

$$\pi_H^{(a)} \pi_1^{(a)} = -(-1)^N (c_H^* - c_H)(c_1^* + c_1).$$

Wir haben also

$$V_1 = \exp\left[K \sum_{j=1}^{N-1} (c_j^* - c_j)(c_{j+1}^* + c_{j+1}) - K(-1)^N (c_H^* - c_H)(c_1^* + c_1) \right]. \quad (15)$$

Da alle Beiträge zu V_1 und V_2 bilinear in den Fermionoperatoren sind, verlaufen diese mit $(-1)^N$ und werden deshalb von $(-1)^N$ reduziert. Wir können also die Restriktionen der V 's auf die beiden Unterräume zu geraden und ungeraden Fermionzahlen separat behandeln. In beiden Fällen ist V_2 durch denselben Ausdruck

$$V_1 = \exp\left[K \sum_{j=1}^N (c_j^* - c_j)(c_{j+1}^* + c_{j+1}) \right] \quad (16)$$

gegeben, wobei aber

$$c_{N+1} \equiv \begin{cases} -c_1 & \text{für } N \text{ gerade,} \\ c_1 & \text{für } N \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (17)$$

Je nach der Parität der Fermionzahl haben wir also periodische oder antiperiodische Randbedingungen (Bezeichnung V_1^\pm).

b) Fourier-Transformation

Zur Diagonalisierung der quadratischen Formen in (16) drängt sich nun eine Fouriertransformation auf. Wir setzen also

$$\eta_q = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i\pi/4} \sum_{m=1}^M e^{-iqm} c_m \quad (18)$$

mit $q \in \Delta_{\pm}$ (+ für period. und - für antiper. Fall), wobei

$$\Delta_+ = \left\{ 0, \pm \frac{2\pi}{M}, \pm \frac{4\pi}{M}, \dots, \frac{M-2}{M}\pi, \pi \right\}, \quad (19a)$$

$$\Delta_- = \left\{ \pm \frac{\pi}{M}, \pm \frac{3\pi}{M}, \dots, \pm \frac{M-1}{M}\pi \right\}. \quad (19b)$$

Dabei haben wir der Einfachheit halber M gerade gewählt und der Phasenfaktor $e^{i\pi/4}$ in (18) wurde aus Bequemlichkeitsgründen im Hinblick auf spätere Realitätsbedingungen hinzugefügt. Man sieht leicht, dass die η_q und η_q^* Fermi-Vertauschungsrelationen genügen:

$$\{\eta_q, \eta_{q'}^*\} = \delta_{qq'}, \quad \{\eta_q, \eta_{q'}\} = \{\eta_q^*, \eta_{q'}^*\} = 0.$$

Die Umkehrung von (18) lautet

$$c_m = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_{q \in \Delta_{\pm}} e^{iqm} \eta_q. \quad (20)$$

Dies setzen wir nun in (12) und (16) ein. Eine einfache Rechnung gibt für die Transformatrix

$$T^{\pm} = (2 \sinh 2K)^{M/2} \prod_q \pi^{\pm} V_1(q)^{1/2} V_2(q) V_1(q)^{1/2}. \quad (21)$$

Dabei bedeutet \prod_q das Produkt über alle nicht-negativen q 's in Δ^{\pm} und die Operatoren $V_1(q), V_2(q)$ sind durch folgende Ausdrücke gegeben:

$$\begin{aligned}
 V_2(q) &= \exp[-2k^*(\eta_q^* \eta_q + \eta_{-q}^* \eta_{-q} - 1)] \quad \text{für } q \neq 0, \pi, \\
 V_2(q=0, \pi) &= \exp[-2k^*(\eta_q^* \eta_q - \frac{1}{2})], \\
 V_1(q) &= \exp[2k \{ \cos q (\eta_q^* \eta_q + \eta_{-q}^* \eta_{-q}) + \sin q (\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^* \eta_q^*) \}], \\
 V_1(q=0, \pi) &= \exp[2k e^{iq} (\eta_q^* \eta_q - \frac{1}{2})].
 \end{aligned} \tag{22}$$

Für $q=0, \pi$ ist somit

$$V_1(q)^{1/2} V_2(q) V_1(q)^{1/2} = \begin{cases} \exp[-2(k^* - k) (\eta_q^* \eta_q - \frac{1}{2})] & (q=0), \\ \exp[-2(k^* + k) (\eta_q^* \eta_q - \frac{1}{2})] & (q=\pi). \end{cases} \tag{23}$$

c) Berechnung der Eigenwerte

Offensichtlich kommutieren die Faktoren $V(q) := V_1(q)^{1/2} V_2(q) V_1(q)^{1/2}$ in (23), da die η 's bilinear vorkommen. Ferner kommutieren die $V(q)$ mit $(-1)^{N_q}$, wo

$$N_q = \eta_q^* \eta_q + \eta_{-q}^* \eta_{-q}. \tag{24}$$

Wir müssen also die verschiedenen Faktoren $V(q)$ einzeln diagonalisieren. Für $q=0, \pi$ kann man die Eigenwerte von (23) ablesen; diese sind gleich $\exp(\pm \frac{1}{2} \varepsilon_q)$ mit

$$\varepsilon_0 = 2(k^* - k), \quad \varepsilon_\pi = 2(k^* + k). \tag{25}$$

Dabei entspricht $\pm \frac{1}{2} \varepsilon_q$ im Exponenten den Werten $(-1)^{N_q} = \pm 1$.

Für $q \neq 0, \pi$ operieren die $V_1(q), V_2(q)$ in 4-dimensionalen Unterräumen, welche durch die Vektoren

-F2-

$$\psi_0, \psi_q = \eta_q^\dagger \psi_0, \psi_{-q} = \eta_{-q}^\dagger \psi_0, \psi_{-qq} = \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \psi_0 \quad (26)$$

aufgespannt werden; dabei bezeichnet ψ_0 das Vakuum zu η_q, η_{-q} :
 $\eta_q \psi_0 = \eta_{-q} \psi_0 = 0$. Wir müssen aber noch einmal eine 4×4
Matrix diagonalisieren, denn $V_1(q)$ und $V_2(q)$ haben ψ_q und
 ψ_{-q} als Eigenvektoren; aus (22) folgt

$$V_2(q) \psi_{\pm q} = \psi_{\pm q}, \quad V_1(q) \psi_{\pm q} = e^{2k \cos q} \psi_{\pm q} \quad (27)$$

Damit haben wir

$$V(q) \psi_{\pm q} = e^{2k \cos q} \psi_{\pm q} \quad (28)$$

Diese Eigenwerte gehören zu $(-i)^{N_q} = -1$.

Es bleibt die Bestimmung der Matrizen zu $V_1(q)$ und $V_2(q)$
im 2-dim. Unterraum, aufgespannt durch ψ_0 und ψ_{-qq} . Für
 $V_2(q)$ erhalten wir aus (22)

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_{-qq} | V_2(q) | \psi_{-qq} \rangle & \langle \psi_{-qq} | V_2(q) | \psi_0 \rangle \\ \langle \psi_0 | V_2(q) | \psi_{-qq} \rangle & \langle \psi_0 | V_2(q) | \psi_0 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2k^*} & 0 \\ 0 & e^{2k^*} \end{pmatrix} \quad (29)$$

und dies ist schon dragend. Für $V_1(q)$ ist die Rechnung etwas
komplizierter. In diesem Operator kommen die Produkte

$$b_q^+ := \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger, \quad b_q^- := \eta_q \eta_{-q} \quad (30)$$

vor, welche im Unterraum aufgespannt durch ψ_0 und ψ_{-qq} durch
Pauli-Matrizen ausgedrückt werden können: z.B. haben wir

$$b_q^- \psi_{-qq} = \eta_q \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \psi_0 = \psi_0,$$

$$b_q^+ \psi_0 = \psi_{-qq}.$$

(31)

Deshalb operiert b_q^- wie σ^- und b_q^+ wie σ^+ . Ferner gilt

$$\eta_q^* \eta_q + \eta_{-q}^* \eta_q = 2b_q^+ b_q^- =: b_q^z + 1, \quad (32)$$

$$\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^* \eta_q^* = b_q^- + b_q^+ =: b_q^x. \quad (33)$$

Damit finden wir für $V_1(q)$ in (22)

$$\begin{aligned} V_1(q) &= \exp \left[2K \left\{ (b_q^z + 1) \cos q + b_q^x \sin q \right\} \right] \\ &= e^{2K \cos q} \exp \left(2K \cos q \sigma_z + 2K \sin q \sigma_x \right). \end{aligned} \quad (34)$$

Zur Berechnung der zugehörigen Eigenwerte von $V(q)$ benötigen wir nur $\det V(q)$ und $\text{Sp } V(q)$. Da $V_2(q)$ nach (29) die Determinante 1 hat und nach (34) $\det V_1(q) = e^{4K \cos q}$ ist (beachte $\det e^A = e^{\text{Sp } A}$), gilt

$$\det V(q) = e^{4K \cos q}. \quad (35)$$

Für die Spur ergibt sich aus (29) und (34) zunächst

$$\text{Sp } V(q) = \text{Sp} (V_2(q) V_1(q)) = e^{2K \cos q} \text{Sp} \left[\exp(-2K \sigma_z^*) \exp(2K \cos q \sigma_z + 2K \sin q \sigma_x) \right].$$

Zur weiteren Auswertung nehmen wir, dass für $\sigma' = \cos q \sigma_z + \sin q \sigma_x$ wegen $(\sigma')^2 = 1$ folgendes gilt

$$e^{2K \sigma'} = \cosh 2K + \sigma' \sinh 2K,$$

entsprechend

$$e^{-2K \sigma_z^*} = \cosh 2K^* - \sigma_z \sinh 2K^*.$$

Mit $\text{Sp } \sigma_z = \text{Sp } \sigma' = 0$, $\text{Sp}(\sigma_z \sigma') = 2 \cos q$ kommt

$$\text{Sp } V(q) = e^{2K \cos q} \cdot 2 \left[\cosh(2K) \cosh(2K^*) - \sinh(2K) \sinh(2K^*) \cos q \right]. \quad (36)$$

-F9-

Nun erfüllen die beiden Eigenwerte $\lambda_{1,2}$ von $V(q)$ (immer im betreffenden Unterraum) $\lambda_1 + \lambda_2 = \text{Sp } V(q)$, $\lambda_1 \lambda_2 = \text{Det } V(q)$. Nach der letzten dieser Beziehungen ist $\lambda_{1,2} = (\text{Det } V(q))^{1/2} e^{\pm \varepsilon_q}$ und nach der ersten bekommen wir für ε_q

$$\cosh \varepsilon_q = (\text{Det } V(q))^{-1/2} \frac{1}{2} \text{Sp } V(q) = [\cosh(2k) \cosh(2k^*) - \sinh(2k) \sinh(2k^*) \cos q].$$

Die gesuchten Eigenwerte sind also gleich $e^{2k \cos q} e^{\pm \varepsilon_q}$, wobei ε_q durch

$$\cosh \varepsilon_q = \cosh(2k) \cosh(2k^*) - \sinh(2k) \sinh(2k^*) \cos q \quad (37)$$

gegeben sind. Diese Eigenwerte gehören zu $(-1)^{n_q} = +1$.

Zusammenfassend haben wir also die folgenden Eigenwerte von $V(q)$:

- (i) $e^{\pm \frac{1}{2} \varepsilon_q}$ für $q=0, \pi$, mit $\varepsilon_0 = 2(k-k^*)$, $\varepsilon_\pi = 2(k+k^*)$ und zugehörigem $(-1)^{n_q} = \pm 1$;
- (ii) $e^{2k \cos q}$ (zwei mal), mit $(-1)^{n_q} = -1$;
- (iii) $e^{2k \cos q \pm \varepsilon_q}$, mit ε_q in (37), $(-1)^{n_q} = 1$.

Beachte, dass ε_q für $q=0, \pi$ ebenfalls unter die Formel (37) fällt.

Damit sind nun auch die Eigenwerte von T^\pm bestimmt. Wir zeigen, dass diese folgendermassen lauten

$$(2 \sinh 2k)^{1/2} \exp \left[- \sum_{q \in \Delta_\pm} \varepsilon_q \left(n_q - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (39)$$

wobei die n_q die Werte 0 und 1 annehmen, wobei aber die Nebenbedingungen $\sum n_q$ gerade für Δ_- , bzw. ungerade für Δ_+ erfüllt sein müssen.

Zur Begründung notieren wir zuerst, dass die Eigenwerte (ii) und (iii) in (38), mit den richtigen Multiplizitäten, durch

$$e^{2k \cos q} e^{-(n_q + u_q - 1) \varepsilon_q}, \quad n_q, u_q = 0, 1,$$

zusammengefasst werden können, wobei ausserdem $(-1)^{u_q} = (-1)^{n_q + u_q - q}$ gilt. Die Eigenwerte in (i) stellen wir durch $e^{(n_q - \frac{1}{2}) \varepsilon_q}$, $n_q = 0, 1$ ($q = 0, \pi$) dar. Dabei ist $(-1)^{n_q} = (-1)^{n_q}$ (siehe auch (23)). Da $\cos(0) + \cos(\pi) = 0$, $\sum^\pm \cos q = 0$ erhalten wir

$$\prod_q^\pm V(q) = \exp \left[- \sum_{q \in \Delta_\pm} (n_q - \frac{1}{2}) \varepsilon_q \right]$$

und somit in der Tat die Eigenwerte (39) für T^\pm . Für T^- ist nach (17) $(-1)^N = (-1)^{\sum u_q} = +1$, d.h. $\sum u_q$ gerade. Entsprechend findet man, dass für T^+ die Summe $\sum u_q$ ungerade sein muss.

Um den grössten Eigenwert zu bestimmen, bemerken wir folgendes. Nach (5.17) können wir (37) auch so schreiben

$$\cosh \varepsilon_q = \cosh(2k) \cosh(2k^*) - \cos q \quad (40)$$

$$= \cosh(2(k^* - k)) + (1 - \cos q). \quad (41)$$

Die letzte Gl. zeigt, dass $\varepsilon_q > 0$ für $q \neq 0$ und ε_q monoton in $|q|$ ist. Ferner folgt aus ihr, dass

$$\lim_{q \rightarrow 0} \varepsilon_q = \begin{cases} \varepsilon_0 & \text{für } k^* > k \\ -\varepsilon_0 & \text{für } k^* < k. \end{cases} \quad (42)$$

Daraus können wir schlüssen, dass der grösste Eigenwert von T^- gleich

$$\left(2 \sinh 2k \right)^{1/2} e^{\frac{1}{2} \sum_{q \in \Delta_-} \varepsilon_q} \quad (43)$$

ist. (Beachte: Alle $n_q = 0$ ist erlaubt, da dann $\sum n_q$ gerade ist.)
 Die hier vorkommenden ε_q sind gleich den γ_k im Haupttext
 (Gl. (5.22)). Tabächlich lässt sich die Gl. (40) mit Hilfe von
 (5.17) in die Form

$$\cosh \varepsilon_q = \cosh(2k) \coth(2k) - \cos q$$

bringen, welche mit (5.22) übereinstimmt.

Für T^+ müssen wir etwas aufpassen. Nach (25) ist
 $\varepsilon_{q=0} > 0$ für $k^* > k$ und deshalb wird (39) maximal für alle
 $n_q = 0$. Dies ist aber nicht erlaubt, da $\sum n_q$ ungerade sein muss.
 Wir müssen deshalb $q=0$ besetzen ($n_{q=0} = 1$) und erhalten dann
 für den grössten Eigenwert (beachte $\frac{1}{2}(\varepsilon_{\pi} - \varepsilon_0) = 2k$)

$$(2 \sinh 2k)^{H/2} \exp \left[2k + \frac{1}{2} \sum_{\substack{q \in \Delta^+ \\ q \neq 0, \pi}} |\varepsilon_q| \right]. \quad (44)$$

Im umgekehrten Fall $k^* < k$ ist $\varepsilon_{q=0} < 0$ und der grösste
 Eigenwert ist dann ($n_{q=0} = 1$)

$$(2 \sinh 2k)^{H/2} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{q \in \Delta^+} |\varepsilon_q| \right]. \quad (45)$$

Da

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{2} \varepsilon_q + \lim_{q \rightarrow \pi} \frac{1}{2} \varepsilon_q = \begin{cases} 2k & \text{für } k > k^* \\ 2k^* & \text{für } k < k^* \end{cases},$$

werden für $k > k^*$ die beiden Eigenwerte (43) und (45) im
 thermodynamischen Limes gleich, hingegen ist für $k < k^*$ der
 grösste Eigenwert. (43)

Damit ist unser Problem gelöst.

Dualität im Isingmodell

Die thermodynamische Größe

$$p = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z_N}{|N|} \quad (46)$$

nennt man heutzutage den "Druck". Es ist $p = -\beta f$. Nach (II.5.10) haben wir

$$p = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln \lambda_1}{N} \stackrel{(F.43)}{=} \frac{1}{2} \ln [2 \sinh 2K] + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{q \in \Delta} \epsilon_q,$$

also

$$p = \frac{1}{2} \ln [2 \sinh 2K] + \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \epsilon_q(k) dq. \quad (47)$$

Nach (F.37) ist $\epsilon_q(k)$ symmetrisch in k und k^* . Folglich gilt die Dualitätsbeziehung

$$p(k) - \frac{1}{2} \ln [2 \sinh 2k] = p(k^*) - \frac{1}{2} \ln [2 \sinh 2k^*]. \quad (48)$$

Dies können wir auch so schreiben:

$$p(k^*) = p(k) + \frac{1}{2} \ln \frac{2 \sinh 2k^*}{2 \sinh 2k},$$

$$\underbrace{\frac{2 \sinh 2k^*}{2 \sinh 2k}}_{(\sinh 2k)^{-2}}$$

$$p(k^*) = p(k) - \ln \sinh 2k. \quad (49)$$

In § II.11 leiten wir diese bemerkenswerte Relation aus einem Vergleich von Hoch- und Tieftemperaturantwortungen her (dure die Lösung) zu kennen. Wie dort gezeigt wird, folgt aus ihr die Lage des kritischen Punktes, wenn angenommen wird, dass es nur einen gibt. Für diesen muss dann nämlich $k = k^*$ gelten, weshalb $\sin 2k_c = 1$,
 $k_c = 0.440687 \dots$.

* * *

ANHANG G. Existenz des thermodynamischen Limes für Spinsysteme

Wir wiederholen zunächst kurz den allgemeinen Rahmen. Dabei behalten wir der Einfachheit halber nur Ising-Spins. (Für eine allgemeinere Diskussion siehe Israel, Simon.)

Der Konfigurationsraum ist $\Omega = \{1, -1\}^{\mathbb{Z}^d}$ und P_β bezeichne das Produktmass auf Ω zum W -Mass $\rho = \frac{1}{2}(\delta_1 + \delta_{-1})$ von $\{1, -1\}$. Für eine endliche Teilmenge Λ (Hyperkubus) sei $\pi_\Lambda P_\beta$ das Produktmass auf $\Omega_\Lambda = \{1, -1\}^\Lambda$ (= Bild von P_β unter der natürlichen Projektion $\pi_\Lambda: \Omega \rightarrow \Omega_\Lambda$).

Zur Beschreibung der Wechselwirkung geben wir uns eine reelle Funktion J auf den endlichen Teilmengen $A \subset \mathbb{Z}^d$ vor, welche translationsinvariant ist: $J(A+i) = J(A)$. Wir benutzen die Bezeichnung $\sigma^A := \prod_{i \in A} \sigma_i$. Jedem Λ und J ordnen wir die folgende Hamiltonfunktion auf Ω_Λ zu:

$$H_{\Lambda, J}(\omega) = - \sum_{A \subset \Lambda} J(A) \sigma^A \quad (1)$$

Der "Druck" ist im wesentlichen die freie Energie pro Gitterplatz ($f_\Lambda(J, \beta)$):

$$p_\Lambda(J) = \frac{1}{|\Lambda|} \ln \int_{\Omega_\Lambda} e^{-H_{\Lambda, J}(\omega)} \pi_\Lambda P_\beta(d\omega) \quad (2)$$

Es ist $f_\Lambda(J, \beta) = -(\beta^{-1} p_\Lambda(\beta J))$.

Wir wollen zeigen, dass der thermodynamische Limes von $p_\Lambda(J)$ existiert. Vor der präzisen Formulierung benötigen

Wir noch einige Hilfsmittel. Mit J bezeichnen wir den Raum der Wechselwirkungen J für die

$$\|J\| = \sum_{A \ni 0} |J(A)| / |A| \quad (3)$$

endlich ist. Die Teilmenge J_0 besteht aus den Wechselwirkungen mit endlicher Reichweite: $J(A) = 0$ falls der Durchmesser von A genügend gross ist. J ist ein separabler Banachraum und J_0 ist darin eine dichte Teilmenge. Wir brauchen unten eine Abschätzung von $\|H_{\Lambda, J}\|_{\infty}$. Mit $1 = \frac{1}{|A|} \sum_{i \in A} 1$ erhalten wir

$$\|H_{\Lambda, J}\|_{\infty} \leq \sum_{A \subset \Lambda} |J(A)| = \sum_{A \subset \Lambda} \frac{1}{|A|} \sum_{i \in A} |J(A)| = \sum_{i \in \Lambda} \sum_{A \ni i} |J(A)| / |A|,$$

d.h.

$$\|H_{\Lambda, J}\|_{\infty} \leq |\Lambda| \|J\|. \quad (4)$$

Für weitere Abschätzungen benötigen wir auch das Lemma. Für jedes \mathbb{W} -Mass μ und reellwertige Funktionen $f, g \in L^{\infty}(\mu)$ ist

$$\left| \ln \int e^f d\mu \right| \leq \|f\|_{\infty}, \quad (5)$$

$$\left| \ln \int e^f d\mu - \ln \int e^g d\mu \right| \leq \|f - g\|_{\infty}. \quad (6)$$

Beweis: Es ist fast sicher

$$e^g e^{-\|f-g\|_{\infty}} \leq e^f \leq e^g e^{\|f-g\|_{\infty}}.$$

Integrieren wir dies und nehmen davon den Log., so folgt die Behauptung (6). Die Ungl. (5) ergibt sich als Spezialfall für $g = 0$. \square

Speziell für $p_\lambda(J)$ folgt aus (5) und (6) mit (4)

$$|p_\lambda(J)| \leq \frac{1}{|\lambda|} \|H_{J,\lambda}\|_\infty \leq \|J\|, \quad (7)$$

$$|p_\lambda(J) - p_\lambda(J_0)| \leq \frac{1}{|\lambda|} \|H_{\lambda,J} - H_{\lambda,J_0}\|_\infty \leq \|J - J_0\|. \quad (8)$$

Nun kommen wir zum thermodynamischen Limes der freien Energie. Es gilt der

Satz. Für positive ganze Zahlen b sei $\Lambda(b)$ ein Hyperkubus der Seitenlänge b . Dann existiert für ein $J \in \mathcal{I}$

$$\lim_{b \rightarrow \infty} p_{\Lambda(b)}(J) =: p(J)$$

und $p(J)$ ist konvex sowie Lipschitz-stetig.

Beweis: Es genügt wegen (8) $J \in \mathcal{I}_0$ zu wählen. Die positive ganze Zahl n sei so gewählt, dass $J(A) = 0$ falls der Durchmesser von A grösser als n ist. Ferner seien a und b positive Zahlen, so dass $b > a + n$, also $b = n(m+a) + c$ für ein $n \geq 1$ und $0 \leq c < m+a$. Jetzt unterteilen wir die endliche Teilmenge von J aus und zerlegen $\Lambda(b)$ folgendermassen in zwei Teile Λ' und Λ'' (s. Fig.): Λ' besteht aus n^d Hyperkuben der Seitenlänge a , welche durch Korridore der Breite n getrennt sind; Λ'' ist gleich $\Lambda \setminus \Lambda'$. Da die n^d Hyperkuben offensichtlich nicht untereinander berühren, ist $H_{\Lambda',J}$ gleich der Summe von n^d Kopien von $H_{\Lambda(a),J}$, welche bezüglich $\pi_{\Lambda'} \mathcal{P}_\rho$ unabhängig sind. Deshalb ist

$$p_{\Lambda'}(J) = \frac{1}{n^d a^d} \ln \int_{\Sigma_{\Lambda'}} e^{-H_{\Lambda',J} \pi_{\Lambda'} d\mathcal{P}_\rho} = \frac{1}{a^d} \ln \int_{\Sigma_{\Lambda(a)}} e^{-H_{\Lambda(a),J} \pi_{\Lambda(a)} d\mathcal{P}_\rho}. \quad (9)$$

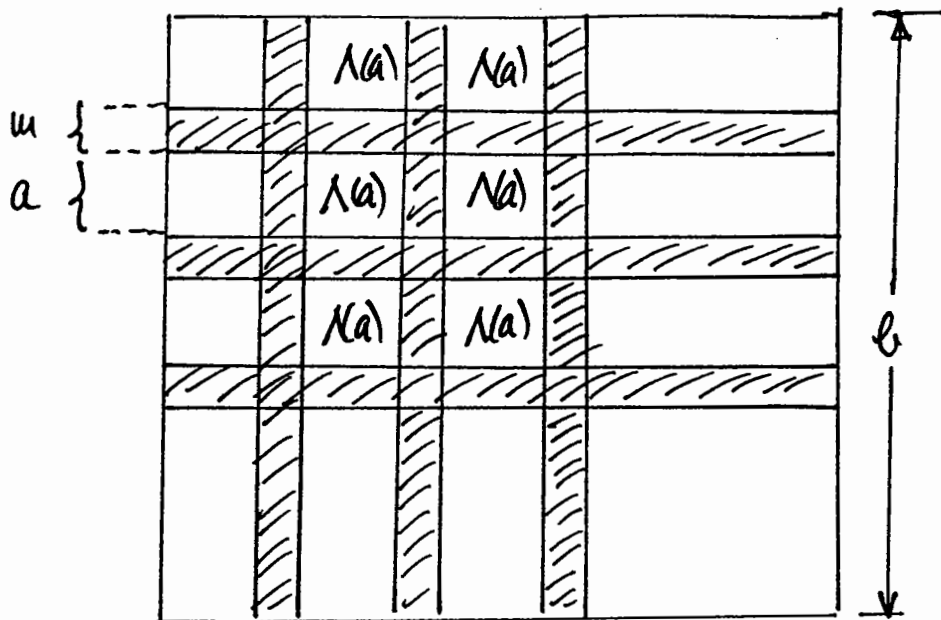


Fig. Zerlegung von $\Lambda(b)$.

Wie in (8) haben wir

$$\begin{aligned}
 | |\Lambda'| p_{\Lambda'}(J) - |\Lambda(b)| p_{\Lambda(b)}(J) | &\leq \| H_{\Lambda', J}^{-1} - H_{\Lambda(b), J} \|_{\infty} \\
 &\leq \sum_{\substack{A \subset \Lambda(b) \\ A \not\subset \Lambda'}} |J(A)| \leq |\Lambda(b) \setminus \Lambda'| \cdot \|J\|_{\infty}, \quad (10)
 \end{aligned}$$

wo
$$\|J\|_{\infty} := \sum_{A \supseteq \emptyset} |J(A)|. \quad (11)$$

Dividieren wir die Ungl. (10) durch $|\Lambda(b)| = b^d$, so kommt mit (9)

$$\left| \left(\frac{ua}{b}\right)^d p_{\Lambda(a)}(J) - p_{\Lambda(b)}(J) \right| \leq \left(1 - \left(\frac{ua}{b}\right)^d\right) \|J\|_{\infty}. \quad (12)$$

Für festes a und $b \rightarrow \infty$ gilt $\frac{u(a+u)}{b} \rightarrow 1$, also $\frac{ua}{b} = a/(a+u) + o(u)$. Somit lautet die letzte Ungl.

$$\left| \left(\frac{a}{a+u} + o(u)\right)^d p_{\Lambda(a)}(J) - p_{\Lambda(b)}(J) \right| \leq \left[1 - \left(\frac{a}{a+u} + o(u)\right)^d\right] \|J\|_{\infty}$$

für $b \rightarrow \infty$,

und daher gilt

$$\limsup_{b, b' \rightarrow \infty} |P_{\Lambda(b)}(J) - P_{\Lambda(b')}(J)| \leq 2 \left[1 - \left(\frac{a}{a+u} \right)^d \right] \|J\|_{\infty}. \quad (13)$$

Nehmen wir davon den Limes für $a \rightarrow \infty$, so sehen wir, dass die $\{P_{\Lambda(b)}(J)\}$ eine Cauchy-Folge bilden, welche einen Limes $p(J)$ hat. Die Konvergenz von $P_{\Lambda(b)}(J)$ und damit von $p(J)$, folgt aus der Hölder-Ungleichung: Für die Erwartungswerte $\langle \dots \rangle_0$ bez. $\pi_{\Lambda} P_p$ gilt*)

$$\begin{aligned} \langle e^{-H_{\Lambda, tJ + (1-t)J'}} \rangle_0 &= \langle e^{-tH_{\Lambda, J}} e^{-(1-t)H_{\Lambda, J'}} \rangle_0 \\ &\leq \langle e^{-H_{\Lambda, J}} \rangle_0^t \langle e^{-H_{\Lambda, J'}} \rangle_0^{1-t} \quad \text{für } 0 \leq t \leq 1, \end{aligned}$$

und daher

$$P_{\Lambda}(tJ + (1-t)J') \leq t P_{\Lambda}(J) + (1-t) P_{\Lambda}(J'). \quad (14)$$

Die Lipschitz-Stetigkeit von $p(J)$ ergibt sich aus (8). \square

Bem. Wir haben hier "freie" Randbed. verwendet. Der thermodyn. Limes ist aber (für die freie Energie!) erwartungsgemäss unabhängig von der Wahl der Randbed. (siehe dazu Israel).

*) Aus $\|F \cdot G\|_1 \leq \|F\|_p \|G\|_q$, $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ folgt für $F = e^{\lambda f}$, $G = e^{(1-\lambda)g}$:

$$\int e^{\lambda f + (1-\lambda)g} d\mu \leq \left(\int e^f d\mu \right)^{\lambda} \left(\int e^g d\mu \right)^{1-\lambda}, \quad 0 \leq \lambda \leq 1.$$

ANHANG H. Spontane Symmetriebrechung, Mermin-Wagner-Theorem

Zustände des unendlichen Gitters sind W -Klasse auf dem Konfigurationstraum $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ (E : 1-Spin Zustandraum). Für uns sind die Gleichgewichtszustände besonders wichtig.

1. Gibbs-Zustände für das unendliche Volumen

Ich kümple an §II.1B (p. II.74-) an und benutze dieselben Bezeichnungen wie dort.

Für ein endliches Teilgitter $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ (Hyperkubus) betrachten wir nun auch Gibbs-Zustände auf Λ mit äußeren Bedingungen $S_{\Lambda^c} \in \Omega_{\Lambda^c} = E^{\Lambda^c}$ (Λ^c = Komplement von Λ). Wir geben uns dabei die Spinkonfiguration $\{S_i, i \in \Lambda^c\}$ in Λ^c vor. Mit $H_{\Lambda}(S_{\Lambda} | S_{\Lambda^c})$ bezeichnen wir die Energie der Spins in Λ untereinander sowie die Wechselwirkungsenergie mit der vorgegebenen Spinkonfiguration S_{Λ^c} ausserhalb von Λ :

$$H_{\Lambda}(S_{\Lambda} | S_{\Lambda^c}) = - \sum_{(i,j) \subset \Lambda} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{h} \cdot \sum_{i \in \Lambda} \vec{S}_i - \sum_{i \in \Lambda} \sum_{j \in \Lambda^c} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (1)$$

(Mit dem 2. Term haben wir eine zusätzliche Wechselwirkung mit einem äusseren Magnetfeld hinzugefügt.) Der zugehörige Gibbs-Zustand $d\mu_{\Lambda, \beta}^{S_{\Lambda^c}}$ ist

$$d\mu_{\Lambda, \beta}^{S_{\Lambda^c}}(S_{\Lambda}) = Z_{\Lambda}(S_{\Lambda^c})^{-1} e^{-\beta H_{\Lambda}(S_{\Lambda} | S_{\Lambda^c})} d\rho^{\Lambda}(S_{\Lambda}), \quad (2)$$

wobei $Z_{\Lambda}(S_{\Lambda^c})$ wieder das Normierungsintegral ist,

$$Z_{\Lambda}(S_{\Lambda^c}) = \int_{\Omega_{\Lambda}} e^{-\beta H_{\Lambda}(S_{\Lambda} | S_{\Lambda^c})} d\rho^{\Lambda}(S_{\Lambda}). \quad (3)$$

Dieses Mass auf Ω_λ können wir als Mass auf ganz Ω auffassen^{*}).
Wir verwenden dafür denselben Buchstaben.

Nun sei $G_{\beta,h}^0$ die Menge der W -Masse von Ω , welche vage (schwache) Grenzwerte von Gibbs-Massen (2) für $\lambda \in \mathbb{Z}^d$ sind. Ferner bezeichne $G_{\beta,h}$ die in der vagen Topologie abgeschlossene konvexe Hülle von $G_{\beta,h}^0$. (Die vage Topologie wird z.B. in H. Bauer, Mass- und Integrationslehre, §30, eingeführt.) Die Elemente von $G_{\beta,h}$ sind die Gibbs- (Gibbsgewichts-) Zustände des unendlichen Volumens. Diese sind eingehend studiert worden (siehe z.B. B. Simon, Kap. III).

Wir definieren an dieser Stelle den Begriff der spontanen Spinnüberbedingung. Sind die T_{ij} in (1) proportional zu δ_{ij} , so ist die Wechselwirkung zwischen den Spins invariant unter $SO(n)$, wenn \vec{S}_i Werte in \mathbb{R}^n hat. Falls es einen Zustand in $G_{\beta,h=0}$ gibt, der nicht invariant ist unter $SO(n)$ (bezüglich der natürlichen Operation von $SO(n)$ auf Ω), so sagen wir, die $SO(n)$ -Symmetrie sei spontan gebrochen. Man kann in vielen Fällen zeigen, dass dies bei genügend tiefen Temperaturen der Fall ist (siehe §II.10). Eine wichtige Ausnahme bilden

^{*}) Bezeichnen wir das Mass (2) auf Ω_λ abkürzend mit μ , so definieren wir dessen Erweiterung $\bar{\mu}$ auf Ω durch $\bar{\mu}(A) = \mu(A)$ ($\bar{A} \in \sigma$ -Algebra zu Ω), wo A aus \bar{A} folgendermassen hervorgeht: Betrachte diejenigen Spinkonfigurationen aus \bar{A} , deren Komponenten auf Λ^c die vorgegebenen Werte annehmen und nehme von dieser Menge die Projektion auf Ω_λ . Die so definierte Menge A ist messbar.

Spinssysteme in zwei Dimensionen für $n \geq 2$. Dies ist der Inhalt eines wichtigen Theorems, das wir im übernächsten Abschnitt beweisen werden. Zunächst benötigen wir aber ein universelles technisches Hilfsmittel.

2. Die klassische Bogoljubov-Ungleichung

Wir betrachten einen W-Raum $(\Omega, \mathcal{A}, \mu_0)$ und darin eine masselose Transformation α . Ferner sei H eine messbare (nach unten beschränkte) Funktion auf Ω und

$$d\mu = \bar{e}^H d\mu_0 / Z, \quad Z = \int_{\Omega} e^{-H} d\mu_0. \quad (4)$$

Bezeichnet $\langle \dots \rangle$ den Erwartungswert bez. $d\mu$, so gilt für eine Observable F

$$\langle F \circ \alpha \rangle = \langle F e^{-H \circ \alpha^{-1}} \rangle. \quad (5)$$

In der Tat haben wir

$$\begin{aligned} \langle F \circ \alpha \rangle &= \int F \circ \alpha \bar{e}^H d\mu_0 / Z = \int F e^{-H \circ \alpha^{-1}} d\mu_0 / Z \\ &= \int F e^{-H \circ \alpha^{-1}} d\mu = \langle F e^{-H \circ \alpha^{-1}} \rangle. \end{aligned}$$

Wählen wir in (5) eine 1-parametrische Gruppe α_t von masselosen Transformationen, so erhalten wir bei differenzierbarer t -Abhängigkeit aus (5)

$$\left\langle \frac{d}{dt} F \circ \alpha_t \right\rangle = \left\langle F \frac{d}{dt} e^{-H \circ \alpha_t} \right\rangle.$$

Speziell für $t=0$ ergibt sich mit der Ableitung $\dot{F} = \frac{d}{dt} F \circ \alpha_t \big|_{t=0}$:

$$\langle \dot{F} \rangle = \langle F \dot{H} \rangle. \quad (6)$$

Benutzen wir für die rechte Seite noch die Schwarz'sche Ungleichung, so folgt daraus

$$|\langle \dot{F} \rangle|^2 \leq \langle |F|^2 \rangle \langle \dot{H}^2 \rangle. \quad (7)$$

Für den Faktor $\langle \dot{H}^2 \rangle$ ergibt sich aus (6), wenn wir dort $F = \dot{H}$ wählen,

$$\langle \ddot{H} \rangle = \langle \dot{H}^2 \rangle. \quad (8)$$

Damit erhalten wir aus (7) die Klassische Bogoljubov-Ungl.

$$|\langle \dot{F} \rangle|^2 \leq \langle |F|^2 \rangle \langle \ddot{H} \rangle. \quad (9)$$

Beispiel. (Ω, ω) sei eine symplektische Mannigfaltigkeit mit zugehörigem Liouville-Mass μ_ω und H eine Hamiltonfunktion. Ferner sei α_t eine 1-parametrische Gruppe von symplektischen Transformationen mit zugehörigem Hamilton'schem Vektorfeld X_G . Dann ist

$$\dot{F} = X_G F = \{F, G\} \quad (10)$$

und aus (9) wird

$$|\langle \{F, G\} \rangle|^2 \leq \langle |F|^2 \rangle \langle \{G, \{G, H\}\} \rangle. \quad (11)$$

Die entsprechende Ungleichung in der Quantenstatistik wird in § III.11 B bewiesen.

3. Das Mermin-Wagner-Theorem für klassische Spinsysteme

Dieser Abschnitt ergänzt §II.10.4 und wir benutzen dieselben Bezeichnungen wie dort. Ich folge dabei einer Arbeit von Klein, Landau & Shuker (1981) (siehe auch F. Simon, §III.7). Wir beweisen das

Theorem (Mermin-Wagner): Für das klassische Polarmodell (10.29) ist in zwei Dimensionen jeder Gleichgewichtszustand invariant unter simultaner Drehung aller Spins.

Beweis: Es bezeichne R_φ die Abbildung einer Drehung um den Winkel φ auf dem Phasenraum $\Omega = (S^1)^{\mathbb{Z}^2}$ (simultane Drehung aller Spins). Es genügt zu zeigen, dass für einen Gleichgewichtszustand $\langle A \circ R_\varphi \rangle = \langle A \rangle$ für jede Funktion A auf Ω , welche nur von endlich vielen Spins abhängt und für welche diese Abhängigkeit zudem glatt ist. Diese Invarianzeigenschaft der Erwartungswerte wiederum folgt aus $\langle \frac{d}{d\varphi} A \circ R_\varphi |_{\varphi=0} \rangle = 0$. Da A einen endlichen Träger hat, können wir R_φ folgendermassen abändern:

Es sei Λ (endlich) $\subset \mathbb{Z}^2$ so gewählt, dass $A \in C_\Lambda$ und f sei eine Funktion auf dem Gitter mit den Eigenschaften:

- (i) $f(i) = 0$ falls $|i|$ genügend gross ist;
 - (ii) $f(i) = 1$ für $i \in \Lambda$.
- (12)

Ist dann $\vec{\sigma}_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$ die Operation π_φ definiert

durch

$$[\pi_\varphi \theta]_i = \theta_i + \varphi f(i), \quad (13)$$

so gilt $\pi_\varphi = R_\varphi$ innerhalb Λ und π_φ wird weit weg zur Identität. Insbesondere ist $\frac{d}{d\varphi} A \circ R_\varphi = \frac{d}{d\varphi} A \circ \pi_\varphi$. Auf dem endlichen Gitter haben wir also

$$H \circ \pi_\varphi - H = - \sum_{\langle k, l \rangle} \left\{ \cos [(\theta_k - \theta_l) + \varphi (f(k) - f(l))] - \cos(\theta_k - \theta_l) \right\}. \quad (14)$$

Hier liegen nun endlich viele Terme bei und die Summe wird unabhängig von der Wahl des endlichen Gitters, sobald dieses genügend gross ist. Damit ist

$$\left| \frac{d^2}{d\varphi^2} H \circ \pi_\varphi \right| \leq \sum_{\langle k, l \rangle} |f(k) - f(l)|^2. \quad (15)$$

Da ferner der Gleichgewichtszustand auf dem unendlichen Gitter durch schwache Limesbildung und konvexen Abschluss gewonnen werden kann, dürfen wir in der obigen Situation die Bogoljubov-Ungleichung (9) für $F=A$ und die Transformation π_φ auch für den Gleichgewichtszustand des unendlichen Volumens verwenden: Bei $\varphi=0$ gilt demnach

$$\begin{aligned} \left| \left\langle \frac{d}{d\varphi} A \circ R_\varphi \right\rangle \right|^2 &= \left| \left\langle \frac{d}{d\varphi} A \circ \pi_\varphi \right\rangle \right|^2 \leq \langle A^2 \rangle \beta \left| \left\langle \frac{d^2}{d\varphi^2} (H \circ \pi_\varphi) \right\rangle \right| \\ &\leq \beta \langle A \rangle^2 \sum_{\langle k, l \rangle} |f(k) - f(l)|^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Da die interessierende Grösse ganz links unabhängig von f ist, können wir rechts das Infimum bezüglich f nehmen.

Aus dem folgenden Lemma ergibt sich dann die Behauptung. \square

Lemma: Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ endlich. Dann ist das Infimum von $\sum_{\langle k, l \rangle} |f(k) - f(l)|^2$ bezügl. allen f 's, welche die Bedingungen in (12) erfüllen, gleich Null.

Beweis: Es sei $g \in C_c^\infty(\mathbb{R}^2)$ eine glatte Funktion mit kompaktem Träger welche in einer Umgebung von 0 identisch gleich 1 ist und setzen $f(k) = g(k/n)$. Für ein genügend großes n erfüllt dann f die Bedingungen in (12) und es ist

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\langle k, l \rangle} |f(k) - f(l)|^2 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\langle k, l \rangle} |g(k/n) - g(l/n)|^2 \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\substack{\langle k, l \rangle \\ |k-l|=1}} \frac{1}{n^2} [g(k/n) - g(l/n)]^2 = \int dx |\nabla g(x)|^2. \end{aligned}$$

Es genügt also zu zeigen, dass wir ein g finden können, für welches das Integral recht so klein ist wie wir wollen. Hindernd dafür ist, dass wir zu jedem $\varepsilon > 0$ eine Funktion g_ε finden können, für die ∇g_ε stückweise stetig ist und im Unendlichen verschwindet, und für die das entsprechende Integral kleiner als $\# \varepsilon$ ist. Die folgende Funktion erfüllt diese Bedingungen

$$g_\varepsilon(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } |x| \leq 1 \\ |x|^{-\varepsilon} & \text{für } |x| \geq 1. \end{cases}$$

In der Tat ist

$$\int |\nabla g_\varepsilon|^2 dx = 2\pi \int_1^\infty \varepsilon^2 r^{-2-2\varepsilon} r dr = \pi \varepsilon. \quad \square$$

Bemerkung. Diese Argumente können auf allgemeinere Spinssysteme und andere Spinordgruppen übertragen werden. Siehe dazu B. Simon, §III.7 und die dort zitierten Arbeiten (insbes. von Klein-Landau-Ginzburg).

* * *

Anhang I. Die Funktionen $f_\lambda(z)$

Wir untersuchen im folgenden die Funktionen (III.6.25):

$$f_\lambda(z) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1}}{z^{-1}e^x + 1} dx, \quad \lambda > 0. \quad (1)$$

Speziell zur Herleitung der asymptotischen Entwicklung (III.6.44) ist die folgende komplexe Darstellung von f_λ nützlich

$$\hat{f}_\lambda(w) = \frac{1}{2\pi i} \int_{a-i\infty}^{a+i\infty} \frac{\pi z^{-\lambda}}{\sin \pi z} e^{wz} dz \quad (0 < a < 1). \quad (2)$$

Darin verläuft der Integrationsweg parallel zur imaginären Achse im Abstand a . Zur Herleitung von (2) schreiben wir (1), d.h.

$$\hat{f}_\lambda(w) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty \frac{x^{\lambda-1}}{e^{x-w} + 1} dx, \quad (3)$$

als Faltung:

$$\hat{f}_\lambda(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \psi(w-x) dx, \quad (4)$$

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Gamma(\lambda)} x^{\lambda-1}, & x > 0 \\ 0, & x \leq 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$\text{und} \quad \psi(x) = \frac{1}{e^{-x} + 1}. \quad (6)$$

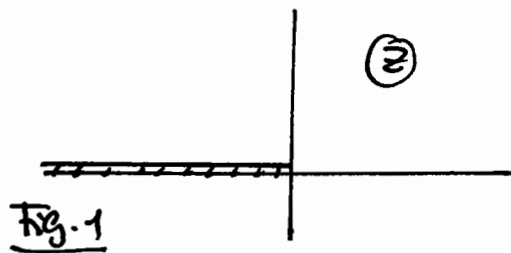
Für die Laplace-Transformierten^{*}) gilt deshalb

$$\mathcal{L} \hat{f}_\lambda = (\mathcal{L}\varphi) \cdot (\mathcal{L}\psi) \quad (7)$$

(siehe MUP-Skript, § V.4). Für $\mathcal{L}\varphi$ finden wir sofort für $\operatorname{Re} z > 0$

$$(\mathcal{L}\varphi)(z) = \frac{1}{\Gamma(\lambda)} \int_0^\infty x^{\lambda-1} e^{-zx} dx = z^{-\lambda}. \quad (8)$$

$\mathcal{L}\varphi$ besitzt eine analytische Fortsetzung in der längs der negativen reellen Achse aufgeschnittenen z -Ebene: Setzt man



$$z = r e^{i\varphi}, \quad -\pi < \varphi < \pi, \quad \text{so ist } \mathcal{L}\varphi(z) = r^{-\lambda} e^{i\lambda\varphi}.$$

Für $\mathcal{L}\psi$ haben wir

$$(\mathcal{L}\psi)(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-zx}}{e^{-x} + 1} dx. \quad (9)$$

Wegen

$$\left| (e^{-x} + 1)^{-1} e^{-zx} \right| \leq \begin{cases} e^{-x \operatorname{Re} z}, & x > 0 \\ e^{x(1 - \operatorname{Re} z)}, & x < 0, \end{cases}$$

definiert (9) eine im Streifen $0 < \operatorname{Re} z < 1$ holomorphe Funktion.

* Wir definieren diese hier als Integral über die ganze reelle Achse:

$$(\mathcal{L}h)(s) = \int_{\mathbb{R}} e^{-st} h(t) dt.$$

Für reelle $z \in (0, 1)$ haben wir (setze in (9) $u = e^{-x}$)

$$(\mathcal{L}\psi)(z) = \int_0^{\infty} \frac{u^{z-1}}{u+1} du.$$

Dieses Integral berechnet man am einfachsten mit dem Residuensatz: Für

$$I_R := \int_{C_R} \frac{z^{z-1}}{z+1} dz$$

gibt dieser ($R > 1$): $I_R = 2\pi i e^{i\pi(z-1)}$.

Für $R \rightarrow \infty$ gibt der große Kreis von C_R keinen Beitrag und deshalb

ist

$$I_{\infty} = 2\pi i e^{i\pi(z-1)} = [1 - e^{i2\pi(z-1)}] \int_0^{\infty} \frac{u^{z-1}}{u+1} du.$$

Somit haben wir

$$(\mathcal{L}\psi)(z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}. \quad (10)$$

Diese Funktion kann in die ganze z -Ebene fortgesetzt werden und besitzt dort Pole für $z \in \mathbb{Z}$.

Mit (8) und (10) erhalten wir aus (7)

$$\hat{\mathcal{L}}_{f_1}^{\lambda}(z) = \frac{\pi z^{-\lambda}}{\sin \pi z} \quad (11)$$

und durch Rücktransformation ergibt sich die Behauptung (2).

Zur asymptotischen Auswertung von (2) für $w > 1$ bemerken wir, dass der Integrand in der geschnittenen Ebene der Fig. 1 analytisch ist. Deshalb können wir den Integrationsweg dafür-

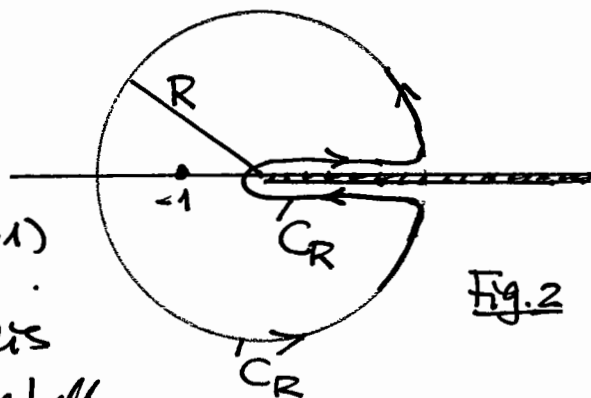
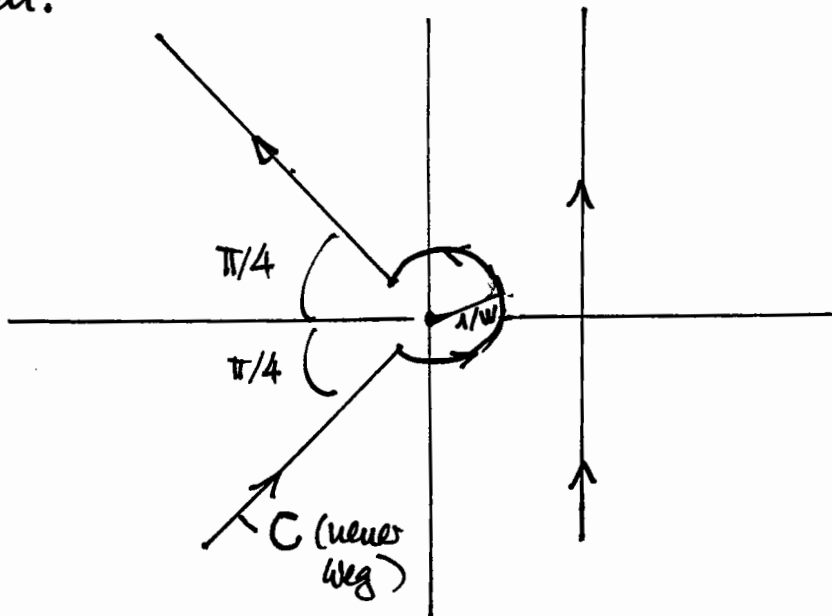


Fig. 2

Wieder:



$$\int_C \frac{1}{z^{\lambda+1}} \frac{\pi z^{-\lambda}}{\sin \pi z} e^{wz} dz \quad (12)$$

Hier sehen wir die Entwicklung

$$\frac{\pi z}{\sin \pi z} = \sum_{k=0}^N c_{2k} z^{2k} + z^{2N+2} r_N(z) \quad (13)$$

ein und erhalten

$$\int_C \frac{1}{z^{\lambda+1}} \left\{ \sum_{k=0}^N \frac{c_{2k}}{\Gamma(\lambda+1-2k)} w^{-2k} + R_N^U(w) \right\} dz, \quad (14)$$

und

$$R_N^U(w) = w^{-\lambda} \frac{1}{2\pi i} \int_C z^{-\lambda} z^{2N+1} r_N(z) e^{wz} dz. \quad (15)$$

Dabei haben wir im ersten Term von (14) die Hankel-Darstellung für $1/\Gamma(z)$ verwendet (siehe KHP, § I.6). Es bleibt die Aufgabe, $R_N^U(w)$ abzuschätzen. Dazu zerlegen wir C in 5 Stücke:

$$C_0: z = \frac{1}{w} e^{i\varphi}, \quad -3\pi/4 \leq \varphi \leq 3\pi/4,$$

-I.5-

$$C_1: z = t e^{i3\pi/4}, \quad w^{-1} \leq t \leq 1,$$

$$C_2: z = t e^{i3\pi/4}, \quad 1 \leq t < \infty$$

und entsprechend C_{-1}, C_{-2} ($3\pi/4 \rightarrow -3\pi/4$).

Längs C_0 haben wir die Abschätzung $|r_N(z)| \leq \mathfrak{B}_N < \infty$,
also gilt

$$|\text{Beitrag von } C_0| \leq \mathfrak{B}_N e^{-2N-z}.$$

Auch längs C_1 ist $r_N(z)$ beschränkt: $|r_N(z)| \leq \hat{\mathfrak{B}}_N < \infty$.
Dann ist

$$|\text{Beitrag von } C_1| \leq \hat{\mathfrak{B}}_N \hat{\mathfrak{B}}_N w^{-2N-2},$$

$$\hat{\mathfrak{B}}_N = \frac{1}{2\pi} 2^{\frac{2N+2-\lambda}{2}} \int_{z^{-1/2}}^{\infty} e^{-u} u^{2N+1-\lambda} du < \infty.$$

Der Beitrag von C_2 ist

$$w^{-\lambda} \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} z^{-\lambda} \left\{ \frac{\pi}{\sin \pi z} - \sum_{k=0}^N C_{2k} z^{2k-1} \right\} e^{wz} dz.$$

Beachtet man $|\sin \pi z| \geq \sinh \frac{t\pi}{\sqrt{2}} \geq \frac{t\pi}{\sqrt{2}}$ für $z \in C_2$, so
wird jeder der Terme im letzten Ausdruck abgeschatzt durch

$$\text{const } w^{-\lambda} \int_1^{\infty} t^{\sigma} e^{-\frac{1}{\sqrt{2}} wt} dt < \mathfrak{B}(\lambda, \sigma) e^{-\frac{1}{2}w}, \quad w > 1.$$

Somit gilt

$$|\text{Beitrag von } C_2| \leq C(N, \lambda) e^{-\frac{1}{2}w}.$$

Insgesamt haben wir $|R_{\lambda}^N(w)| \leq C_{\lambda}^N w^{-2N-2}$, w.z.b.w.