Verschiedenes zum Übungsblatt Nr.6

Aufgabe 1

Die Aufgabe behandelt im Prinzip das Einstein-Modell eines eindimensionalen Festkörpers, in dem alle Atome mit derselben Frequenz ω schwingen. (Eine genauere Rechnung kann mittels des Debye-Modells durchgeführt werden.)

a.)

Der Phasenraum des klassischen Systems wird durch die N Ortsvariablen $x_1, \ldots, x_N$ und durch die N Impulsvariablen $p_1, \ldots, p_N$ aufgespannt; dieser ist also $2N$-dimensional. Zur Berechnung des Phasenraumvolumens ist über alle Orts- und Impulsvariablen zu integrieren unter der Nebenbedingung, dass die Hamiltonfunktion kleiner oder gleich der Energie E des Systems ist:

$$\Omega(E) = \int\limits_{H \leq E} \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_N \, \mathrm{d}p_1 \ldots \mathrm{d}p_N \,, \quad H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x_i^2 \right) . \tag{1}$$

Mittels einer geschickten Variablenersetzung führen wir neue Variablen q_i ein, so dass wir nur noch mit diesem einen Variablentyp rechnen müssen (anstelle der beiden Typen x_i und p_i):

$$q_i = \frac{p_i}{\sqrt{m}} \,, \quad i = 1, \ldots, N \,, \tag{2}$$

und

$$q_i = \sqrt{m}\omega x_i \,, \quad i = N+1, \ldots, 2N \,. \tag{3}$$

Damit können wir jetzt nämlich die Hamiltonfunktion viel einheitlicher schreiben als:

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} q_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=N+1}^{2N} q_i^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2N} q_i^2 \,. \tag{4}$$

Mittels der Differentiale durch die Variablensubstitution

$$\mathrm{d}p_i = \sqrt{m}\, \mathrm{d}q_i \,, \quad \mathrm{d}x_i = \frac{1}{\sqrt{m}\omega} \mathrm{d}q_i \,, \tag{5}$$

kann nun das Phasenraumvolumen auf folgende ansprechende und einfacher zu berechnende Form gebracht werden:

$$\boxed{\Omega(E) = \frac{1}{\omega^N} \int_{\sum_{i=1}^{2N} q_i^2 \leq 2E} \mathrm{d}q_1 \ldots \mathrm{d}q_{2N} \,.} \tag{6}$$

Die Nebenbedingung $\sum_{i=1}^{2N} q_i^2 \leq 2E$ beschreibt eine $2N$-dimensionale Kugel mit dem Radius $\sqrt{2E}$, deren Volumen im Aufgabentext angegeben ist. Damit lautet das Ergebnis:

$$\boxed{\Omega(E) = \left(\frac{\pi}{\omega}\right)^N \frac{(2E)^N}{N!} \,.} \tag{7}$$

Hieraus folgt die Anzahl der Zustände, welche der Oberfläche des Phansenraumvolums entspricht. Bei einer Kugel ist die Oberfläche gegeben durch die Ableitung des Volumens nach dem Radius. Hier müssten wir also nach $\sqrt{2E}$ ableiten; die Ableitung nach E ist jedoch im thermodynamischen Limes ($N \gg 1$) völlig ausreichend:

$$\Sigma(E) = \frac{\mathrm{d}\Omega(E)}{\mathrm{d}E} = \left(\frac{\pi}{\omega}\right)^N \frac{2N(2E)^{N-1}}{N!} \,, \tag{8}$$

und damit die Entropie im mikrokanonischen Ensemble:

$$
\begin{aligned}
S_{\text{mikro}} &= k_B \ln(\Sigma) = k_B \left\{ \ln \left(\frac{2\pi E}{\omega} \right)^N - \ln(2E) + \ln(2N) - N \ln N + N \right\} = \\
&= k_B \left\{ (N-1) \ln \left(\frac{2\pi E}{\omega N} \right) + \ln \left(\frac{2\pi E}{\omega N} \right) + \ln \left(\frac{N}{E} \right) + N \right\} = \\
&= \boxed{k_B \left\{ (N-1) \ln \left(\frac{2\pi E}{\omega N} \right) + N + \ln \left(\frac{2\pi}{\omega} \right) \right\} .}
\end{aligned} \tag{9}
$$

Die Temperatur des Systems ergibt sich schließlich aus:

$$
T = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)^{-1} = \left\{ k_B (N-1) \frac{1}{\frac{2\pi E}{\omega N}} \cdot \frac{2\pi}{\omega N} \right\}^{-1} = \boxed{\frac{E}{k_B (N-1)} .} \tag{10}
$$

Lässt man bei konstant gehaltener Energie E die Teilchenzahl N gegen Unendlich streben, so geht die Temperatur auf Null. Dies ist anschaulich klar, denn führt man einem makroskopischen Festkörper (gekennzeichnet durch eine sehr große Teilchenzahl) eine moderate Energie zu, so wird nur ein kleiner Anteil des Atomgitters zum Schwingen angeregt, was wiederum einer niedrigen Wärmebewegung und damit kleinen Temperatur entspricht.

b.)

Wir berechnen das kanonische Zustandsintegral:

$$
\begin{aligned}
Z_K &= \int \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_N \, \mathrm{d}p_1 \ldots \mathrm{d}p_N \, \exp(-\beta H) = \\
&= \int \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_N \, \mathrm{d}p_1 \ldots \mathrm{d}p_N \, \exp \left(-\beta \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x_i^2 \right] \right) = \\
&= \int \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_1 \ldots \mathrm{d}x_n \prod_{i=1}^{N} \exp \left(-\frac{m}{2} \omega^2 \beta x_i^2 \right) \int \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_1 \ldots \mathrm{d}p_N \prod_{j=1}^{N} \exp \left(-\frac{\beta}{2m} p_i^2 \right) = \\
&= \prod_{i=1}^{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x_i \, \exp \left(-\frac{m}{2} \omega^2 \beta x_i^2 \right) \prod_{j=1}^{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_j \, \exp \left(-\frac{\beta}{2m} p_i^2 \right) = \prod_{i=1}^{N} \left(\frac{2\pi}{m\omega^2 \beta} \right)^{\frac{1}{2}} \prod_{j=1}^{N} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}} = \\
&= \prod_{i=1}^{N} \frac{2\pi}{\omega \beta} = \boxed{\left(\frac{2\pi k_B T}{\omega} \right)^N .}
\end{aligned} \tag{11}
$$

Das Zustandsintegral faktorisiert demnach. Weiterhin ergibt sich aus Z direkt die freie Energie

$$
F = -k_B T \ln(Z_K) = -N k_B T \ln \left(\frac{2\pi k_B T}{\omega} \right) , \tag{12}
$$

und daraus die Entropie (nach dem ersten Übungsblatt)

$$
S = -\frac{\partial F}{\partial T} = N k_B \ln \left(\frac{2\pi k_B T}{\omega} \right) + N k_B T \cdot \frac{1}{\frac{2\pi k_B T}{\omega}} \cdot \frac{2\pi k_B}{\omega} = \boxed{N k_B \ln \left(\frac{2\pi k_B T}{\omega} \right) + N k_B ,} \tag{13}
$$

und schließlich die innere Energie und die Wärmekapazität:

$$
U = F + TS = \boxed{N k_B T ,} \quad C_B = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \boxed{N k_B .} \tag{14}
$$

Dann gilt mit $E = U = N k_B T$:

$$
S_{\text{kan}} - S_{\text{mikro}} = \boxed{k_B \ln(k_B T) .} \tag{15}
$$

Die intensive Größe $(S_{\text{kan}} - S_{\text{mikro}})/N$ geht für große N (thermodynamischer Limes) also gegen Null, was der Äquivalenz der mikrokanonischen und der kanonischen Gesamtheit entspricht.
Anmerkung: Rechnet man nicht mit der Stirling-Formel, sondern exakt, treten in den intensiven Größen nur Korrekturen der Form $\mathcal{O}(\log(N)/N)$ auf, welche im thermodynamischen Limes verschwinden.

c.)

Wir berechnen die kanonische Zustandssumme für das quantenmechanische System bestehend aus N Oszillatoren mit dem Hamiltonoperator

$$\widehat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hbar\omega \left(a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \right) = \sum_{i=1}^{N} \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) , \tag{16}$$

wobei n_i die Besetzungszahl des i-ten Oszillators ist. Damit gilt also:

$$Z_K = \sum_{n_1=0}^{\infty} \dots \sum_{n_N=0}^{\infty} \exp\left\{ - \sum_{i=1}^{N} \beta\hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \right\} = \prod_{i=1}^{N} \sum_{n_i=0}^{\infty} \exp\left\{ -\beta\hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \right\} = Z_1^N , \tag{17}$$

mit

$$Z_1 = \sum_{n_1=0}^{\infty} \exp\left\{ -\beta\hbar\omega \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \right\} . \tag{18}$$

Die Zustandssumme faktorisiert also und es reicht aus, Z_1 zu berechnen, was wiederum mit dem Grenzwert für die geometrische Reihe schnell vonstatten geht:

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \exp\left\{ -\beta\hbar\omega \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) \right\} = \exp\left(-\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) \sum_{n_1=0}^{\infty} \exp(-\beta\hbar\omega n_i) = \\ &= \exp\left(-\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) \frac{1}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) - \exp\left(-\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} . \end{aligned} \tag{19}$$

Somit gilt dann

$$Z_K = Z_1^N = \boxed{\left[2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2} \right) \right]^{-N} .} \tag{20}$$

Hieraus folgt dann wieder die freie Energie

$$F = -k_B T \ln(Z_K) = N k_B T \ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \right] , \tag{21}$$

und die Entropie:

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = -N k_B \ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \right] - \frac{N k_B T}{2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)} \cdot 2\cosh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \cdot \left(-\frac{\hbar\omega}{2k_B T^2} \right) = \\ &= \boxed{-N k_B \ln\left[2\sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \right] + \frac{N\hbar\omega}{2T} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) .} \end{aligned} \tag{22}$$

Für die freie Energie gilt:

$$U = F + TS = \boxed{\frac{N\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) ,} \tag{23}$$

und die Wärmekapazität folgt durch Ableiten nach der Temperatur unter Verwendung von $\mathrm{d}\coth(x)/\mathrm{d}x = -1/\sinh^2(x)$:

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \frac{N\hbar\omega}{2} \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)} \cdot \frac{\hbar\omega}{2k_B T^2} = \boxed{\frac{N}{k_B} \left(\frac{\hbar\omega}{2T} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)} .} \tag{24}$$

Für $T \mapsto \infty$ erhalten wir die Grenzwerte

$$U = N k_B T , \quad C_V = N k_B , \tag{25}$$

was dem klassischen Verhalten entspricht. Da wir die Rechnung in einer Dimension durchgeführt haben, muss man für einem dreidimensionalen Festkörper das Ergebnis noch mit 3 multiplizieren, weil die Atome in allen drei Raumrichtungen schwingen können. Dann erhält man das Dulong-Petit-Verhalten. Für $T \mapsto 0$ gilt für die innere Energie

$$U = N\frac{\hbar\omega}{2}\,, \tag{26}$$

was der Nullpunktsenergie von N quantenmechanischen harmonischen Oszillatoren entspricht. Für die Wärmekapazität gilt wiederum:

$$C_V = \frac{N}{k_B}\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right) \sim \frac{1}{T^2}\exp\left(-\frac{\Delta}{k_BT}\right)\,, \tag{27}$$

mit der Energielücke $\Delta = \hbar\omega$. Die Energielücke kennzeichnet die Anregung von massiven Phononen mit der Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{k}) = \omega = \text{const.}$ (Diese besitzen bei $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ eine Energielücke). Nichts desto trotz gilt $C_V \mapsto 0$ für $T \mapsto 0$, was in Übereinstimmung mit dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik ist.

Aufgabe 2

a.)

Zunächst berechnen wir wieder das kanonische Zustandsintegral:

$$\begin{aligned}
Z_K &= \int \mathrm{d}\Omega_1 \dots \int \mathrm{d}\Omega_N \,\exp\left(\frac{B}{k_BT}\sum_{i=1}^N J_i^z\right) = \\
&= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_1 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_1\,\sin\vartheta_1 \dots \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_N \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_N\,\sin\vartheta_N\,\exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\sum_{i=1}^N \cos\vartheta_i\right) = \\
&= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_1 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_1\,\sin\vartheta_1 \exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\cos\vartheta_1\right) \dots \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_N \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_N\,\sin\vartheta_N \exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\cos\vartheta_N\right)\,.
\end{aligned} \tag{28}$$

Damit separiert die Zustandssumme und es gilt $Z_K = Z_1^N$ mit

$$\begin{aligned}
Z_1 &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_1 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_1\,\sin\vartheta_1 \exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\cos\vartheta_1\right) = 2\pi\left[-\frac{k_BT}{BJ}\exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\cos\vartheta_1\right)\right]_0^{\pi} = \\
&= 2\pi\frac{k_BT}{BJ}\left[\exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\right) - \exp\left(-\frac{BJ}{k_BT}\right)\right] = 4\pi\frac{k_BT}{BJ}\sinh\left(\frac{BJ}{k_BT}\right)\,.
\end{aligned} \tag{29}$$

Ebenso separiert die Magnetisierung:

$$\begin{aligned}
M &= \frac{1}{Z_K}\int \mathrm{d}\Omega_1 \dots \mathrm{d}\Omega_N \sum_{j=1}^N J_j^z \exp\left(\frac{B}{k_BT}\sum_{i=1}^N J_i^z\right) = \\
&= \frac{1}{Z_1}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_1 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_1\, J\sin\vartheta_1\cos\vartheta_1 \exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\cos\vartheta_1\right) \dots \\
&\qquad \dots \frac{1}{Z_N}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_N \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_N\, J\sin\vartheta_N\cos\vartheta_N \exp\left(\frac{BJ}{k_BT}\cos\vartheta_N\right)\,,
\end{aligned} \tag{30}$$

also

$$M = N\langle J_1^z\rangle\,, \quad J_1^z = \frac{1}{Z_1}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_1 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\vartheta_1\, J\sin\vartheta_1\cos\vartheta_1 \exp\left(\beta B\cos\vartheta_1\right)\,, \quad \beta = \frac{1}{k_BT}\,. \tag{31}$$

Damit gilt dann:

$$M = N\langle J_1^z\rangle = \frac{N}{Z_1}\frac{\partial Z_1}{\partial(\beta B)} = \frac{\beta BJ}{4\pi}\frac{1}{\sinh(\beta B)}\frac{\beta BJ\cosh(\beta BJ) - \sinh(\beta B)}{(\beta B)^2}\frac{4\pi}{J} =$$
$$= \boxed{N\left(J\coth(\beta BJ) - \frac{1}{\beta B}\right).} \tag{32}$$

b.)

Wir hatten auf dem vorherigen Blatt in Aufgabe (3b) das Ganze quantenmechanisch gerechnet. Damit folgte für die Magnetisierung die Brillouin-Funktion:

$$M = N\left[\left(\frac{2J+1}{2}\right)\coth\left(\beta B\frac{2J+1}{2}\right) - \frac{1}{2}\coth\left(\frac{\beta B}{2}\right)\right]. \tag{33}$$

Wir möchten den Grenzwert von M für $J \mapsto \infty$ untersuchen und mit dem zuvor klassisch berechneten Ergebnis vergleichen. Beide Ergebnisse müssten nach dem Korrespondenzprinzip übereinstimmen, welches ja besagt, dass die Quantenmechanik für große Quantenzahlen in die klassische Physik übergeht.
Wegen $\lim_{x\mapsto\infty}\coth(x) = 1$ gilt für $J \mapsto \infty$: $M \mapsto NJ$, was dann selbst gegen Unendlich geht. Somit ist es geschickt, dieses Verhalten herauszudividieren und die Magnetisierung normiert auf die Spinlänge J und pro Gitterplatz zu betrachten (wobei das letztere nicht so wichtig ist):

$$\overline{m} = \frac{M}{JN} \mapsto 1 \text{ für } J \mapsto \infty\,. \tag{34}$$

Ein weiteres Problem stellt die minimale/maximale Energie dar, welche für $J \mapsto \infty$ unbeschränkt wächst:

$$\left.\begin{array}{r}\min(E) = -BJN \mapsto -\infty \\ \max(E) = BJN \mapsto \infty\end{array}\right\} \text{ für } J \mapsto \infty\,. \tag{35}$$

Um dafür zu sorgen, dass die Energie selbst nicht ins Unermessliche ansteigt, fordern wir, dass beim Grenzübergang $J \mapsto \infty$ das Produkt BJ konstant bleibt. Wir bezeichnen dieses Produkt $b = BJ$ als reduziertes Magnetfeld. Damit gilt dann quantenmechanisch

$$\boxed{\overline{m} = \frac{M}{NJ} = \frac{2J+1}{2J}\coth\left(\beta b\frac{2J+1}{2J}\right) - \frac{1}{2J}\coth\left(\frac{\beta b}{2J}\right),} \tag{36}$$

und klassisch

$$\boxed{\overline{m}^{\mathrm{kl}} = \frac{M^{\mathrm{kl}}}{NJ} = \coth(\beta b) - \frac{1}{\beta b}.} \tag{37}$$

Also gilt mit $\coth(x) = 1/x + \mathcal{O}(x)$ für kleine x (Anwendung auf den zweiten Term im quantenmechanischen Ergebnis):

$$\boxed{\overline{m} = \overline{m}^{\mathrm{kl}} \text{ für } J \mapsto \infty\,,} \tag{38}$$

so wie es nach dem Korrespondenzprinzip auch sein muss :-)

Aufgabe 3

a.)

Die Wellenfunktion für ein freies Punktteilchen kann als Superposition von komplexen Exponentialfunktionen geschrieben werden:

$$\psi(\mathbf{r}) = A\exp(\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + B\exp(-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,. \tag{39}$$

Die angegebene periodische Randbedingung

$$\psi(\mathbf{r} + L\mathbf{e}_\mu) = \psi(\mathbf{r})\,, \quad \mu = 1, 2, \ldots, d\,, \tag{40}$$

führt auf:

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}+L\mathbf{e}_\mu) &= A\exp[\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+L\mathbf{e}_\mu)] + B\exp[-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+L\mathbf{e}_\mu)] = \\ &= A\exp(\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\exp(\mathrm{i}L\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_\mu) + B\exp(-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\exp(-\mathrm{i}L\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_\mu) \overset{!}{=} \\ &\overset{!}{=} A\exp(\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + B\exp(-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,. \end{aligned} \tag{41}$$

Durch Vergleich ergeben sich die beiden Bedingungen

$$\exp(\mathrm{i}L\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_\mu) \overset{!}{=} 1\,, \quad \exp(-\mathrm{i}L\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_\mu) \overset{!}{=} 1\,. \tag{42}$$

Diese sind genau dann erfüllt, wenn das Argument der Exponentialfunktion ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi\mathrm{i}$ ist:

$$\mathrm{i}L\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_\mu \overset{!}{=} 2\pi\mathrm{i}n_\mu \Rightarrow \mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_\mu = \frac{2\pi}{L}n_\mu \Rightarrow \boxed{k_\mu = \frac{2\pi}{L}n_\mu\,, \quad n_\mu \in \mathbb{Z}\,, \quad \mu \in \{1,2,\dots,d\}\,.} \tag{43}$$

Die Summation über alle $\mathbf{k}$-Vektoren ist nichts anderes als die Summation über alle Werte der einzelnen Komponenten von $\mathbf{k}$, was auch schon angegeben war:

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{V}\sum_{k_1,k_2,\dots,k_d} F(k_1,k_2,\dots,k_d)\,. \tag{44}$$

Da prinzipiell mit Summen nicht so toll zu rechnen ist, möchten wir das Ganze in ein Integral umschreiben. Im thermodynamischen Limes (also $L \mapsto \infty$ und $V \mapsto \infty$) rücken die zuvor ausgerechneten $\mathbf{k}$-Werte immer näher zusammen und werden gewissermaßen kontinuierlich. Mit dem Abstand zwischen zwei benachbarten Komponenten von $\mathbf{k}$, also $\Delta k_\mu = 2\pi/L$ ergibt sich:

$$\begin{aligned}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V}\sum_{k_1,k_2,\dots,k_d} F(k_1,k_2,\dots,k_d) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^d \frac{1}{(2\pi)^d}\sum_{k_1,k_2,\dots,k_d} F(k_1,k_2,\dots,k_d) = \\ &= \left(\frac{\Delta k}{2\pi}\right)^d \sum_{k_1,k_2,\dots,k_d} F(k_1,k_2,\dots,k_d) = \sum_{k_1}\frac{\Delta k}{2\pi}\sum_{k_2}\frac{\Delta k}{2\pi}\dots\sum_{k_d}\frac{\Delta k}{2\pi}F(k_1,k_2,\dots,k_d)\,. \end{aligned} \tag{45}$$

An dieser Stelle lassen wir schließlich Δk gegen Null gehen und ersetzen Δk jeweils durch ein Differential $\mathrm{d}k_1$, $\mathrm{d}k_2$ usw. und die Summen durch Integrale. Dann kommt man auf das angegebene Ergebnis

$$\boxed{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k_1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k_2}{2\pi}\dots\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k_d}{2\pi}F(k_1,k_2,\dots,k_d)\,.} \tag{46}$$

b.)

Kommen wir nun zur Berechnung der Zustandsdichte für Materiewellen. Da die Dispersionsrelation

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \begin{cases} \hbar^2k^2/(2m) & \text{für} \quad d=1 \\ \hbar^2(k_x^2+k_y^2)/(2m) & \text{für} \quad d=2 \\ \hbar^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2)/(2m) & \text{für} \quad d=3 \end{cases} \tag{47}$$

isotrop ist, also nicht von irgendwelchen Winkeln abhängt, ist es geschickt, in zwei Dimensionen Polar- und in drei Dimensionen Kugelkoordinaten zu verwenden. Für $d = 1$, 2 und 3 Dimensionen besitzt dann die Dispersionsrelation dieselbe Form und hängt nur von der radialen Koordinaten ab. Als Argument der δ-Funktion kommt die Funktion

$$f(k) = \varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\,, \tag{48}$$

vor. Um diese auszuwerten, verwenden wir

$$\delta(f(k)) = \sum_{\substack{\text{Nullstellen}\\ k_0 \text{ von } f(k)}} \frac{1}{|f'(k_0)|}\delta(k-k_0)\,. \tag{49}$$

Mit

$$k_0 = \begin{cases} \pm\sqrt{2m\varepsilon}\theta(\varepsilon)/\hbar & \text{für} \quad d=1 \\ \sqrt{2m\varepsilon}\theta(\varepsilon)/\hbar & \text{für} \quad d=2,\,3 \end{cases} \quad , \quad |f'(k)| = \frac{\hbar^2 k}{m}\,, \tag{50}$$

(wobei es eine Nullstelle nur für $\varepsilon \geq 0$ gibt, weshalb die θ-Funktion berücksichtigt wird) ergibt sich dann:

- $d=1$:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\varepsilon) &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\{\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k}{|k|}\delta\left(k - \frac{\sqrt{2m\varepsilon}\theta(\varepsilon)}{\hbar}\right) + \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k}{|k|}\,\delta\left(k + \frac{\sqrt{2m\varepsilon}\theta(\varepsilon)}{\hbar}\right)\right\} = \\ &= \frac{m}{\pi\hbar^2}\cdot\frac{1}{\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}}\theta(\varepsilon) = \boxed{\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\theta(\varepsilon)\,.} \end{aligned} \tag{51}$$

- $d=2$:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\varepsilon) &= \int \frac{\mathrm{d}^2k}{(2\pi)^2}\,\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}k\,k\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}k\,k\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \\ &= \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}k\,\delta\left(k - \frac{\sqrt{2m\varepsilon\theta(\varepsilon)}}{\hbar}\right) = \boxed{\frac{m}{2\pi\hbar^2}\theta(\varepsilon)\,.} \end{aligned} \tag{52}$$

- $d=3$:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\varepsilon) &= \int \frac{\mathrm{d}^3k}{(2\pi)^3}\,\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int\limits_0^{\pi}\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}k\,k^2\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \\ &= \frac{1}{2\pi^2}\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}k\,k^2\delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\int\mathrm{d}k\,k\mathrm{sign}(k)\delta\left(k - \frac{\sqrt{2m\varepsilon}\theta(\varepsilon)}{\hbar}\right) = \\ &= \frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\cdot\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}\theta(\varepsilon) = \boxed{\frac{m^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\sqrt{\varepsilon}\theta(\varepsilon)\,.} \end{aligned} \tag{53}$$