

# Anhang A

## Poissonsche Summen-Formel

In diesem Abschnitt leiten wir die so genannte Poissonsche Summen-Formel ab. Sie ist sowohl für Berechnungen der Greenschen Funktion und des großkanonischen Potentials in den Abschnitten 2.1.3 und 2.1.4, als auch für die Dualitäts-Transformation im Kastenpotential in den Abschnitten 2.4.1 und 3.2.2 von immenser Bedeutung.

Zu Beginn definieren wir die periodisch fortgesetzte Delta-Funktion, welche zuweilen auch als die Kamm-Funktion bezeichnet wird:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) \equiv \delta^{(p)}(x) . \quad (\text{A.1})$$

Aufgrund ihrer Periodizität lässt sie sich in eine Fourier-Reihe entsprechend der Beziehung

$$\delta^{(p)}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta_n^{(p)} e^{2\pi i n x} \quad (\text{A.2})$$

zerlegen. Die Fourier-Koeffizienten  $\delta_n^{(p)}$  folgen aus der direkt verifizierbaren Identität

$$\delta_m^{(p)} = \int_{-1/2}^{1/2} dx e^{-2\pi i m x} \delta^{(p)}(x) . \quad (\text{A.3})$$

Aufgrund der zu (2.40) analogen Beziehung

$$\int_{-1/2}^{1/2} dx e^{2\pi i(m-n)x} = \delta_{n,m} \quad (\text{A.4})$$

ergibt sich aus (A.3) der  $m$ -unabhängige Fourier-Koeffizient  $\delta_m^{(p)} = 1$  und somit auch die Fourier-Zerlegung (A.2) der Kamm-Funktion (A.1):

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n x} . \quad (\text{A.5})$$

Damit sind wir nun auch in der Lage, die diskrete Summe über jede an den ganzzahligen Stützstellen stetige Funktion  $f$  in einer etwas anderen Form zu schreiben:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m) f(x) . \quad (\text{A.6})$$

Nach Einsetzen der Umformung (A.5) und Vertauschung der Summe mit dem Integral erhalten wir

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} f(m) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{2\pi i n x} . \quad (\text{A.7})$$

Diese Beziehung stellt nun die gesuchte Poissonsche Summen-Formel dar, mit deren Hilfe wir duale Formen für bestimmte Reihen erhalten.

# Anhang B

## Robinsonsche Entwicklungs-Formeln

In diesem Abschnitt leiten wir die Regeln her, die im Kapitel 2 für Entwicklungen der polylogarithmischen Funktionen

$$\zeta_\nu(e^{-x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-nx}}{n^\nu} \quad (\text{B.1})$$

nach dem Kleinheits-Parameter  $x > 0$  notwendig sind. Dieses Problem stellt insofern kein triviales Problem dar, als dass die naive Entwicklung der Exponentialfunktion und die Vertauschung der beiden Reihen auf das Resultat

$$\zeta_\nu(e^{-x}) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{n^k}{n^\nu} \frac{(-x)^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(\nu - k) \quad (\text{B.2})$$

mit der Riemannschen Zeta-Funktion  $\zeta(\nu - k)$  aus (2.100) führt. Diese letzte Gleichung hat offensichtlich nur einen eingeschränkten Gültigkeitsbereich, denn für  $\nu < 1$  erwarten wir für sehr kleine  $x$ -Werte eine Divergenz auf der linken Seite, während die rechte Seite eine konvergente Reihe darstellt, vorausgesetzt die Riemannschen Zeta-Funktionen darin werden im analytisch-fortgesetzten Sinne verstanden. Für den Fall  $\nu = 1$  besitzt der Ausdruck auf der rechten Seite von (B.2) sogar eine explizite  $\zeta(1)$ -Singularität, welche durch die analytische Fortsetzung nicht zu beheben ist. Eine ähnliche Situation tritt bei allen positiven ganzzahligen Werten von  $\nu$  auf, auch wenn das nicht die Terme der führenden Ordnung in  $x$  betrifft. Bei einer genaueren Untersuchung findet man in der Tat für alle  $\nu$ -Werte eine Beziehung zwischen der polylogarithmischen Funktion (B.1) und den fortgesetzten Riemann-Funktionen, die sich aber für viele wichtige Spezialfälle von der naiven Version (B.2) unterscheidet. Um genau diese zuerst von Robinson hergeleitete Beziehung [53] geht es in der folgenden Diskussion.

Als Ausgangspunkt für weitere Ausführungen dient uns die so genannte Mellin-Transformation [161]. Die entsprechend transformierte Funktion ergibt sich aus

$$\mathcal{M}[f](s) \equiv \int_0^\infty dx f(x) x^{s-1} \quad (\text{B.3})$$

und lautet für den Spezialfall der polylogarithmischen Funktion

$$\mathcal{M}[\zeta_\nu](s) = \Gamma(s) \zeta(\nu + s) . \quad (\text{B.4})$$

Die ursprüngliche Funktion erhält man daraus nach der Rücktransformations-Vorschrift

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} ds \mathcal{M}[f](s) x^{-s} , \quad (\text{B.5})$$

wobei der Integrationsweg  $\mathcal{C}$  zuerst rechts von allen Polstellen parallel der imaginären Achse verläuft und dann die linke Halbebene im Uhrzeigersinn einschließt. Somit lautet die polylogarithmische Funktion

$$\zeta_{\nu}(e^{-x}) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} ds \Gamma(s) \zeta(\nu + s) x^{-s} . \quad (\text{B.6})$$

Die explizite Berechnung des Integrals beläuft sich auf die Auswertung der Residuen an den jeweiligen Polstellen des Integrandes. Im vorliegenden Fall gibt es einerseits eine Polstelle bei  $\nu + s = 1$ , die von der Riemannschen Zeta-Funktion herrührt und sich für kleine  $\epsilon$  als

$$\zeta(1 + \epsilon) = \frac{1}{\epsilon} + \gamma + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (\text{B.7})$$

spezifizieren lässt [162], wobei  $\gamma \approx 0.5772$  die Euler-Mascheroni-Konstante darstellt. Andererseits besitzen die Gamma-Funktionen in (B.6) ihre Polstellen bei allen nicht positiven ganzzahligen Werten und haben die Form [50, Kapitel 8]

$$\Gamma(-k + \epsilon) = \frac{(-1)^k}{k!} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \gamma + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n} + \mathcal{O}(\epsilon) \right\} . \quad (\text{B.8})$$

Beschränken wir uns nun zuerst auf den Fall  $\nu < 1$ , so befinden sich alle Polstellen der Gamma-Funktion links von der Polstelle  $s = 1 - \nu$  der Zeta-Funktion und somit sind alle Polstellen einfach. Das Problem (B.6) reduziert sich dabei auf

$$\zeta_{\nu}(e^{-x}) = \Gamma(1 - \nu) x^{\nu-1} \underset{s=1-\nu}{\text{Res}} \zeta(\nu + s) + \sum_{k=0}^{\infty} x^k \zeta(\nu - k) \underset{s=-k}{\text{Res}} \Gamma(s) . \quad (\text{B.9})$$

Das Residuum der Zeta-Funktion lässt sich unmittelbar aus (B.7) zu  $\text{Res}_{s=1-\nu} \zeta(\nu + s) = 1$  bestimmen. Die Residuen der Gamma-Funktionen ergeben sich aus (B.8) zu  $\text{Res}_{s=-k} \Gamma(s) = (-1)^k / k!$ . Somit erhalten wir die gesuchte Entwicklung der polylogarithmischen Funktion für den Fall  $\nu < 1$ :

$$\zeta_{\nu}(e^{-x}) = \Gamma(1 - \nu) x^{\nu-1} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(\nu - k) . \quad (\text{B.10})$$

Vergleicht man diese Beziehung mit der naiven Formel (B.2), so fällt einem die Ähnlichkeit auf, die aber aufgrund des ersten Zusatzterms unvollständig ist. Genau dieser Zusatzterm beschreibt in dem betreffenden Bereich die Divergenz der polylogarithmischen Funktion für kleine  $x$ -Werte.

Ein weiterer wichtiger Spezialfall tritt bei  $\nu = 1$  auf. Hierbei trifft die Polstelle der Zeta-Funktion  $s = 0$  die erste Polstelle der Gamma-Funktion, und wir haben einen Doppelpol vorliegen. Die polylogarithmische Funktion (B.6) kann auch für diesen Fall in Analogie zu (B.9) als

$$\zeta_1(e^{-x}) = \underset{s=0}{\text{Res}} \left[ \Gamma(s) \zeta(1 + s) x^s \right] + \sum_{k=1}^{\infty} x^k \zeta(1 - k) \underset{s=-k}{\text{Res}} \Gamma(s) \quad (\text{B.11})$$

ausgedrückt werden. Das Residuum an der doppelten Polstelle  $s = 0$  ist entsprechend der Gleichung [163, (3.4.8)]

$$\operatorname{Res}_{s=0} \left[ \Gamma(s) \zeta(1+s) x^{-s} \right] = \frac{\partial}{\partial s} \left[ s^2 \Gamma(s) \zeta(1+s) x^{-s} \right]_{s=0} \quad (\text{B.12})$$

auszuwerten. Mit den Entwicklungen (B.7) und (B.8) für  $\epsilon = s$  ergibt sich dieses Residuum zu

$$\operatorname{Res}_{s=0} \left[ \Gamma(s) \zeta(1+s) x^{-s} \right] = -\ln x . \quad (\text{B.13})$$

Die restlichen Polstellen bei  $s = -k$  sind einfach, und die Residuen liefern nach wie vor  $(-1)^k/k!$ , so dass sich aus (B.11) die endgültige Form

$$\zeta_1(e^{-x}) = -\ln x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(1-k) \quad (\text{B.14})$$

ergibt. Auch sie unterscheidet sich deutlich von (B.2) durch den ersten logarithmischen Term, der anstelle des  $x$ -unabhängigen  $k = 0$ -Summandes auftritt.

Für die weiteren wichtigen Fälle mit natürlichen Argumenten  $\nu = n \geq 2$  gibt es im Integranden von (B.6) immer doppelte Polstellen bei  $s = 1 - n$ . Die Integrale (B.6) werden dann in Analogie zum gerade betrachteten Fall  $\nu = 1$  ausgewertet und liefern z.B. für  $\nu = 2$

$$\zeta_2(e^{-x}) = \zeta(2) - x [1 - \ln x] + \sum_{k=2}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(2-k) \quad (\text{B.15})$$

und für  $\nu = 3$

$$\zeta_3(e^{-x}) = \zeta(3) - x \zeta(2) + \frac{x^2}{2} \left[ \frac{3}{2} - \ln x \right] + \sum_{k=3}^{\infty} \frac{(-x)^k}{k!} \zeta(3-k) . \quad (\text{B.16})$$

Die Gleichungen (B.14)–(B.16) und ihre Verallgemeinerungen für alle positiven ganzzahligen  $\nu$ -Werte setzen die Beziehung (B.10) auf den besagten Wertebereich fort. Für alle nicht ganzzahligen Werte von  $\nu$  kann (B.10) weiterhin direkt übernommen werden, weil sie ohne Beschränkung der Allgemeinheit überall dort gilt, wo nur einfache Polstellen des Integrands aus (B.6) vorliegen. Das gilt für  $\nu < 1$  immer und für  $\nu > 1$  fast überall bis auf die ganzzahligen Werte.



# Anhang C

## Numerische Auswertung der kanonischen Rekursion

In diesem Abschnitt beschreiben wir Probleme der praktischen Auswertung der Rekursionsbeziehung für kanonische Zustandssummen

$$Z_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Z_1(n\beta) Z_{N-n}^B(\beta) \quad (\text{C.1})$$

ausgehend von dem Rekursionsanfang  $Z_N^B(\beta) = 1$ . Die darin vorkommenden Ein-Teilchen-Zustandssummen  $Z_1(n\beta)$  stellen die Spektral-Summen aus (3.45)

$$Z_1(n\beta) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-n\beta E_{\mathbf{k}}} \quad (\text{C.2})$$

dar. Die Gleichung (C.1) war eines der Hauptergebnisse in den kanonischen Untersuchungen im Abschnitt 3.1 und ergab bosonische  $N$ -Teilchen-Zustandssummen, die zur Bestimmung der Grundzustandsbesetzung (3.81) und der Wärmekapazität (3.120) weiterverwendet wurden.

Zur Auswertung der Beziehung (C.1) für große Teilchenzahlen  $N$  hat sich das Computer-Algebra-Programm “Mathematica” als wenig hilfreich herausgestellt. Die in (C.1) vorkommenden Operationen beinhalten lediglich die trivialen Multiplikationen und Additionen der Zahlen, da es aber sehr viele solcher gibt, bedarf es großer Speicher-Kapazitäten und einer schnellen Ausführung der wenigen Rechen-Grundregeln. Gerade für solche Aufgabefelder scheinen z.B. die gewöhnlichen Computer-Programme prädestiniert zu sein. Doch bevor wir hier eine “C++”-Routine präsentieren, müssen wir die möglichen numerischen Fehlerquellen umgehen. Das ist das Hauptziel der weiteren Darstellung.

Für niedrige Temperaturen ( $\beta \rightarrow \infty$ ) spielt der energetische Grundzustand  $E_0$  für die Ein-Teilchen-Zustandssumme (C.2) die dominierende Rolle. Da dieser in quantenmechanisch exakten Rechnungen nicht verschwindet, resultieren daraus für genügend tiefe Temperaturen extrem kleine  $Z_1$ -Werte. Diese kleinen Zahlen potenzieren sich durch die Rekursion und stellen einen Computer vor unüberwindbare Probleme. Als konkretes Zahlenbeispiel betrachten wir das Problem im Kästenpotential aus Abschnitt 3.2.2, in dem sich eine relativ kleine Zahl  $N = 100$  von Teilchen bei

einer Temperatur von  $T = 0.01 T_c^{(0)}$  befindet. Die Zustandssumme ergibt sich in diesem Fall zu  $\sim e^{-2075}$ . Für  $N = 1000$  bei derselben relativen Temperatur erniedrigt sich dieser ohnehin extrem kleine Wert auf  $\sim e^{-4470}$ . Dennoch kann diese Schwierigkeit im Tieftemperatur-Bereich von vorn herein eliminiert werden, wenn man die reduzierten Zustandssummen

$$\tilde{Z}_1(n\beta) \equiv e^{n\beta E_G} Z_1(n\beta) \quad , \quad \tilde{Z}_N^B(\beta) \equiv e^{N\beta E_G} Z_N^B(\beta) \quad (C.3)$$

verwendet und statt der Rekursion (C.1) die analoge Beziehung

$$\tilde{Z}_N^B(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \tilde{Z}_1(n\beta) \tilde{Z}_{N-n}^B(\beta) \quad (C.4)$$

zwischen diesen reduzierten Größen ausgewertet. Der Unterschied zur ursprünglichen Version besteht hierbei darin, dass die Bausteine dieser Rekursion  $\tilde{Z}_1(n\beta)$  für verschwindende Temperaturen gegen eins konvergieren und somit nicht zum Problem der unhandlich niedrigen Werte für die Größe  $\tilde{Z}_N^B(\beta)$  führen. Die kanonische Grundzustandsbesetzung (3.81) ändert sich durch diese Umskalierung der Zustandssumme nicht, wenn man statt des Grundzustand-Beitrags (3.64) die reduzierte Größe

$$\tilde{\gamma}_n(\beta) \equiv e^{n\beta E_G} \gamma_n(\beta) = 1 \quad (C.5)$$

verwendet. Die Beziehung (3.81) reduziert sich dadurch auf die analoge Gleichung

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \frac{\tilde{Z}_{N-n}^B(\beta)}{\tilde{Z}_N^B(\beta)} \quad (C.6)$$

Die Wärmekapazität (3.120) wird durch die Umskalierung (C.3) nicht beeinflusst, weil sich der darin enthaltene Term  $T \ln Z_N^B$  von seinem reduzierten Gegenstück  $T \ln \tilde{Z}_N^B$  nur durch die Temperatur-unabhängige Grundzustands-Energie  $E_G$  unterscheidet. Durch die in (3.120) vorkommende zweifache  $T$ -Ableitung ändert sich dann durch einen konstanten Zusatzterm nichts.

Ein weiteres Problem tritt bei der numerischen Umsetzung der Rekursion (C.4) auf, wenn man in den Hochtemperatur-Bereich kommt. Dann gibt es nämlich in einem  $N$ -Teilchen-Ensemble  $N$  Ein-Teilchen-Zustandssummen  $Z_1(n\beta)$  von verschiedenen Größen. So stellt man generell fest, dass  $Z_1(n\beta)$  eine monoton abfallende Funktion der Zykluslänge  $n$  ist, was zum Ausdruck bringt, dass die kurzen Zyklen wahrscheinlicher sind als die langen. Die Beiträge mit unterschiedlichen Zykluslängen tauchen in der Rekursion in einer sehr gemischten Form auf und verursachen somit große Rechenfehler. Dieses Problem ist eher buchhalterischer Natur und wurde in Ref. [73] erfolgreich bewältigt. Die Lösung besteht in der Ausnutzung des multiplikativen Charakters einer Zustandssumme. Der Beitrag jedes zusätzlichen Teilchens wird nämlich mit dem Beitrag aller anderen bereits vorhandenen Teilchen multipliziert. Daher empfiehlt es sich, die komplette  $N$ -Teilchen-Zustandssumme entsprechend der Beziehung

$$\tilde{Z}_N^B(\beta) \equiv \prod_{k=1}^N \eta_k(\beta) \quad (C.7)$$



zu faktorisieren. Die einzelnen Faktoren erfüllen dann die Rekursions-Relation

$$\eta_k(\beta) = \frac{1}{k} \left\{ \tilde{Z}_1(\beta) + \sum_{m=2}^k \tilde{Z}_1(m\beta) \prod_{n=1}^{m-1} \frac{1}{\eta_{k-n}(\beta)} \right\}, \quad (\text{C.8})$$

die wir aus einer adäquaten Umschreibung von (C.4) erhalten. Diese Faktoren  $\eta_k$  sind alle größer als eins und fallen in etwa exponentiell schnell mit dem Parameter  $k$  ab.

Die Wärmekapazität (3.120) ergibt sich mit der Zerlegung (C.7) aus der Gleichung

$$C_N^B = k_B T \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left\{ T \sum_{k=1}^N \ln \eta_k(T) \right\}. \quad (\text{C.9})$$

Der Vorteil dieser Schreibweise gegenüber der ursprünglichen liegt auf der Hand. Da die Summe aus  $N$  Logarithmen viel genauer auszuwerten ist, als das Logarithmus eines  $N$ -fachen Produktes, für welches  $\tilde{Z}_N^B$  steht, zumal letzteres extrem groß sein kann. Die Grundzustand-Besetzung (C.6) schreibt sich nach der Zerlegung (C.7) als

$$\langle N_G \rangle_N^B = \sum_{n=1}^N \prod_{k=1}^n \frac{1}{\eta_{N+1-k}(\beta)}. \quad (\text{C.10})$$

Die ersten  $n$ -Summanden spielen in dieser Schreibweise die dominante Rolle, weil für die ansteigenden  $n$ 's die  $\eta$ -Faktoren mit immer niedrigeren Indizes im Nenner auftauchen und somit die entsprechenden Beiträge immer stärker unterdrücken. Die kompletten Viel-Teilchen-Zustandssummen müssen dabei nicht exakt bestimmt werden, wie das in der Original-Fassung (C.6) noch der Fall war. Genau aus diesem Grunde ist die Formulierung (C.10) gegenüber (C.6) vorzuziehen.

Des Weiteren präsentieren wir das konkrete Beispiel der Berechnung von der Grundzustand-Besetzung nach (C.10) für ein ideales Bose-Gas aus  $N$  Teilchen im Kastepotential (2.171). Die Spektral-Zerlegung der reduzierten Ein-Teilchen-Zustandssumme aus (C.2) mit (C.3) lautet für diesen Fall in Analogie zu (3.139)

$$\tilde{Z}_1(n/\tau) = \left\{ e^{-n\pi(m^2-1)/4\tau} \right\}^3 \quad (\text{C.11})$$

mit dem dimensionslosen Temperatur-Parameter aus (2.178) bzw. (3.117)

$$\tau \equiv \frac{MV^{2/3}}{2\pi\hbar^2\beta} = \left[ \frac{N}{\zeta(3/2)} \right]^{2/3} \frac{T}{T_c^{(0)}} \quad (\text{C.12})$$

im Tieftemperatur-Bereich einerseits. Andererseits lautet sie im Hochtemperatur-Bereich entsprechend der Dualitäts-Umformung (3.143)

$$\tilde{Z}_1(n/\tau) = e^{3n\pi/4\tau} \left\{ \sqrt{\frac{\tau}{n}} - \frac{1}{2} + 2 \sqrt{\frac{\tau}{n}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-4\tau\pi m^2/n} \right\}^3. \quad (\text{C.13})$$

Das Kriterium dafür, wann der Tieftemperatur-Bereich, wo die Reihe aus (C.11) schnell konvergiert, in den Hochtemperatur-Bereich übergeht, wo das die Reihe aus (C.13) tut, haben wir

bereits im Abschnitt 2.4.2 gefunden. Darin konnten wir aus Abb. 2.8 den Übergangswert mit  $0.2 < \tau/n < 0.5$  abschätzen und beschränken uns weiterhin z.B. auf  $\tau = 0.3n$ . Nach diesen Vorbemerkungen sind wir nun in der Lage, das Vorhaben in einem Computer-Programm umzusetzen, das in C-Code (mit C++-Ausgangsmodus) geschrieben ist.

Im Hauptprogramm werden die Werte der Grundzustands-Teilchenzahl in einem Ensemble aus beispielsweise  $N = 1000$  Teilchen für verschiedene Temperaturwerte  $t = T/T_c^{(0)} \in [0.01; 2.00]$  in die Ausgabe-Datei geschrieben. Ihre eigentliche Berechnung wird im Unterprogramm "Nkond" ausgeführt. Dabei bestimmen wir zuerst die Ein-Teilchen-Zustandssummen  $Z_1(n/\tau)$  für alle  $n = 1, 2, \dots, N$ , wobei wir für  $\tau < 0.3n$  nach der Gleichung (C.11) und sonst nach (C.13) vorgehen und die jeweiligen Reihen nach den ersten  $m \leq 5$  Summanden abbrechen. Im zweiten Teil des Unterprogramms berechnen wir die einzelnen Faktoren  $\eta_k$  für alle  $k = 1, 2, \dots, N$  nach (C.8) und im dritten Teil bestimmen wir aus ihnen schließlich die mittleren Teilchenzahlen im Grundzustand nach (C.10). Dieses nachfolgend dargestellte einfache Programm braucht auf den zurzeit handelsüblichen Rechner für die Auswertung mit  $N = 1000$  Teilchen etwa zwei Sekunden und mit  $N = 10000$  Teilchen etwa zwei Minuten. Die Resultate für Teilchenzahlen  $N = 10, 100$  und  $1000$  sind in Abb. 3.7 a) und b) zu sehen. Für Berechnungen weiterer Größen wie z.B. der Wärmekapazität aus Abb. 3.6 oder auch für Ergebnisse in anderen Potentialen aus dem gesamten Abschnitt 3.2 werden ähnliche Programme verwendet, die wir hier aber aus Platzgründen nicht vorstellen.

```

/*          PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER ANTEILE KONDENSIRTER TEILCHEN          */
/*          IM KANONISCHEN ENSEMBLE IM KASTENPOTENTIAL                          */
using namespace std;
#include<iostream>
#include<math.h>
#include<fstream>

ofstream mycout("Kond1000kast-mat.dat") ;                               //Ausgabe-Datei
const int N = 1000 ;                                                    //Teilchenzahl
const double eps = 0.01 ;                                               //Schrittweite
const double zeta = 2.61238 ;                                           //Zeta(3/2)
const double Pi = 3.14159 ;
const double c = pow(N/zeta,0.666667) ;                                  //Umrechnungsfaktor von t zu tau
/*~~~~~Hauptprogramm~~~~~*/
int main()
{ double t ;
  double Nkond(double) ;                                               //Definition des Unterprogramms
  /*~~~~~Ausgabe der Daten zum Kondensat-Anteil~~~~~*/
  mycout <<"{0.0,1.0}" ;
  for ( t = 0.01 ; t <= 2.00 ; t = t + eps )
    { mycout <<","<< t <<","<< Nkond(t)/N <<"}" ; } ;
  mycout <<"}" ;
}

```

```

/*~~~~~Unterprogramm zur Berechnung der Kondensat-Teilchenzahl~~~~~*/
double Nkond(double t)
{ int k,m ;
  double tau,fakt,expo,sum,prod,N0 ;
  double Z1[N+1],eta[N+1] ;
      /*~~~~~Werte der 1-Teilchen-Zustandssummen~~~~~*/
  tau = t*c ;
  for ( k = 1 ; k <= N ; k++ )
    { if (tau < 0.3*k)                                     //Tieftemperatur-Bereich
      { fakt = 0.0 ;
        for ( m = 1 ; m <= 5 ; m++ )
          { expo = 0.25*Pi*(m*m - 1)*k/tau ; fakt = fakt + exp(-expo) ; }
          Z1[k] = fakt*fakt*fakt ;
        }
      else                                               //Hochtemperatur-Bereich
        { sum = 0.0 ;
          for ( m = 1 ; m <= 5 ; m++ )
            { expo = 4.0*Pi*m*m*tau/k ; sum = sum + exp(-expo) ; }
            fakt = sqrt(tau/k)*(2*sum + 1) - 0.5 ;
            Z1[k] = exp(0.75*k*Pi/tau)*fakt*fakt*fakt ;
          }
        }
      /*~Werte der Faktoren eta zur N-Teilchen-Zustandssumme~*/
  for ( k = 1 ; k <= N ; k++ )
    { sum = 0.0 ; prod = 1.0 ;
      for ( m = 2 ; m <= k ; m++ )
        { prod = prod/eta[k+1-m] ; sum = sum + Z1[m]*prod ; }
      eta[k] = (Z1[1] + sum)/k ;
    }
      /*~~~~~Zahl der Kondensat-Teilchen~~~~~*/
  N0 = 0.0 ;
  prod = 1.0 ;
  for ( k = 1 ; k <= N ; k++ )
    { prod = prod/eta[N+1-k] ; N0 = N0 + prod ; }
  return N0 ;                                           //Ausgabe des Resultats ins Hauptprogramm
}

```

