

Numerische Integration der nichtlinearen Vlasov-Gleichung

Von G. KNORR

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München
(Z. Naturforsch. 16 a, 1320–1328 [1961]; eingegangen am 27. Juli 1961)

Herrn Professor WERNER HEISENBERG zum 60. Geburtstag gewidmet

The VLASOV equation, i. e. the BOLTZMANN equation without collision term, was numerically integrated as an initial value problem together with the second MAXWELL equation for a one-dimensional electron plasma with smeared-out ion background. The initial values were taken as a MAXWELLIAN distribution in velocity space and a cosine distribution in position, resulting in a sinusform for the electric field.

The LANDAU damping of the total energy of the electric field turned out to be valid for times larger than those given by a formal estimation of the validity of the linear solution. For still later times, the decay rate of the electric energy is less than that given by LANDAU damping.

The period of validity of LANDAU damping was computed by estimating the influence of the trapped particles. As a non-linear effect the first harmonic of the electric field builds up within this period. The growth of the first harmonic is faster for larger wave numbers k .

Seit im Jahre 1945 LANDAU¹ zeigte, daß eine longitudinale elektrische Welle in einem Plasma gedämpft ist, sind viele Arbeiten über dieses Thema² erschienen. Für allgemeine elektromagnetische Wellen mit einem homogenen Magnetfeld im Plasma wurde das Problem mittels LAPLACE- und FOURIER-Transformation von BERNSTEIN³ mit der Charakteristikenmethode von DRUMMOND⁴ und PFIRSCH⁵ behandelt. Allen diesen Arbeiten ist gemeinsam, daß sie die nichtlineare VLASOV-Gleichung linearisieren. BACKUS⁶ hat die Gültigkeit der linearen Näherung abgeschätzt und für einen speziellen Fall gezeigt, daß die lineare Näherung ungültig wird, bevor eine wesentliche Dämpfung eingetreten ist. Die Frage, ob die LANDAU-Dämpfung praktisch überhaupt eine Rolle spielt und wie das Verhalten der Lösung jenseits der Gültigkeitsgrenze der linearen Näherung aussieht, ist noch ungeklärt. Es wäre z. B. nicht ausgeschlossen, daß die Lösung in eine stationäre Lösung vom Typ KRUSKAL, BERNSTEIN und GREEN⁷ einmündet. Eine analytische Lösung, die über die erste Näherung hinausgeht, ist zumindest sehr schwierig. Es erscheint daher sinnvoll, die VLASOV-Gleichung in ihrem zeitlichen Verlauf numerisch zu lösen. Da es wegen des auch für schnelle Rechenmaschinen nicht unbeträchtlichen Zeitaufwandes und wegen des Verlustes an Genauigkeit nicht möglich ist, die Lösung für beliebige große Zeiten zu berechnen, muß

man sich allerdings von vornherein auf solche Parameter beschränken, die schon nach relativ kurzer Zeit ein Abweichen von der linearen Lösung erkennen lassen.

Grundgleichungen

Wir betrachten den einfachsten Fall eines Elektronenplasmas in einer Dimension. Da die Ionen im thermischen Gleichgewicht sich sehr viel langsamer bewegen als die Elektronen, nehmen wir sie als ruhend an und denken uns ihre Ladungen räumlich homogen verschmiert. Die Elektronen sollen sich lediglich unter der Wirkung des elektrischen Feldes, welches durch die anderen Elektronen und den Ionenhintergrund erzeugt wird, bewegen. Wenn das Gas hinreichend dünn ist, kann man das Stoßintegral in der BOLTZMANN-Gleichung vernachlässigen, und die Verteilungsfunktion des Plasmas wird durch die VLASOV-Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{e}{m} E(x, t) \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (1)$$

(e = Elementarladung, m = Elektronenmasse).

Das elektrische Feld $E(x, t)$ kann aus der POISSON-Gleichung berechnet werden:

$$\frac{\partial E}{\partial x} = 4\pi \rho = 4\pi e \left[n_0 - \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, v, t) dv \right] \quad (2)$$

¹ Engl. Übers. L. LANDAU, J. Phys. USSR 10, 25 [1946].

² N. G. VAN KAMPEN, Physica 21, 949 [1955].

³ I. B. BERNSTEIN, Phys. Rev. 109, 10 [1958].

⁴ J. E. DRUMMOND, Phys. Rev. 110, 293 [1958].

⁵ D. PFIRSCH u. L. BIERMANN, Z. Naturforsch. 15 a, 14 [1960], Anhang. — D. PFIRSCH, Mikroskopische Theorie der Plasma-

wellen; interner Bericht des M.P.I. für Physik und Astrophysik.

⁶ G. BACKUS, J. Math. Phys. 1, 178 [1960].

⁷ M. KRUSKAL, I. B. BERNSTEIN u. J. GREEN, Phys. Rev. 108, 546 [1957].



oder aus der zweiten MAXWELLSchen Gleichung:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -4\pi j = 4\pi e \int_{-\infty}^{+\infty} v f dv, \quad (3)$$

n_0 ist die mittlere Dichte der Ionen und Elektronen.

Um die Gleichungen dimensionslos zu machen, fassen wir jede Variable als Produkt eines dimensionsbehafteten Maßstabsfaktors (mit Index 0) und einer dimensionslosen Variablen (mit Querstrich) auf. Insbesondere haben wir:

$$t = t_0 \bar{t}; \quad x = x_0 \bar{x}; \quad v = v_0 \bar{v}; \quad E = E_0 \bar{E} \quad \text{usf.}$$

Wenn wir nun setzen:

$$v_0 = x_0/t_0; \quad f_0 = n_0/v_0; \quad E_0 = -4\pi e n_0 x_0,$$

so tritt in den Gleichungen nur noch t als Maßstabsfaktor auf. Wählen wir überdies

$$t_0^{-1} = \omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n_0/m}, \quad (4)$$

so erhalten wir die gewünschte Form in dimensionslosen Einheiten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{t}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{x}} + \bar{E}(\bar{x}, \bar{t}) \frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{v}} &= 0, \\ \frac{\partial \bar{E}}{\partial \bar{x}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f} d\bar{v} - 1, \quad \frac{\partial \bar{E}}{\partial \bar{t}} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{v} \bar{f} d\bar{v}. \end{aligned} \quad (6), (7)$$

Da wir im folgenden nur periodische Vorgänge der Periodizitätslänge $x_0 L$ betrachten, lautet das Normierungsintegral

$$\frac{1}{L} \int_0^L \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(\bar{x}, \bar{v}, \bar{t}) d\bar{v} d\bar{x} = 1. \quad (8)$$

Es ist praktisch, die mittlere thermische Geschwindigkeit als Maßstabsfaktor einzuführen. Die MAXWELL-Verteilung

$$f = \sqrt{\frac{m}{kT}} \frac{n_0}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(m/kT)v^2\right\}$$

wird dann einfach

$$\bar{f} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\bar{v}^2\right\}.$$

Der Maßstabsfaktor x_0 wird gleich der DEBYE-Länge

$$x_0 = v_0 t_0 = \sqrt{\kappa T/4\pi e^2 n_0}. \quad (9)$$

Der Energiesatz lautet in dimensionsloser Schreibweise

$$\bar{W} = \frac{W}{W_0} = \int_0^L \left[\bar{E}^2 + \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{v}^2 \bar{f} d\bar{v} \right] d\bar{x}$$

$$\text{mit} \quad W_0 = \frac{1}{2} n_0 m v_0^2 x_0 = E_0^2/8\pi.$$

Gln. (5) bis (7) haben eine Symmetrie-Eigenschaft: ist die Anfangsverteilung symmetrisch in \bar{x} und \bar{v} , so daß $\bar{f}(\bar{x}, \bar{v}, 0) = \bar{f}(-\bar{x}, -\bar{v}, 0)$, so gilt dies auch für alle anderen Zeiten. Fortan lassen wir aus Bequemlichkeit den Querstrich über allen Größen wieder weg.

Numerisches Verfahren

Die Lösung einer partiellen Diff.-Gl. erster Ordnung ist gleichwertig der Lösung des entsprechenden Systems der charakteristischen Differentialgleichungen. Diese sind hier die Gleichungen für die Teilchenbahnen:

$$dx/dt = v; \quad dv/dt = E(x, t). \quad (10)$$

Setzt man Gl. (10) in (5) ein, so erhält man: $Df/Dt = 0$, wobei D/Dt die Differentiation längs einer Charakteristik bedeutet. Das heißt, daß sich der Wert von f längs einer Charakteristik nicht ändert. In Abb. 1 sind als Beispiel die Projektionen der Charakteristiken in die $x-v$ -Ebene für eine sinusförmige Welle im Ruhesystem der Welle dargestellt.

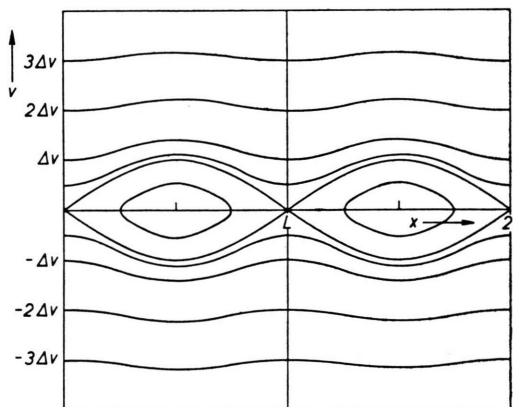


Abb. 1. Projektion von Charakteristiken der Gl. (7) auf die $x-v$ -Ebene für eine sinusförmige Welle des elektrischen Feldes im Ruhesystem der Welle.

Um die Verteilungsfunktion f numerisch darstellen zu können, breiten wir ein rechtwinkliges Netz über die $x-v$ -Ebene. Der Abstand zweier Punkte in x -Richtung betrage δx , in v -Richtung δv . Die Funktion f sei nun durch ihre Werte in den Netzknoten dargestellt.

Wenn die Werte von f zur Zeit t gegeben sind, so haben wir nur die Charakteristiken, die durch die

Netzkpunkte gehen, zu berechnen und die f -Werte entsprechend zu verschieben, um die Verteilung zu einem späteren Zeitpunkt $t + \Delta t$ zu berechnen.

Für den nun folgenden Zeitschritt werden zur Berechnung des elektrischen Feldes gewisse Integrale über v benötigt, deren Auswertung in dem i. allg. verzerrten Netz sehr schwierig sein würde. Andererseits würde auch eine vorherige Korrektur der Netzverzerrung umständlich sein und Interpolationsfehler bedingen. Dagegen ist es sehr viel einfacher, in der Zeit zurück zu rechnen. Man geht aus von einer Charakteristik, die zur Zeit $t + \Delta t$ durch einen Netzkpunkt geht, und folgt ihr, bis sie sich zur Zeit t irgendwo zwischen den Netzkpunkten befindet. Der Wert von f an dieser Stelle kann dann leicht durch Interpolation bestimmt werden.

Die Differenzengleichungen für die Charakteristiken sind gemäß (10)

$$\Delta x = \int_t^{t+\Delta t} v(\tau) d\tau, \quad \Delta v = \int_t^{t+\Delta t} E[x(\tau), \tau] d\tau. \quad (11)$$

Das elektrische Feld kann entweder über die Poisson-Gleichung

$$E(x, t) = \int_0^x dx \int_{-\infty}^{+\infty} f dv - x + E(0, t) \quad (12)$$

oder über die zweite MAXWELLSche Gleichung

$$E(x, t + \frac{1}{2}\Delta t) - E(x, t - \frac{1}{2}\Delta t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} v f(x, v, t) dv \Delta t \quad (13)$$

berechnet werden.

Die Poisson-Gleichung ist aber ungünstig: es müssen zwei Integrale ausgeführt werden. Schon durch die numerischen Ungenauigkeiten gibt es einen Verlust an Elektronen, der durch Renormalisierung der positiven Ladung kompensiert werden muß. Sonst würden sehr große elektrische Felder entstehen. Deshalb sollte der Vorfaktor von x in (12) nicht -1 , sondern

$$- \frac{1}{L} \int_0^L dx \int_{-\infty}^{+\infty} f dv$$

betragen. Wenn f zur Zeit t bekannt ist, erhalten wir aus (12) das Feld zur selben Zeit und berechnen aus (11) das f zur Zeit $t + \Delta t$, d. h. wir extrapolieren. Genauere Rechnung zeigt, daß der Fehler von Δv von der Größenordnung Δt wird. Um die von der Zeit abhängige Integrationskonstante in (12) zu bestimmen, muß man die Ladungen, die die Begrenzungslinie des Intervalls während eines Zeitschrittes

gekreuzt haben, zählen, d. h. die Änderung der Konstanten ist $(\partial E / \partial t)_{x=0} \Delta t$. (Nur bei symmetrischen Anfangsbedingungen kann man die Konstante durch $\int_0^L E(x, t) dx = 0$ bestimmen.)

Die MAXWELL-Gleichung ist wesentlich günstiger: Wie aus Gl. (13) ersichtlich, ist nur eine Integration erforderlich. Wenn $f(x, v, t)$ und $E(x, t - \frac{1}{2}\Delta t)$ gegeben sind, erhält man $E(x, t + \frac{1}{2}\Delta t)$, hieraus über (11) wieder $f(x, v, t + \Delta t)$ etc.

Wir erhalten also eine Interpolationsformel. Mit anderen Worten: die MAXWELLSche Gleichung liefert annähernd das mittlere Feld, welches auf ein Teilchen während seines Fluges wirkt; wie die weitere Rechnung zeigt, ist dieses Feld bis auf die Ordnung $(\Delta t)^2$ genau. Jedoch erfordert dieses Verfahren eine Anfangsiteration, da nur $f(x, v, 0)$ und $E(x, 0)$, nicht aber $E(x, \frac{1}{2}\Delta t)$ bekannt ist. Folgendes Schema erwies sich als rasch konvergent, ohne die Speicherung einer zweiten Matrix $f(x, v)$ in der elektronischen Rechenmaschine notwendig zu machen:

$$E_0 = \int_0^x \int f_0 dv - x,$$

$$f_{\frac{1}{4}} = f_0 \left(x - \int_0^{\frac{1}{4}\Delta t} v dt, v - \int_0^{\frac{1}{4}\Delta t} E_0 dt \right),$$

$$E_{\frac{1}{4}}^{(0)} = \int_0^x dx \int f_{\frac{1}{4}} dv - x,$$

$$f_{\frac{1}{2}}^{(1)} = f_0 \left(x - \int_0^{\frac{1}{2}\Delta t} v dt, v - \int_0^{\frac{1}{2}\Delta t} E_{\frac{1}{4}}^{(0)} dt \right),$$

$$E_{\frac{1}{2}}^{(n)} = \int_0^x dx \int f_{\frac{1}{2}}^{(n)} dv - x,$$

$$E_{\frac{1}{4}}^{(n+1)} = \frac{1}{2} (E_0 + E_{\frac{1}{2}}^{(n)}),$$

$$f_{\frac{1}{2}}^{(n)} = f_0 \left(x - \int_0^{\frac{1}{2}\Delta t} v dt, v - \int_0^{\frac{1}{2}\Delta t} E_{\frac{1}{4}}^{(n)} dt \right).$$

Der Übersichtlichkeit wegen ist die Zeit in Einheiten Δt als unterer Index geschrieben. Der obere Index $n = 0, 1, 2 \dots$ charakterisiert die n -te Iteration.

Es wird so lange iteriert, bis für alle x

$$\left| \frac{E_{\frac{1}{4}}^{(n+1)}(x_i) - E_{\frac{1}{4}}^{(n)}(x_i)}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_0^{N-1} [E_{\frac{1}{4}}^{(n)}(x_i)]^2}} \right| < \varepsilon \ll 1 \quad \text{wird.}$$

Dann liefert $E_{\frac{1}{2}} = \int_0^x dx \int f_{\frac{1}{2}} dv - x$ den gesuchten Anfangswert des Feldes.

Bezeichnen wir den Abstand zwischen zwei Netzknoten mit δx und δv in x - bzw. v -Richtung, so soll Δt stets so klein gehalten werden, daß

$$|\Delta v| \leq \delta v \quad \text{oder} \quad \Delta t \leq (\delta v / |E_{\max}|)$$

für alle Charakteristiken gilt. Eine ähnliche Bedingung für Δx würde $\Delta t \leq (\delta x / v_{\max})$ ergeben, was eine zu starke Einschränkung für Δt darstellt.

Die Charakteristiken werden deshalb schrittweise verfolgt. Bei jedem Schritt wird angenommen, das Teilchen fliege um δx weiter. Ist die zur Verfügung stehende Zeit Δt noch nicht aufgebraucht, so darf das Teilchen weiterfliegen, und zwar mit der Geschwindigkeit, die dem Teilchen gemäß seiner momentanen Lage in der $x-v$ -Ebene zukommt. Reicht die Zeit hingegen nicht mehr aus, um eine weitere Strecke δx zu durchfliegen, so wird der Endpunkt der Charakteristik durch lineare Mittelung berechnet. Die Gln. (11) werden also durch folgende Differenzgleichungen ersetzt:

$$\Delta x = \sum_i v_i (dt)_i, \quad \Delta v = \sum_i \bar{E}_i (dt)_i.$$

Hierbei bezeichnet $(dt)_i$ i. allg. die Zeit, die das Teilchen zum Durchfliegen des i -ten Intervalls benötigt. Seine Geschwindigkeit ist dann v_i und die Intervalllänge δx , also gilt $(\delta t)_i = \delta x / v_i$. Lediglich beim letzten Intervall, welches gewöhnlich nicht mehr in der ganzen Länge δx durchfliegen wird, ist $(\delta t)_i$ kleiner. $\Sigma (\delta t)_i$ ist die gesamte Flugzeit des Teilchens, und deshalb ist $\Sigma (\delta t)_i = \Delta t$. \bar{E}_i ist dementsprechend der Mittelwert eines Intervalls δx , i. allg. $\bar{E}_i = \frac{1}{2}(E_{i-1} + E_i)$, oder aber eines (nämlich des letzten) Teilintervalls.

JACKSON⁸ hat gezeigt, daß die LANDAU-Dämpfung durch die gefangenen Teilchen verursacht wird. Deshalb sollte der Abstand der Netzknoten längs der v -Richtung so klein sein, daß der Bereich der gefangenen Teilchen noch hinreichend genau dargestellt wird. Um diesen Bereich zu berechnen, gehen wir in das Ruhesystem der Welle, in dem der Energiesatz lautet:

$$\frac{1}{2} v^2 = \Phi_{\max} - \Phi,$$

wobei $\Phi = (E_{\max}/k) \cos kx$ das Potential der Welle bedeutet. Es folgt, daß alle Teilchen, deren Geschwindigkeitsbetrag kleiner ist als

$$\Delta v = 2 \sqrt{E_{\max}/k}, \quad (14)$$

gefangene Teilchen sind. Teilt man durch den Netz-

punktabstand δv , so erhält man in

$$M = \frac{2 \Delta v}{\delta v} = \frac{4 \sqrt{E_{\max} L/2\pi}}{\delta v}$$

ein Maß, durch wieviele Punkte der Bereich der gefangenen Teilchen dargestellt wird. Es sollte stets $M > 1$ sein. Daraus folgt, daß man bei der Anfangsverteilung

$$f(x, v, 0) = (1/\sqrt{2\pi}) e^{-\frac{1}{2} v^2} (1 + A \cos kx)$$

die Amplitude der Dichte A und damit E nicht zu klein machen darf.

Andererseits ist der im wesentlichen durch Interpolation entstehende Teilchenverlust proportional zu A .

Um die Interpolationsverluste wiederum klein zu halten, wurde nicht mit f selber, sondern mit $\ln f$, welches ebenfalls der VLASOV-Gleichung gehorcht, gerechnet. Man darf annehmen, daß f für große v immer wie $e^{-\frac{1}{2} v^2}$ abfällt. Wie eine leichte Rechnung zeigt, ist der relative Fehler bei linearer Interpolation von f

$$\frac{1}{2} \varepsilon (1 - \varepsilon) (\delta v)^2 (1 - v^2) + O[(\delta v)^3],$$

bei linearer Interpolation von $\ln f$

$$\frac{1}{2} \varepsilon (1 - \varepsilon) (\delta v)^2 + O[(\delta v)^4]$$

in f . Hierbei ist ε der relative Abstand von einem Netzknoten: $0 \leq \varepsilon = (v - v_j)/\delta v < 1$.

Man sieht, daß bei logarithmischer Interpolation der Fehler stets das gleiche Vorzeichen hat, er macht sich deshalb als ein für alle v gleichmäßiger Teilchenverlust bemerkbar. Bei linearer Interpolation bewirkt der Interpolationsfehler eine Abnahme der Teilchenzahl für $v < 1$ und eine Zunahme für $v > 1$, während der mit der Verteilungsfunktion über v gemittelte Fehler verschwindet. Dies entspricht einer Teilchendiffusion im Geschwindigkeitsraum; während wir bei logarithmischer Interpolation durch Berechnung des Teilchenverlustes eine Abschätzung für den Interpolationsfehler in v bekommen, ist dies für die lineare Interpolation nicht möglich. — Ein großer Vorteil wird die logarithmische Interpolation, wenn quadratisch interpoliert wird, denn dann wird die MAXWELL-Verteilung exakt wiedergegeben.

Während an den Rändern in x periodische Randbedingungen vorgeschrieben sind, muß am Rand von v irgendwie abgebrochen werden. Ein dadurch entstehender Fehler pflanzt sich bei jedem Zeitschritt um einen Netzabstand ins Innere fort, so daß dieser Fehler auf alle Fälle klein gehalten werden muß. Dies ist jedoch möglich, indem man den Bereich in v

⁸ J. D. JACKSON, J. Nucl. Energy, Part C 1, 171 [1960].

so weit erstreckt, daß die äußersten Werte von f nur noch von der Größe der Rundungsfehler der Maschine sind.

Es wurden zwei Randbedingungen verwendet. Die erste geht von der Annahme aus, daß für sehr große v die Geschwindigkeitsverteilung eine MAXWELLSche bleibt, daß aber die mittlere Geschwindigkeit v_m unter der Wirkung des elektrischen Feldes von 0 verschieden sein kann. Aus

$$\ln f(v) = C - \frac{1}{2}(v - v_{\text{mittel}})^2$$

folgt die Formel zur Bestimmung des Randwertes:

$$\ln f(v_m) = \ln f(v_{m-1}) + \frac{1}{2}(v_{m-1}^2 - v_m^2) + v_{\text{mittel}}(v_m - v_{m-1}),$$

v_{mittel} wird durch Integration erhalten.

Die andere Randbedingung hält die äußersten Werte konstant. Ein Probelauf mit den gleichen Parametern, aber verschiedenen Randbedingungen zeigte, daß alle 4-stellig ausgedruckten Werte des elektrischen Feldes, der Energie usw. für alle Zeiten die gleichen waren.

Resultate

Alle Rechnungen wurden auf der elektronischen Rechenmaschine „G 3“ des Institutes durchgeführt, die eine mittlere Rechengeschwindigkeit von ca. 6000 Operationen/sec und eine Speicherkapazität von 4096 Schnellspeichern besitzt. Entsprechend dieser Größe wurde mit einer $x-v$ -Matrix von 40×73 bzw. 20×145 Punkten gerechnet. Als Anfangsverteilung wurde stets

$$f(x, v, 0) = (1/\sqrt{2\pi}) e^{-\frac{1}{2}v^2} (1 + A \cos kx) \quad (15)$$

mit variablem k und A verwendet.

Außer dem elektrischen Feld und Querschnitten in v durch die Verteilungsfunktion wurden auch der Teilchenverlust, die Energie des elektrischen Feldes, die kinetische und die Gesamtenergie des Plasmas, der Gesamtimpuls und die Entropie ausgedruckt. Sowohl für die Gesamtenergie als auch für die Entropie gelten Erhaltungssätze. Letzteres zeigt man, indem man die VLASOV-Gleichung mit $\ln f$ multipliziert und über v und x integriert. Man erhält

$$S = - \int_0^{L+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f \ln f \, dx \, dv = \text{const.}$$

Bei den Rechnungen betrugen die relativen Verluste von Energie und Teilchen größenordnungs-mäßig 1% für die dimensionslose Zeit $t \sim 20$. Die

Entropie soll wegen des Teilchenverlustes ebenfalls abnehmen, wegen der durch die Verfahrensfehler verursachten „Unordnung“ jedoch zunehmen. In der Tat nahm die Entropie entweder zu oder doch wenigstens weniger stark ab als der Teilchenverlust. Eine Übersicht gibt die folgende Tab. 1.

L	6	12	24
t	21	18,2	19,8
$\Delta\Gamma/\Gamma$	-1,8	-3,8	-2,3%
$\Delta W/W$	-3,4	-5,6	-2,3%
$\Delta S/S$	-0,53	-1,36	+1,05%

Tab. 1. Der relative Teilchengewinn $\Delta\Gamma/\Gamma$, $\Gamma = \int_0^{L+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f \, dv \, dx$, der relative Gesamtenergiegewinn $\Delta W/W$ und der relative Entropiegewinn $\Delta S/S$ für verschiedene Wellenlängen L zur Zeit t .

Obwohl die Größe des Teilchen- und Energieverlustes des Plasmas durch die numerische Rechnung nicht zu groß erscheint, ist es doch wünschenswert, sie zu verkleinern. Denn bei der Integration der VLASOV-Gleichung interessiert man sich hauptsächlich für den Verlauf des elektrischen Feldes. Dessen Energie ist aber nur ein Bruchteil der kinetischen Energie des Plasmas. Schon nach kurzer Zeit ist deshalb der Energieverlust des Plasmas von der Größenordnung der elektrischen Feldenergie.

In die Änderung des Feldes geht jedoch wegen Gl. (7) nur der unsymmetrische Anteil der Verteilungsfunktion ein. Letztere besteht, wie man aus Abb. 4 entnehmen kann, aus einem homogenen, in v symmetrischen Anteil und einer kleinen Korrektur. Die Fehler, die durch Interpolation des homogenen Anteils entstehen, mitteln sich bei der Integration weitgehend wieder heraus, so daß nur die Fehler der Korrekturgröße sich auf das Feld auswirken.

In den zukünftigen Rechnungen wird, wie weiter unten angedeutet, durch eine etwas abgewandelte Methode die eben erwähnte Schwierigkeit vermieden. Der Gesamtimpuls sollte wegen der Symmetrie der Anfangsbedingungen stets verschwinden. Tatsächlich betrug er wegen der Rechenungenauigkeiten 10^{-6} bis 10^{-7} .

Eine Auswahl aus den numerischen Ergebnissen stellen die beigegebenen Abbildungen dar. In Abb. 2 a, b, c ist die Gesamtenergie des Feldes gegen t für $L=24, 12$ und 6 aufgetragen. Da wir es wegen der Symmetrie der Anfangsbedingung mit einer stehenden Welle zu tun haben, führt die Energie

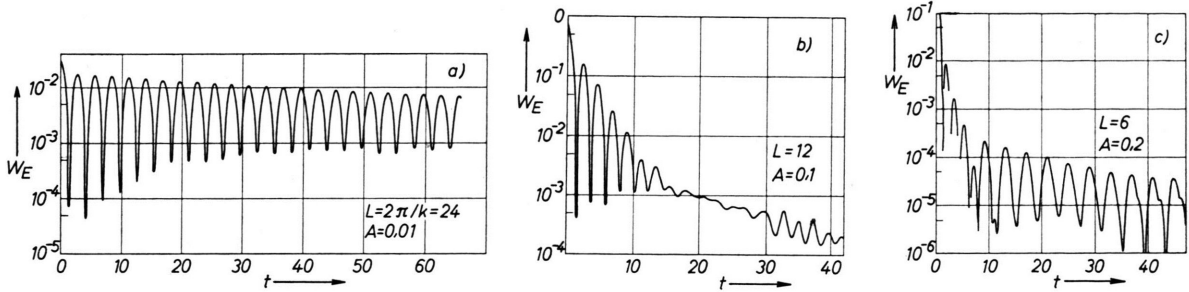
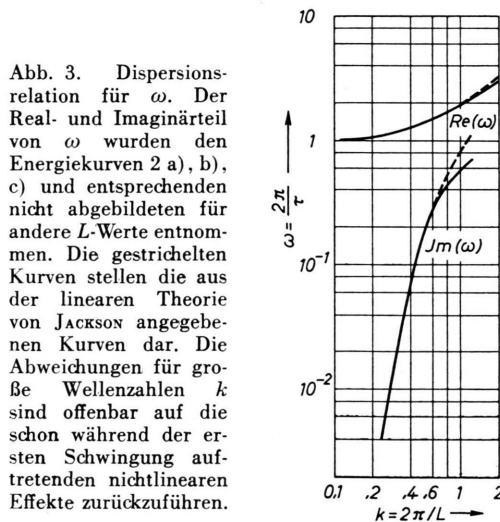


Abb. 2 a, b, c. Die Gesamtenergie des elektrischen Feldes (in willkürlichen Einheiten) in Abhängigkeit von der Zeit. Der Zeitschritt war in allen Fällen 0,2. Die Verlässlichkeit der Kurven in den ca. 20 letzten Zeiteinheiten dürfte durch Rechenfehler beeinträchtigt sein.

schnelle Schwingungen aus, die für großes L wenig, für kleines L stark gedämpft sind. Man kann aus solchen Kurven den Real- und Imaginärteil der Frequenz entnehmen. Das Ergebnis zeigt Abb. 3. Schon

$L = 6$ schon bald nichtlineare Effekte in den Energiekurven beobachten können, scheint sich das Plasma für $L = 24$ linear zu verhalten. Dies ist aber nur für die Gesamtenergie der Fall. Betrachtet man nämlich $E(x, t)$ zu verschiedenen Zeiten in Abhängigkeit von x (Abb. 4 a), so kann man deutlich ein immer stärkeres Auftreten der ersten Harmonischen beobachten. Noch sehr viel rascher erfolgt das Auftreten der Harmonischen für $L = 12$.

Unter der Annahme, daß nur die erste Oberwelle auftritt, kann man der Abb. 4 die Amplituden der



JACKSON hat die Abhängigkeit von Real- und Imaginärteil von ω , wobei der Imaginärteil gerade die LANDAU-Dämpfung darstellt, für beliebige Wellenzahlen k in der linearen Näherung berechnet. Die aus den numerischen Rechnungen erhaltenen Kurven fallen mit denen von JACKSON zusammen, bis auf kleine Abweichungen bei größerem k , die auf nichtlineare Effekte zurückzuführen sind.

Während in Abb. 2 a die Schwingungen sehr gleichmäßig exponentiell abnehmen, reicht der exponentielle Abfall bei $L = 12$ (Abb. 2 b) nur bis $t = 13,5$, bei $L = 6$ (Abb. 2 c) bis $t = 6$. Das Maximum bei $t = 7$ ist wesentlich kleiner als die anderen, und der Abfall nach $t = 7$ geht langsamer vonstatten als am Anfang. Während wir also für $L = 12$ und

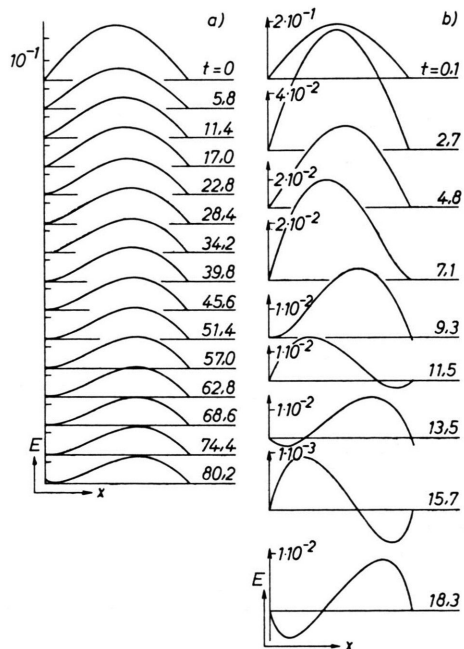


Abb. 4 a, b. Das elektrische Feld in Abhängigkeit von x mit f als Parameter. a): $L = 24$; b): $L = 12$. Es wurde wegen der Symmetrie nur die erste Halbwelle $x = 0$ bis $x = L/2$ gezeichnet. In Abb. 4 a) ist jedes zweite Maximum der Amplitude, in Abb. 4 b) jedes Maximum gezeichnet. Jede zweite Kurve in b) ist an der x -Achse gespiegelt.

Grund- und Oberwelle entnehmen, die in Abb. 5 a, b für $L=24$ und $L=12$ dargestellt sind. Während die Amplitude der Grundwelle im wesentlichen durch die LANDAU-Dämpfung bestimmt ist, wächst die Oberwelle zunächst linear mit der Zeit an, erreicht ein Maximum und nimmt dann wieder ab.

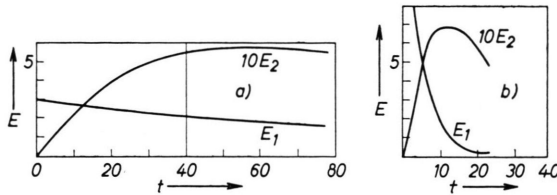


Abb. 5 a, b. Die Amplituden der Grundwelle E_1 und der ersten Oberwelle E_2 für den Fall a) $L=24$ und b) $L=12$, entnommen aus Abb. 4 a) und b).

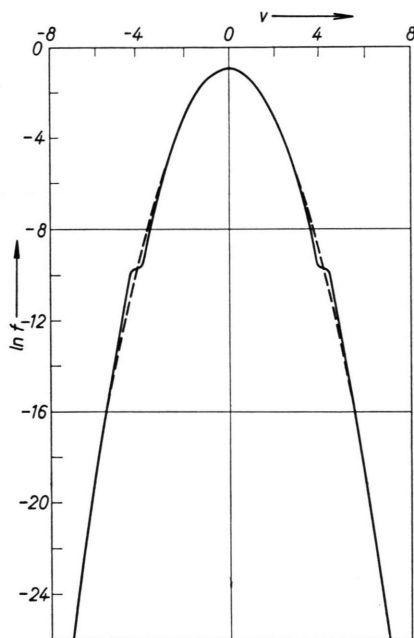


Abb. 6. Ein Querschnitt durch $\ln f(x, v, t)$ für $L=24$, $A=0,01$, $x=0$, gestrichelt für $t=0$, durchgezogen für $t=77,2$.

Abb. 6 gibt einen Querschnitt durch $\ln f$ in v -Richtung. Es ist im wesentlichen die Parabel der MAXWELL-Verteilung. Nur in der Umgebung der Phasengeschwindigkeit V_{ph} ist die Teilchenzahl mit $v > V_{ph}$ vermehrt, die mit $v < V_{ph}$ verringert. Während auch alle anderen Querschnitte in v für $L=24$ Abweichungen von der Parabelform nur für die gefangenen Teilchen ergeben, gibt es für kleinere L Abweichungen im ganzen Geschwindigkeitsbereich.

Abschätzung der Gültigkeit der linearen Näherung

Die referierten numerischen Ergebnisse werfen die Frage auf, wie lange die linearisierte Näherung Gültigkeit besitzt. Dies läßt sich formal leicht abschätzen, indem man die lineare Lösung in das vernachlässigte Glied einsetzt und dies mit den in der Rechnung berücksichtigten Gliedern vergleicht.

Die Linearisierung der Gl. (5) besteht darin, daß man $f(x, v, t)$ in einen homogenen Anteil $f_0(v)$ und einen kleinen inhomogenen Anteil $f_1(x, v, t)$ aufspaltet

$$f(x, v, t) = f_0(v) + f_1(x, v, t)$$

und in (5) das Glied $E(x, t) (\partial f_1 / \partial v)$ gegenüber $E(x, t) (\partial f_0 / \partial v)$ vernachlässigt. Dann muß sein:

$$\left| \frac{\partial f_1(x, v, t)}{\partial v} \right| \ll \left| \frac{\partial f_0(v)}{\partial v} \right|. \quad (16)$$

Die Lösung des linearisierten Problems ist:

$$f_1(x, v, t) = - \int_0^t \left(\frac{\partial f_0(v)}{\partial v} \right) E[x(\tau), \tau] d\tau + f_1 \text{ Anfang}(x - v t, v)$$

mit $x(\tau) = x - v(t - \tau)$.

Da nun $E(x, t)$ bekannt, nämlich eine gedämpfte Welle ist,

$$E(x, t) = E_0 \operatorname{Re} e^{i(\omega t - kx)},$$

wobei ω einen positiven Imaginärteil besitzt, kann man das Integral ausführen und erhält

$$f_1(x, v, t) = - \frac{\partial f_0}{\partial v} E_0 \operatorname{Re} \frac{1}{i(kv - \omega)} \cdot [e^{ik(vt - x)} - e^{i(\omega t - kx)}] + f_1 \text{ Anfang}(x - v t, v). \quad (17)$$

Der zweite Term in der Klammer ist gedämpft und kann gegenüber dem ersten vernachlässigt werden. Auch $f_1 \text{ Anfang}$ soll vernachlässigt werden, da es von den speziellen Anfangsbedingungen abhängig ist und i. allg. nicht stärker ins Gewicht fällt als der berücksichtigte Term. Man setzt (17) in (16) ein und wählt den ungünstigsten Fall $v = V_{ph}$; dann nimmt nämlich der Nenner von (17) sein Minimum an. Man erhält so eine Abschätzung, wie lange die lineare Näherung höchstens gültig ist:

$$t_1 < \operatorname{Im}(\omega) / k E_0. \quad (18)$$

Mit der Anfangsverteilung (15) geht dies über in

$$t_1 < \operatorname{Im}(\omega) / A. \quad (19)$$

Dieses Resultat ist ähnlich dem von BACKUS⁶ abge-

leiteten. Jedoch ergeben sich viel zu kleine Zeiten für die Gültigkeit der Näherung, wenn man die Gesamtenergie des elektrischen Feldes betrachtet, besonders für Schwingungen mit kleiner LANDAU-Dämpfung. In den gerechneten Beispielen ist t_1 nie länger als eine Schwingungsdauer. Die Gültigkeitsdauer der linearen Näherung ist also de facto größer als (18), insbesondere ist sie auch bei den gerechneten Beispielen unabhängig von A , wenn nur A hinreichend klein ist.

In der Ableitung von (18) wurden durch die Wahl des kleinsten Nenners die Teilchen mit $v = V_{ph}$ ganz wesentlich benutzt. Es wurde aber keine Rücksicht darauf genommen, welche Rolle diese Teilchen im Plasma als Ganzes spielen. Ist ihre Energie, verglichen mit der Feldenergie, klein, so ist ihre Rolle relativ unwichtig und man kann erwarten, daß die lineare Näherung viel länger gilt als nach (18). Nehmen wir an, daß jedes gefangene Teilchen bei einer Schwingung im Potentialtopf einen Betrag der Feldenergie, der seiner eigenen kinetischen Energie entspricht, der linearen Näherung entzieht, so ist ab

$$t_2 \approx \frac{1}{2} (W_E/W_T) (1/\omega_{osc}) \quad (20)$$

das Geschehen durch nichtlineare Vorgänge bestimmt, solange $W_E/W_T > 1$. Dabei ist W_E die Feldenergie, W_T die Teilchenenergie im Ruhesystem der Welle, ω_{osc} die Oszillationsfrequenz eines Teilchens im Potentialtopf der Welle. Bei einer Sinuswelle ist

$$W_E = E_0^2/4. \quad (21)$$

Ferner ist

$$W_T = \frac{1}{2} \int_{v_{ph} - \Delta v}^{v_{ph} + \Delta v} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} v^2} v^2 dv = \frac{1}{3 \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} v_{ph}^2} (\Delta v)^3 \\ = \frac{3 \sqrt{2\pi}}{32} e^{-\frac{1}{2} v_{ph}^2} E_0^{\frac{3}{2}} k^{-\frac{3}{2}} \quad (22)$$

unter Benutzung von (14). ω_{osc} ergibt sich aus der Kraft $-E_0 \sin kx \sim -E_0 kx$, die auf das Teilchen wirkt, zu

$$\omega_{osc} \approx \sqrt{E_0} k. \quad (23)$$

Setzt man (21), (22), (23) in (20) ein, so erhält man

$$t_2 = \frac{3 \pi^2 \sqrt{2\pi}}{16} \frac{1}{L} e^{\frac{1}{2} v_{ph}^2}. \quad (24)$$

Diese Abschätzung ist unabhängig von A . In der Tat sind auch die numerischen Ergebnisse davon unabhängig. In Tab. 2 sind für einige L -Werte diese Zeiten, zusammen mit der Schwingungsdauer und der Phasengeschwindigkeit, aufgetragen.

L	6	12	18	24
τ	3,2	4,32	5,19	5,7
v_{ph}	1,88	2,78	3,48	4,22
W_E/W_T	84 \sqrt{A}	3,67 \sqrt{A}	25 \sqrt{A}	275 \sqrt{A}
t_2	2,64	11,5	18,5	865

Tab. 2.

Für $L = 18$ und $L = 24$ sind die mit der Maschine gerechneten Zeiten kleiner als t_2 in der Tab. 2. Für $L = 12$ ist $t_2 = 11,5$ und dies ist auch gerade die Zeit, wo die regelmäßigen Schwingungen aufgehört haben und die Dämpfung nicht mehr so stark wie anfänglich ist. Für $L = 6$ ist das Maximum bei $t = 7$ (Abb. 2 c) kleiner als die anderen, was als Zeichen dafür zu werten ist, daß hier der nichtlineare Einfluß schon ganz erheblich geworden ist. In diesem Fall ist auch $W_E/W_T < 1$ und man erwartet, daß die lineare Näherung nach der Zeit $\sim 1/\omega_{osc}$ aufhört, richtig zu sein.

Zusammenfassend kann man sagen, daß die bisherigen numerischen Ergebnisse gezeigt haben, daß die exponentielle Abnahme der Feldenergie während eines längeren Zeitraumes durch die lineare Näherung wiedergegeben wird, als man nach der formalen Abschätzung (18) vermuten konnte. Die physikalische Abschätzung (20) bzw. (24) führt auf längere Zeiten, die durch die Rechnungen, soweit sie vorliegen, wiedergegeben werden. Innerhalb dieser Zeit bilden sich jedoch schon nichtlineare Erscheinungen wie die Anregung der ersten Oberwelle aus. Diese sind jedoch nicht so stark, daß sie das exponentielle Abklingen der Feldenergie wesentlich beeinträchtigen.

In weiteren Untersuchungen soll eine einfache, sich fortpflanzende Welle untersucht werden. Wie schon oben angedeutet wurde, ist es zweckmäßig, nicht die Verteilungsfunktion als Ganzes numerisch zu berechnen, sondern sie genau so wie bei der analytischen linearen Näherung in eine in v homogene Verteilung f_0 und eine kleine Störung f_1 aufzuspalten. Dadurch wird erreicht, daß die Interpolationsfehler um den Faktor f_1/f_0 kleiner werden. Längs einer Charakteristik ist f_1 dann nicht mehr konstant, sondern es gilt:

$$\frac{Df_1}{Dt} = -E(x, t) \frac{\partial f_0}{\partial v}.$$

Ferner ist geplant, die Verteilungsfunktion durch

ein dichteres Punktnetz darzustellen. Schließlich sollen die linearen Interpolationsformeln durch bessere ersetzt werden, soweit das mit der numerischen Stabilität des Rechenverfahrens verträglich ist. Im weiteren Verlauf sollen schließlich noch weitere Pro-

bleme, wie z. B. die Zweistrominstabilität und die Größe ihrer Amplitude gerechnet werden.

Herrn Dr. K. HAIN und insbesondere Herrn Dr. D. PFIRSCH danke ich für zahlreiche anregende Diskussionen.

Der Einfluß der Überlappung in der Theorie der π -Elektronensysteme von HÜCKEL und HARTMANN

Von W. A. BINGEL, H. PREUSS und H.-H. SCHMIDTKE *

Aus dem Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München
(Z. Naturforschg. 16 a, 1328—1333 [1961]; eingegangen am 4. Juli 1961)

Herrn Professor WERNER HEISENBERG zum 60. Geburtstag gewidmet

The simple MO—LCAO-method for alternant π -electron systems has been extended recently to include higher p π -orbitals. In this version of the MO-method- the pairing property between the energies and wave functions of the bonding and antibonding π -MO's is no longer correct, the level spacing of the antibonding MO's is now smaller than that of the bonding ones. This effect has been used to explain ¹ the approximate constancy of the difference: 1st excitation energy—1st ionisation potential for a great number of molecules, which was observed by SCHEIBE ². In the present work the influence of atomic overlap on the extended MO-theory is investigated.

Kürzlich hat HARTMANN¹ eine Erweiterung des sogenannten zweiten HÜCKELschen Näherungsverfahrens (Methode der Molekülzustände)³ zur Berechnung von π -Elektronensystemen bei Molekülen diskutiert. Die neue Fassung der Methode, die im wesentlichen darin besteht, daß höher angeregte Atomzustände ($3p_z$, $4p_z$...) bei der Aufstellung der Molekülfunktionen mitberücksichtigt werden, erklärt eine grundlegende Eigenschaft von Molekülen mit π -Elektronensystemen, die mit der alten Methode nicht erhalten wurde¹. Es erscheint uns daher notwendig, näher zu untersuchen, welchen Einfluß eine Reihe von Vernachlässigungen haben, die in dieser Methode enthalten sind, und ob in dem neuen Rahmen ein Verfahren entwickelt werden kann, das bei seiner Anwendung auf solche Moleküle Ergebnisse liefert, die in quantitativer Übereinstimmung mit der Erfahrung sind.

Eine wesentliche Vernachlässigung, die hier diskutiert werden soll und die schon in der ursprünglichen Form des zweiten Näherungsverfahrens ent-

halten war, ist die Nichtberücksichtigung der Überlappung der Atomfunktionen.

Bekanntlich betrachtet die Methode der Molekülzustände (MO) ein herausgegriffenes π -Elektron des jeweiligen Moleküls wechselwirkungsfrei in einem effektiven Potentialfeld U , welches vom Molekülgerüst (Atomrümpfe und σ -Elektronen) und von den übrigen π -Elektronen erzeugt wird. Die Einelektronenmolekülfunktion Φ der entsprechenden SCHRÖDINGER-Gleichung

$$H \Phi = (-\frac{1}{2} \Delta + U) \Phi = E \Phi \quad (1)$$

wird näherungsweise durch eine lineare Kombination von Atomfunktionen ψ_μ dargestellt (MO—LCAO-Methode)

$$\Phi_i = \sum_{\mu} c_{\mu i} \psi_{\mu}, \quad (2)$$

wobei die Koeffizienten aus

$$E = \min \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (3)$$

* Jetzt bei Cyanamid European Research Institute, Cologne, Genf.

¹ H. HARTMANN, Z. Naturforschg. 15 a, 993 [1960].

² G. SCHEIBE u. D. BRÜCK, Z. Elektrochem. 54, 403 [1950]; Chem. Ber. 85, 867 [1952]; G. SCHEIBE, I. KERN u. F. DÖRR, Z. Elektrochem. 63, 117 [1959].

³ E. HÜCKEL, Z. Phys. 60, 423 [1930]; 70, 204 [1931]; 72, 310 [1932]; 76, 628 [1932]; Grundzüge der Theorie der ungesättigten und aromatischen Verbindungen, Springer-Verlag, Berlin 1938.