

Stabilität von Vielteilchensystemen bei äußeren Störungen:

II. Störung durch Potentialfelder

RICHARD LENK

Institut für Physik der Technischen Hochschule Karl-Marx-Stadt

(Z. Naturforschg. **21 a**, 1562—1576 [1966] ; eingegangen am 1. April 1966)

Inequalities derived in an earlier paper are investigated for extended one-component systems perturbed by longitudinal fields. A new sum rule first derived by PUFF plays a central role. For interactions with finite range the frequencies of elementary excitations related to density oscillations must go to zero with the wave number. There are two lower bounds for density fluctuations, one for thermal and the other for quantum fluctuations.

In a plasma with homogeneous background the long range of the interactions suppresses fluctuations of particle number. The new sum rule is modified in such a way that plasma oscillations (with finite frequency for zero wave number) become possible in accordance with the stability conditions. Lower bounds for the range of pair correlations in a plasma are derived. They give the exact ranges for the classical and the ground state plasma. For low temperatures and densities the pair distribution function must show strong oscillations.

In der Arbeit¹ des Verfassers, auf die im folgenden in der Form I verwiesen wird, wurden aus dem dissipativen Verhalten des Systems bei äußeren Störungen allgemeine Momenten-Ungleichungen abgeleitet. Diese werden nun in der hier vorliegenden Arbeit auf rein longitudinale Störungen, also auf Störungen durch longitudinale Potentialfelder, angewendet. Dabei beschränken wir uns auf Systeme, die aus gleichen Teilchen aufgebaut sind und Translationssymmetrie besitzen. Kristalle werden also ausgeschlossen.

In Abschnitt I werden die grundlegenden Begriffsbildungen zum Problemkreis des Fluktuations-Dissipations-Theorems (FDT), die bereits in¹ zusammengestellt worden sind, auf den vorliegenden Spezialfall übertragen. Insbesondere werden die longitudinale Polarisierbarkeit und die Korrelationsfunktion der Dichteschwankungen definiert.

In Abschnitt 2 werden kurz die bekannten Zusammenhänge referiert, die zwischen den Amplitudenquadraten der Dichteschwankungen, der Paarverteilung und der isothermen Kompressibilität des Systems bestehen. Alle diese Größen können entweder direkt oder über das FDT aus der longitudinalen Polarisierbarkeit bzw. Dielektrizitätskonstante berechnet werden. Auf die Vorteile einer solchen „dielektrischen Formulierung“ des Vielteilchenproblems wurde zuerst von NOZIÈRES und PINES² hingewiesen, die diese Methode für Systeme im

Grundzustand formulierten und auf das Elektronengas anwandten.

In Abschnitt 3 werden die Momente ausgewertet, soweit das einfach möglich ist. Von Bedeutung sind: Das Amplitudenquadrat der Dichteschwankungen, das erste und dritte Moment vom Imaginärteil der Polarisierbarkeit. Für das erste Moment gilt die seit langem bekannte f -Summenregel der Oszillatorstärken. Für das dritte gilt eine neue Summenregel, die erstmals 1965 von PUFF³ betrachtet wurde. Sie ist für die hier entwickelte Theorie von zentraler Bedeutung. Im Gegensatz zur f -Summenregel hängt sie von den Wechselwirkungen im System ab.

Das Plasma mit homogenem Untergrund (echte Zweikomponentensysteme werden hier nicht untersucht) erfordert wegen der anomalen Reichweite der COULOMB-Wechselwirkung eine besondere Behandlung. Dabei zeigt sich in Abschnitt 4, daß der festgehaltene Untergrund in Verbindung mit der langreichweitigen Wechselwirkung die Teilchenschwankungen auf eine Oberflächenschicht des betrachteten Teilvolumens beschränkt. Bei diesen anomal kleinen Teilchenschwankungen gilt der übliche Zusammenhang zwischen Paarverteilung und Kompressibilität nicht mehr. — In der wechselwirkungsabhängigen Summenregel tritt als Folge der großen Reichweite der Wechselwirkung eine Divergenz bei großen Wellenlängen auf.

¹ R. LENK, Z. Naturforschg. **21 a**, 1556 [1966].

² Ph. NOZIÈRES u. D. PINES, Nuovo Cim. **9**, 470 [1958]; Phys. Rev. **113**, 1254 [1959].

³ R. D. PUFF, Phys. Rev. **137**, A 406 [1965].



Abschnitt 5 bringt die Anwendung der Momentenungleichungen auf den Grenzfall großer Wellenlängen. In Abschnitt 6 werden für den allgemeinen Fall zwei untere Grenzen für die Amplitudenquadrate der Dichteschwankungen hergeleitet. In beiden Abschnitten zeigt sich die Sonderstellung der Plasmen.

Am Ende der Arbeit sind die wesentlichen Ergebnisse dieser Überlegungen zusammengestellt.

1. Polarisierbarkeit und Dichterauschen

Es werden nur ausgedehnte Systeme betrachtet, die aus gleichen Teilchen aufgebaut sind und Translationssymmetrie besitzen. Kristalle sind also ausgeschlossen. Auf ein solches System wirke ein skalares Störpotential, das durch einen Zusatzterm

$$\int d\tau V(\mathbf{r}, t) \hat{Q}(\mathbf{r}) = \frac{1}{U} \sum_{\mathbf{f}} V_{\mathbf{f}}(t) Q_{-\mathbf{f}} \quad (1)$$

im HAMILTON-Operator beschrieben werden kann. Das zugehörige Kraftfeld ist als Gradient des Potentials wirbelfrei. Dieser Fall ist beim longitudinalen Anteil eines äußeren elektrischen Feldes verwirklicht. U ist das Normierungsvolumen. \hat{Q} ist der Operator der Einteilchendichte. Weiter ist

$$V_{\mathbf{f}}(t) = \int d\tau e^{-i\mathbf{f}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}, t), \quad Q_{\mathbf{f}} = \int d\tau e^{-i\mathbf{f}\cdot\mathbf{r}} \hat{Q}(\mathbf{r}). \quad (2)$$

Die FOURIER-Komponenten des Dichteoperators

$$Q_{\mathbf{f}} = Q_{-\mathbf{f}}^\dagger \quad (3)$$

sind nicht hermitisch. Das führt zu einigen Komplikationen gegenüber der in I behandelten Theorie, die hier dargestellt werden sollen. In Übereinstimmung mit den in I gewählten Vorzeichen wird die longitudinale Polarisierbarkeit durch

$$\overline{Q_{\mathbf{f}}}(\omega) = -\alpha_{\mathbf{f}}(\omega) V_{\mathbf{f}}(\omega)/U \quad (4)$$

definiert. Es gelten die Relationen

$$V_{\mathbf{f}}^*(\omega) = V_{-\mathbf{f}}(-\omega), \quad \alpha_{\mathbf{f}}^*(\omega) = \alpha_{-\mathbf{f}}(-\omega). \quad (5)$$

Falls das System räumliche Spiegelsymmetrie besitzt, so gilt

$$\alpha_{\mathbf{f}} = \alpha_{-\mathbf{f}}, \quad \alpha_{\mathbf{f}}^*(\omega) = \alpha_{\mathbf{f}}(-\omega). \quad (6)$$

$\alpha_{\mathbf{f}}(\omega)$ hat dann für jeden Wert von \mathbf{f} die in I benutzten Symmetrieeigenschaften. Da die gesamte Theorie ohnehin nur für translationssymmetrische Systeme formuliert wird, kann die zusätzliche Voraussetzung der Spiegelsymmetrie ohne Schaden gemacht werden, da die auftretenden translationssymmetrischen Systeme stets auch Spiegelsymmetrie

zeigen. Der Wellenzahlvektor \mathbf{f} ist dann lediglich ein zusätzlicher Index, und die Überlegungen von I können ohne Schwierigkeiten übertragen werden. Für den Imaginärteil von $\alpha_{\mathbf{f}}$ ergibt sich

$$\hbar \alpha_{\mathbf{f}}'' = \int dt e^{i\omega t} \langle \frac{1}{2} [Q_{\mathbf{f}}(t), Q_{-\mathbf{f}}(0)] \rangle, \quad (7)$$

und zwar ohne Benutzung der Spiegelsymmetrie. Das induzierte Potential

$$V_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) = \int d\tau' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') Q_{\text{ind}}(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

besitzt die FOURIER-Komponenten

$$\mathbf{f} \neq 0: \quad V_{\text{ind}}(\mathbf{f}, \omega) = v(\mathbf{f}) \overline{Q_{\mathbf{f}}}(\omega) \\ \equiv [\varepsilon^{-1}(\omega) - 1] V_{\mathbf{f}}(\omega). \quad (9)$$

U ist das Wechselwirkungspotential zwischen den Teilchen. ε^{-1} ist die reziproke Dielektrizitätskonstante, die durch das zweite Gleichheitszeichen in (9) definiert wird. Wegen der Erhaltung der Teilchenzahl hat Q_{ind} und damit auch V_{ind} keine von Null verschiedene FOURIER-Komponente zu $\mathbf{f} = 0$. Aus dem Vergleich von (4) und (9) folgt

$$\varepsilon_{\mathbf{f}}^{-1} - 1 = -v(\mathbf{f}) \alpha_{\mathbf{f}}/U \quad (10)$$

für den Zusammenhang zwischen $\alpha_{\mathbf{f}}$ und der Dielektrizitätskonstante. $\alpha_{\mathbf{f}}$ ist offenbar zur Größe des Systems proportional.

Die Korrelationsfunktion der Dichteschwankungen wird durch

$$\Phi_{\mathbf{f}}(t) = \langle \frac{1}{2} [Q_{\mathbf{f}}(t), Q_{-\mathbf{f}}(0)] \rangle_+ \quad (11)$$

definiert. Die Plusvertauschung in (11) ist zwar kein hermitischer Operator, doch ist der Erwartungswert für Systeme mit Spiegelsymmetrie reell. Aus der Symmetrie gegenüber Zeittranslation, vgl. [I (1.10)], folgt (ohne Benutzung der Spiegelsymmetrie)

$$\Phi_{\mathbf{f}}(t) = \langle \frac{1}{2} [Q_{\mathbf{f}}(0), Q_{-\mathbf{f}}(-t)] \rangle_+ = \Phi_{-\mathbf{f}}(-t), \quad (12)$$

$$\Phi_{\mathbf{f}}^*(t) = \langle \frac{1}{2} [Q_{\mathbf{f}}(0), Q_{-\mathbf{f}}(t)] \rangle_+ = \Phi_{-\mathbf{f}}(t).$$

$\Phi_{\mathbf{f}}(\omega)$ hat daher die Eigenschaften

$$\Phi_{\mathbf{f}}(\omega) = \Phi_{-\mathbf{f}}(-\omega), \quad \Phi_{\mathbf{f}}^*(\omega) = \Phi_{\mathbf{f}}(\omega). \quad (13)$$

Das FDT [I (1.13)] gilt unverändert mit \mathbf{f} als zusätzlichem Index. Das Frequenzintegral

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \Phi_{\mathbf{f}}(\omega) = \langle Q_{\mathbf{f}} Q_{-\mathbf{f}} \rangle = \langle Q_{\mathbf{f}}^\dagger Q_{\mathbf{f}} \rangle \quad (14)$$

liefert das Amplitudenquadrat der Dichteschwankungen mit Wellenzahl \mathbf{f} .

2. Paarverteilung und Kompressibilität

Das am Ende des vorigen Abschnitts betrachtete Amplitudenquadrat $\langle \varrho_t^\dagger \varrho_t \rangle$ steht in engem Zusammenhang mit der Paarverteilung ϱ_2 . Denn aus

$$\begin{aligned} \langle \hat{\varrho}(\mathbf{r}_1) \hat{\varrho}(\mathbf{r}_2) \rangle &= \varrho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \varrho \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \\ \varrho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \varrho_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \equiv \varrho_2(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1)$$

(vgl. ⁴, § 115), folgt durch FOURIER-Transformation hinsichtlich der Relativkoordinate \mathbf{r}

$$(1/N) \langle \varrho_t^\dagger \varrho_{-t} \rangle = 1 + \varrho_2(\mathbf{f})/\varrho \quad (2)$$

Für ein System mit schwankender Teilchenzahl (Teilvolumen \mathcal{U}) ist N die mittlere Teilchenzahl in \mathcal{U} . $\varrho_2(\mathbf{f})$ ist die FOURIER-Transformierte bezüglich der Relativkoordinate \mathbf{r} , von der ϱ_2 bei der vorausgesetzten Translationssymmetrie allein abhängt. Aus (2) ist zu sehen, daß $\langle \varrho_t^\dagger \varrho_{-t} \rangle$ zur Teilchenzahl N proportional ist. Eine Ausnahme bildet der Fall $k=0$, für den

$$\begin{aligned} \varrho_{k=0} &= \int d\mathbf{r} \hat{\varrho} \equiv \hat{N}, \quad N = \langle \hat{N} \rangle, \\ \mathcal{U} \varrho_2(k=0) &= \langle \hat{N}^2 \rangle - N \end{aligned} \quad (3)$$

gilt. Dieses anomale, wenn auch triviale Verhalten von $\varrho_2(\mathbf{f})$ für $k=0$ ist eine unmittelbare Folge davon, daß $\varrho_2(\mathbf{r})$ für $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ nicht verschwindet. Der asymptotisch konstante Anteil trägt für $k \neq 0$ nichts, für $k=0$ dagegen sehr viel zu $\varrho_2(\mathbf{f})$ bei. Den allein interessierenden Grenzwert von $\varrho_2(\mathbf{f})$ für $k \rightarrow 0$ erhält man, wenn man von $\varrho_2(\mathbf{r})$ entsprechend

$$u_2(\mathbf{r}) \equiv \varrho_2(\mathbf{r}) - \varrho_2^\infty \cong 0 \quad (4)$$

den asymptotischen Grenzwert ϱ_2^∞ abspaltet. Zunächst gilt

$$k \neq 0: \quad \varrho_2(\mathbf{f}) = u_2(\mathbf{f}), \quad (5)$$

also auch

$$\lim_{k \rightarrow 0} \varrho_2(\mathbf{f}) = \lim_{k \rightarrow 0} u_2(\mathbf{f}) = u_2(k=0) = \int d\mathbf{r} u_2(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Bei $u_2(\mathbf{f})$ stimmt der Grenzwert mit dem Wert für $k=0$ überein, da $u_2(\mathbf{r})$ definitionsgemäß asymptotisch verschwindet, wie in (4) angegeben.

Für ϱ_2^∞ erwartet man zunächst das Quadrat ϱ^2 der Einteilchendichte, da für $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ die Korrelationen zwischen den Teilchen verschwinden. Für Systeme mit fester Teilchenzahl unterscheidet sich aber im allgemeinen ϱ_2^∞ von ϱ^2 aus Normierungsgründen um eine zu N^{-1} proportionale Konstante.

⁴ L. D. LANDAU u. E. M. LIFSHITZ, Statistische Physik, Moskau 1964.

Zum Beispiel ist $\varrho^2(1-N^{-1})$ die Paarverteilung eines homogenen, klassischen idealen Gases. Sie ist wie zu fordern auf $N(N-1)$ normiert. Diese Komplikation fällt weg für hinsichtlich der Teilchenzahl offene Systeme, die durch eine großkanonische Verteilung beschrieben werden können. Die bei der Bildung von Integralen störende N^{-1} -Konstante kann auch durch den (vor der Integration durchzuführenden!) Grenzübergang zu einem unendlich großen System beseitigt werden, also

$$u_2(\mathbf{r}) = [\varrho_2(\mathbf{r}) - \varrho^2]_{\text{großkan.}} = \lim_{\substack{N \rightarrow \infty \\ \varrho = \text{const}}} [\varrho_2(\mathbf{r}) - \varrho^2]_{\text{kanon.}} \quad (7)$$

Benutzt man die großkanonische Beschreibungsweise, so hängt das Volumenintegral von $u_2(\mathbf{r})$ auf Grund der Bedeutung von ϱ_2 als Paarverteilung nach

$$\begin{aligned} (\Delta N)^2 &= N + \langle \hat{N}(\hat{N}-1) \rangle - N^2 \\ &= N + \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [\varrho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \varrho^2] = N + \mathcal{U} \int d\mathbf{r} u_2(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (8)$$

mit dem Schwankungsquadrat $(\Delta N)^2$ der Teilchenzahl in \mathcal{U} zusammen. Für makroskopische \mathcal{U} kann das System im Teilvolumen andererseits durch eine großkanonische Verteilung beschrieben werden. Der Logarithmus der großen Zustandssumme

$$\mathcal{P} = \ln \text{Sp} \left\{ \exp \frac{\mu \hat{N} - H}{k_B T} \right\} \equiv \ln \text{Sp} \{ e^{\alpha \hat{N} - \beta H} \} = \frac{p \mathcal{U}}{k_B T} \quad (9)$$

hat die angegebene thermodynamische Bedeutung, vgl. etwa ⁴. μ ist das chemische Potential. Die mittlere Teilchenzahl $N(\alpha)$ wird durch μ bzw. $\alpha \equiv \mu/k_B T$ bestimmt und umgekehrt. Die erste Ableitung von \mathcal{P} nach α liefert N , die zweite $(\Delta N)^2$, wie man bei Ausführung dieser Differentiationen sofort erkennt. Es gilt also

$$(\Delta N)^2 = \frac{\partial N}{\partial \alpha} = \frac{\partial N / \partial \alpha}{\partial \mathcal{P} / \partial \alpha} N = \left(\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial N} \right)^{-1} N = \frac{k_B T}{(\partial p / \partial \varrho)_T} N, \quad (10)$$

wobei im letzten Gleichheitszeichen der in (9) angegebene Ausdruck für \mathcal{P} benutzt wurde. Aus (2), (6) und dem Vergleich von (8) und (10) liest man unmittelbar

$$N^{-1} \lim_{t \rightarrow 0} \langle \varrho_t^\dagger \varrho_{-t} \rangle = 1 + \int \frac{d\mathbf{r}}{\varrho} u_2(\mathbf{r}) = \frac{k_B T}{(\partial p / \partial \varrho)_T} \quad (11)$$

ab. Der Zusammenhang zwischen dem Grenzwert der Schwankungsamplitude und der Kompressibilität gilt auch für Systeme fester Teilchenzahl. Die Rech-

nung mit der großkanonischen Verteilung dient nur dazu, diejenigen Terme zu isolieren, die zu dem Grenzwert (11) beitragen. Für das zweite Gleichheitszeichen in (11) ist die genaue Definition (7) von u_2 wesentlich. Dieser Zusammenhang mit der Kompressibilität wurde zuerst von ORNSTEIN und ZERNIKE⁵ gefunden und kann zur Untersuchung von Schwingungserscheinungen (kritische Opaleszenz) sowie zur Berechnung der Zustandsgleichung aus der Paarverteilung verwendet werden.

$k \rightarrow 0$ bezeichnet den Anwendungsbereich phänomenologisch-thermodynamischer Theorien. Es ist daher plausibel, daß der Grenzwert (11) durch thermodynamische Größen dargestellt werden kann. Für COULOMB-Plasmen mit Untergrund gilt das zweite Gleichheitszeichen in (11) nicht; die hier auftretenden Besonderheiten werden in Abschnitt 4 diskutiert.

3. Auswertung der Momente

Die in I definierten Momente M_1 und M_3 können für Dichteschwankungen allgemein ausgewertet werden. Dazu wird die aus (1.2) folgende Darstellung

$$\varrho_t = \int d\tau e^{-i\tau t} \sum_{n=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n) = \sum_n e^{-i\tau \mathbf{r}_n} \quad (1)$$

der ϱ_t für ein System fester Teilchenzahl benutzt. Aus (1) folgt durch Bildung der Ableitungen als Vertauschungen mit H

$$\begin{aligned} \dot{\varrho}_t &= -\frac{ik}{m} \sum_n \frac{1}{2} [p_n, e^{-ikx_n}]_+, \\ p_n &\equiv \frac{\mathbf{p}}{k} \cdot \mathbf{p}_n, \quad x_n \equiv \frac{\mathbf{r}}{k} \cdot \mathbf{r}_n \\ \ddot{\varrho}_t &= \left(-\frac{ik}{m}\right)^2 \sum_n \frac{1}{4} [p_n, [p_n, e^{-ikx_n}]_{++}] \\ &\quad - \frac{ik}{m} \sum_n \frac{1}{2} [\dot{p}_n, e^{-ikx_n}]_+. \end{aligned} \quad (2)$$

Daraus kann zunächst M_1 zu

$$M_1(\mathbf{f}) = \frac{i}{\hbar} \langle [\dot{\varrho}_t, \varrho_{-t}] \rangle = \frac{k^2}{m} N \quad (3)$$

berechnet werden. Die Auswertung des Kommutators ist elementar. (3) stellt die seit langem bekannte f -Summenregel der Oszillatorstärken dar, deren Bedeutung für Vielteilchenprobleme von NOZIÈRES und PINES² erkannt wurde.

Erst kürzlich betrachtete PUFF³ die M_3 -Summenregel. Er zeigte, daß M_3 durch die kinetische Energie

und ein Integral über die Paarverteilung dargestellt werden kann. M_3 hängt von der Teilchenwechselwirkung ab. Die Auswertung der Vertauschung in

$$M_3(\mathbf{f}) = \frac{i}{\hbar} \langle [\ddot{\varrho}_t, \dot{\varrho}_{-t}] \rangle \equiv M_3^{(1)} + M_3^{(2)} \quad (4)$$

ist etwas mühsam, aber vollständig elementar. Sie soll hier kurz skizziert werden. Entsprechend den beiden Anteilen von $\ddot{\varrho}_t$ in (2) besteht auch M_3 aus zwei verschiedenen Termen $M_3^{(1)}$ und $M_3^{(2)}$. Für $M_3^{(1)}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} M_3^{(1)} &= \left(\frac{k}{2m}\right)^3 k \sum_n \langle 24 p_n^2 + 2 \hbar^2 k^2 \rangle \\ &= \left(\frac{k^2}{m}\right)^2 \sum_n \left\langle \frac{p_n^2}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} \right\rangle \\ &= \left(\frac{k^2}{m}\right)^2 \left[2 E_{\text{kin}} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} N \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Zur Berechnung von $M_3^{(2)}$ wird \dot{p}_n benötigt. Da

$$\begin{aligned} \dot{p}_n &= \frac{i}{\hbar} [H, p_n] = -\frac{\partial V}{\partial x_n}, \\ V &= \frac{1}{2} \sum_{n,m}' v_{nm} + \sum_n V_n^{\text{wand}} \end{aligned} \quad (6)$$

keine Impulsoperatoren mehr enthält, ist es mit $\exp(ikx)$ vertauschbar und

$$\begin{aligned} M_3^{(2)} &= \frac{k^2}{2m^2} \left\langle \sum_{n,m} \frac{i}{\hbar} [\dot{p}_n e^{-ikx_n}, [p_m, e^{+ikx_m}]_+] \right\rangle \\ &= \frac{k^2}{m^2} \left\langle \sum_{n,m} e^{ik(x_m - x_n)} \frac{i}{\hbar} \{ [\dot{p}_n, p_m] + \hbar k \dot{p}_n \delta_{mn} \} \right\rangle \end{aligned} \quad (7)$$

vereinfacht sich wie angegeben. Der δ_{mn} -Term verschwindet wegen $\langle \dot{p}_n \rangle = 0$. Das Ergebnis

$$\begin{aligned} M_3^{(2)} &= \frac{k^2}{m^2} \left\langle \sum_{n,m} e^{ik(x_m - x_n)} \frac{\partial^2 V}{\partial x_n \partial x_m} \right\rangle \\ &= \frac{k^2}{m^2} \left\langle \sum_{n \neq m}' [1 - e^{ik(x_m - x_n)}] \frac{\partial^2 v_{mn}}{\partial x_m^2} \right\rangle \end{aligned} \quad (8)$$

kann als Mittelwert einer Summe über alle Teilchenpaare geschrieben werden. Das Wandpotential von (6) trägt zu $M_3^{(2)}$ nur einen vernachlässigbaren Oberflächenterm bei. $M_3^{(2)}$ läßt sich nach

$$\begin{aligned} M_3^{(2)} &= \mathcal{U} \frac{k^2}{m^2} \int d\tau \varrho_2(r) [1 - \cos kx] \frac{\partial^2 v(r)}{\partial x^2} \\ &\equiv N \left(\frac{k^2}{m}\right)^2 J(k) \end{aligned} \quad (9)$$

als Funktional der Paarverteilung ϱ_2 darstellen. Für große k geht $J(k)$ wie k^{-2} nach Null. Für Wechselwirkungen mit abstoßendem Potentialkern trägt der $\cos kx$ -Term zu diesem asymptotischen Verhalten nichts bei, im Anhang werden diese Fragen genauer untersucht. Für $k \rightarrow 0$ strebt $J(k)$ einem Grenzwert

⁵ L. S. ORNSTEIN u. F. ZERNIKE, Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap. Proc. 17, 795 [1914].

zu, für den man

$$\begin{aligned} J_0 &\equiv \lim_{k \rightarrow 0} J(k) \\ &= \int \frac{d\tau}{Q} Q_2(r) \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k^2} [1 - \cos kx] \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (10) \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{d\tau}{Q} Q_2(r) x^2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \end{aligned}$$

erhält. Zur Durchführung des Grenzübergangs unter dem Integral siehe Anhang. Die Ausführung der Winkelintegrationen in (10) gibt

$$J_0 = \frac{1}{10} \int \frac{d\tau}{Q} Q_2(r) \left[r^2 \frac{d^2 v}{dr^2} + \frac{2}{3} r \frac{dv}{dr} \right]. \quad (11)$$

Damit dieses Integral existiert, muß das Potential $v(r)$ für große r stärker als $1/r^3$ abfallen. Systeme mit COULOMB-Wechselwirkung erfordern eine besondere Behandlung, die im nächsten Abschnitt vorgenommen wird. Wegen (3), (4) und (9) erhält man für M_3

$$M_3 = M_1 \frac{k^2}{m} \left[2 \frac{E_{\text{kin}}}{N} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} + J(k) \right] \equiv \frac{M_1^2}{N} Q \quad (12)$$

als endgültigen Ausdruck. Q wurde als Abkürzung für die eckige Klammer in (12) eingeführt.

Prinzipiell können auch die höheren Momente $M_5 \dots$ nach dem eben beschriebenen Schema ausgewertet werden. Es treten dann jedoch Mehrfachsummen auf, deren Berechnung die Kenntnis der Tripelverteilung und höherer Verteilungen erfordert. Damit werden in die Theorie nur neue, im allgemeinen unbekannte Funktionen eingeführt. Die Paarverteilung ist vor allen anderen Verteilungen durch ihre in den Abschnitten 1 und 2 dargestellten einfachen Zusammenhänge mit den Dichteschwankungen und der Zustandsgleichung ausgezeichnet.

Von den N -Momenten hängt $N_0 = \langle Q_t Q_{-t} \rangle$ über (2.2) direkt mit der Paarverteilung zusammen. N_2 , das bereits von HUANG und KLEIN⁶ betrachtet wurde, wird durch

$$\begin{aligned} N_2 &= \langle \frac{1}{2} [\dot{Q}_t, \dot{Q}_{-t}] \rangle \quad (13) \\ &= \frac{k^2}{8m^2} \left\langle \sum_{n,m} [p_n, e^{-ikx_n}]_{+}, [p_m, e^{ikx_m}]_{+} \right\rangle \end{aligned}$$

bestimmt. Die Auswertung der Plusvertauschungen liefert

$$\begin{aligned} N_2 &= \frac{k^2}{m} \left\langle \sum_n \frac{p_n^2}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} Q_t Q_{-t} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2m} \sum_{n \neq m} [p_n p_m, e^{-ik(x_n - x_m)}]_{+} \right\rangle. \quad (14) \end{aligned}$$

Der letzte Term ist nicht auf Impuls- und Paarverteilung zurückführbar, sondern erfordert zu seiner Berechnung die vollständige Zweiteilchen-Dichtematrix. Eine entscheidende Vereinfachung bringt jedoch der klassische Grenzfall. Dann können die Impulsmittelungen unabhängig von den Mittelungen im Koordinatenraum durchgeführt werden. Außerdem sind alle Impulse voneinander statistisch unabhängig, so daß der letzte Term von (14) wegen $n \neq m$ und $\langle p_n \rangle = 0$ verschwindet. Aus dem klassischen Grenzfall des FDT, siehe [I (1.13)], ergibt sich für N_2/M_1 der klassische Grenzwert $k_B T$, vgl. [I (3.13)]. Zusammen mit (14) folgt daraus

$$\hbar \rightarrow 0: \quad k_B T = \frac{k^2/m}{M_1} \frac{2}{3} E_{\text{kin}}. \quad (15)$$

Andererseits gilt der klassische Gleichverteilungssatz

$$\hbar \rightarrow 0: \quad E_{\text{kin}} = \frac{3}{2} N k_B T. \quad (16)$$

Der Vergleich von (15) und (16) zeigt, daß M_1 gerade den in (3) angegebenen Wert $N k^2/m$ haben muß, damit der Gleichverteilungssatz aus (15) folgt. Das ist für beliebige Dichten und Temperaturen nur dann möglich, wenn die dem Kommutator von (3) entsprechende Poisson-Klammer bereits den Zahlenwert M_1 (statt einer Funktion der Orte und Impulse) hat. Die allgemeine Auswertung in (3) zeigt, daß darüber hinaus auch der quantenmechanische Kommutator diesen Wert besitzt.

Nach dem Vorgehen von HUANG und KLEIN⁶ kann von N_2 ein dem letzten, nicht auswertbaren Term in (14) ähnlicher Ausdruck abgespalten werden, der sicher positiv ist. Jedoch führt die sich daraus ergebende untere Grenze für N_2 bei Kombination mit den I betrachteten Momentenungleichungen lediglich zu einer Ungleichung für $\langle Q_t Q_{-t} \rangle$, die für alle k schwächer als die in Abschnitt 6 abgeleitete Ungleichung (B) ist. N_2 wird daher hier nicht weiter untersucht.

4. Plasma mit Untergrund

Aus Teilchen einer Sorte mit COULOMB-Wechselwirkung können keine ausgedehnten homogenen Systeme aufgebaut werden. Dazu ist vielmehr er-

⁶ K. HUANG u. A. KLEIN, Ann. Phys. New York **30**, 203 [1964].

forderlich, daß durch mindestens zwei verschiedene Komponenten mit entgegengesetztem Ladungsvorzeichen für die elektrische Neutralität des Gesamtsystems und damit auch für die Neutralität im Mittel von Teilen des Plasmas gesorgt wird. Da die Theorie bisher nur für einkomponentige Systeme entwickelt wurde, beschränken wir uns auf die Diskussion eines Plasmas, dessen Neutralität durch einen homogenen „Untergrund“ gewahrt wird. Dieses Modell ist brauchbar für ein Elektronengas, wobei die viel schwereren Ionen durch den positiven Untergrund idealisiert werden. Die potentielle Energie des Elektronengases mit Untergrund enthält dann neben der Elektron-Elektron-Wechselwirkung noch die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Untergrund und die elektrische Wechselwirkungsenergie der Untergrundladungen. Zum HAMILTON-Operator des Systems tritt also der Term

$$V_u = - \sum_n \varrho \int_v d\tau' v(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'|) + \frac{1}{2} \varrho^2 \iint_v d\tau d\tau' v(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (1)$$

$$v(r) = e^2/(4\pi\epsilon_0 r) \equiv \epsilon^2/r$$

hinzu. Die Integrationen laufen über das betrachtete Plasmavolumen \mathcal{V} .

Die Dichte ϱ in (1) ist eine Eigenschaft des Untergrunds. Sie ist daher auch bei Schwankungen der Elektronenzahl in \mathcal{V} gleich dem Verhältnis von *mittlerer* Teilchenzahl und Volumen. Damit hängt der HAMILTON-Operator von der mittleren Teilchenzahl ab. Das führt dazu, daß der wichtige Zusammenhang (2.11) zwischen Paarverteilung und Kompressibilität nicht mehr gilt. Von vorherein ist zu erwarten, daß bei einem Plasma mit Untergrund anomal kleine Teilchenzahlschwankungen auftreten. Denn der festgehaltene Untergrund stabilisiert auf Grund der langreichweitigen COULOMB-Wechselwirkung auch die Teilchenzahl der beweglichen Ladungsträger. Schwankungen der Teilchenzahl sind daher nur in einer Oberflächenschicht des Teilvolumens zu erwarten. Der eben diskutierte Effekt ist natürlich physikalisch nicht real, sondern lediglich eine Folge der Idealisierung eines Zweikomponentensystems durch ein Einkomponentensystem mit Untergrund.

Die explizite Rechnung bestätigt die qualitative Diskussion. Die beiden Ausgangsbeziehungen (2.8) und (2.9) zur Herleitung von (2.11) bleiben gültig. Bei Bildung der Ableitungen von Ψ nach α muß aber nun beachtet werden, daß die Energien über die in (1) auftretende Untergrunddichte $\varrho = N(\alpha)/\mathcal{V}$

ebenfalls vom chemischen Potential bzw. von α abhängen. Für die erste Ableitung ergibt sich

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} = N - \beta \frac{\partial N}{\partial \alpha} \frac{\partial E}{\partial N}, \quad (2)$$

$$E = \langle H \rangle, \quad N = \langle \hat{N} \rangle, \quad \beta \equiv 1/k_B T.$$

Nun ist

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial N} &= \left\langle \frac{\partial H}{\partial N} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial V_u}{\partial N} \right\rangle \\ &= - \frac{1}{\mathcal{V}} \left\langle \sum_n \int d\tau' v(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'|) \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{\mathcal{V}} \frac{N}{\mathcal{V}} \iint d\tau d\tau' v(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|). \end{aligned} \quad (3)$$

Beide Ausdrücke kompensieren sich, es gilt also $\partial E/\partial N = 0$. Bildet man nun die zweite Ableitung von Ψ , so entsteht

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \alpha^2} = \frac{\partial N}{\partial \alpha} = (\Delta N)^2 - \beta \frac{\partial N}{\partial \alpha} \left\langle \hat{N} \frac{\partial H}{\partial N} \right\rangle \quad (4)$$

mit

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{N} \frac{\partial H}{\partial N} \right\rangle &= \langle \hat{N}(-\hat{N} + N) \rangle \iint \frac{d\tau' d\tau''}{\mathcal{V}^2} v(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) \\ &= -(\Delta N)^2 \iint \frac{d\tau' d\tau''}{\mathcal{V}^2} \frac{\epsilon^2}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} \equiv -(\Delta N)^2 A. \end{aligned} \quad (5)$$

Dabei wurde die gesamte Mittelung in zwei Schritten durchgeführt, zunächst die mit dem doppelten Volumenintegral in der ersten Zeile bereits vollzogene Mittelung über alle Verteilungen mit jeweils fester Teilchenzahl, danach in der zweiten Zeile die Mittelung über alle Teilchenzahlen. Aus (4) und (5) folgt

$$(\Delta N)^2 = \frac{\partial N/\partial \alpha}{1 + \beta A (\partial N/\partial \alpha)} \cong \frac{k_B T}{A} \sim \mathcal{V}^{1/3}. \quad (6)$$

$\partial N/\partial \alpha$ ist der alte Ausdruck (2.10) für $(\Delta N)^2$ bei Systemen ohne Untergrund, der mit der Kompressibilität zusammenhängt. $\partial N/\partial \alpha$ ist proportional zu \mathcal{V} . A ist proportional zu $\mathcal{V}^{-1/3}$, wie bereits eine einfache Dimensionsbetrachtung zeigt. Daher kann die 1 im Nenner von (6) vernachlässigt werden. Das Schwankungsquadrat ist proportional zu $\mathcal{V}^{1/3}$. Die Schwankungen der Teilchenzahl sind erwartungsgemäß auf eine Oberflächenschicht begrenzt. Es besteht kein Zusammenhang zwischen $(\Delta N)^2$ und $\partial p/\partial \varrho$. Die 1 könnte nicht vernachlässigt werden bei Wechselwirkungen endlicher Reichweite, da dann $A \sim \mathcal{V}^{-1}$ ist. Die Schwankungen bleiben in diesem Fall normal. Die einschneidende Stabilisierung der Teilchenzahl entsteht also erst durch das Zusammenwirken von Untergrund und unendlicher Reichweite.

Der Ausdruck (6) für das Schwankungsquadrat zeigt eine mathematisch interessante Eigenschaft. Die beiden Grenzübergänge zu einem unendlich gro-

Ben System einerseits und zu einem wechselwirkungs-freien System andererseits sind nicht vertauschbar:

$$\lim_{v \rightarrow \infty} \lim_{e^2 \rightarrow 0} \frac{(\Delta N)^2}{N} = \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{(\Delta N)^2}{N} \Big|_{\text{ideal}}, \quad (7)$$

$$\lim_{e^2 \rightarrow 0} \lim_{v \rightarrow \infty} \frac{(\Delta N)^2}{N} = \lim_{e^2 \rightarrow 0} 0 = 0.$$

Bei der üblichen Vernachlässigung aller Oberflächeneffekte (periodische Randbedingungen) führt also beim Plasma der Grenzübergang $e^2 \rightarrow 0$ nicht auf das Schwankungsquadrat des idealen Gases. Das unterstreicht die Notwendigkeit mathematischer Sorgfalt bei der theoretischen Behandlung von Plasmen. Es zwingt aber nicht zu der Annahme, daß auch für die Struktur des Plasmas charakteristischere Größen wie die Paarverteilung selbst ein anomales Verhalten zeigen müssen. Als Modell hierfür kann die DEBYE-HÜCKEL-Näherung (siehe etwa ⁷),

$$\frac{u_2(r)}{\varrho} = -\frac{1}{4\pi\lambda_D^2 r} e^{-r/\lambda_D}, \quad \lambda_D = \frac{k_B T}{4\pi e^2 \varrho} \quad (8)$$

für u_2 beim klassischen Plasma dienen. λ_D ist der DEBYE-Radius. u_2 geht mit e^2 nach Null, also in die u_2 -Funktion des idealen Gases über. Aber gleichzeitig behält das für $(\Delta N)^2$ maßgebende Integral

$$\int \frac{d\tau}{\varrho} u_2 = - \int_0^\infty \frac{dr}{\lambda_D^2} e^{-r/\lambda_D} = -1 \quad (9)$$

unabhängig von der Wechselwirkung den Wert -1 bei. Das ist eine Folge der bei $e^2 \rightarrow 0$ unbeschränkt anwachsenden Reichweite von u_2 . Dieser Effekt ist jedoch für die meisten Größen, so für die potentielle Energie, belanglos.

Der Wert -1 in (9) ist nicht zufällig. Da nämlich das Schwankungsquadrat nur zu $U^{1/3}$ proportional ist, muß das Integral von u_2/ϱ unbedingt den Wert -1 haben, um in dem allgemeinen Ausdruck (2.8) den linearen Anteil N zu kompensieren. Das Ergebnis von (9) ist daher sowohl für klassische wie für Quantenplasmen exakt gültig. Von BROUT und CARRUTHERS ⁷ wurde bereits darauf hingewiesen, daß die DEBYE-HÜCKEL-Näherung für das klassische Plasma die Bedingung (9) befriedigt. Allerdings halten diese Autoren diesen Test für anwendbar bei

beliebigen Systemen, was für eine u_2 -Funktion ohne asymptotisch konstante Terme, vgl. die Diskussion in Abschnitt 2, nicht zutrifft. Es handelt sich vielmehr um eine Ausnahmestellung der Plasmen mit Untergrund.

Für ein System mit fester Teilchenzahl folgt (9) aus der Normierung der Paarverteilung ϱ_2 auf $N(N-1)$. Im allgemeinen wird der Wert -1 dann jedoch durch die in Abschnitt 2 erwähnten zu N^{-1} proportionalen Anteile von u_2 erzwungen. Aus (9) folgt also, daß beim Plasma mit Untergrund keine solchen N^{-1} -Terme auftreten. In (2.4) ist dann auch bei fester Teilchenzahl $\varrho_2^\infty = \varrho^2$.

Der Untergrundanteil (1) der potentiellen Energie gibt einen Beitrag M_3^u zu dem in (3.8) definierten Wechselwirkungsanteil $M_3^{(2)}$ von M_3 . Die Selbstenergie des Untergrunds liefert als Konstante nichts. Die Elektron-Untergrund-Wechselwirkung gibt

$$M_3^u = -\frac{k^2}{m^2} \left\langle \sum_n \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \varrho \int d\tau' v(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}'|) \right\rangle \quad (10)$$

$$= -\frac{k^2}{m^2} \varrho^2 \int d\tau_1 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \int d\tau_2 v_{12}.$$

Damit erhält $M_3^{(2)}$ die Form

$$M_3^{(2)} = \frac{k^2}{m^2} \iint d\tau_1 d\tau_2 \cdot \{ \varrho_2(r) [1 - \cos kx] - \varrho^2 \} \frac{\partial^2 v(r)}{\partial x^2}, \quad \mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (11)$$

Wegen der großen Reichweite von v können diese Ausdrücke nicht ohne weiteres auf bis ins Unendliche erstreckte Integrale über die Differenzkoordinaten zurückgeführt werden. In (11) kompensiert aber der Untergrundterm einen analogen Elektronenterm. Damit vereinfacht sich (11) zu

$$M_3^{(2)} = \frac{k^2}{m^2} \iint d\tau_1 d\tau_2 \{ u_2(r) [1 - \cos kx] - \varrho^2 \cos kx \} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \quad (12)$$

Nach der an (9) anschließenden Diskussion verschwindet u_2 asymptotisch. Im ersten Glied ermöglicht die endliche Reichweite von u_2 den Übergang zu Relativkoordinaten mit unendlichen Integrationsgrenzen. Der zweite Term wird wie folgt umgeformt

$$\iint d\tau_1 d\tau_2 \cos kx \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \iint d\tau_1 d\tau_2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} [\cos(kx) v(r)] + 2k \frac{\partial}{\partial x_1} [\sin(kx) v(r)] - k^2 \cos(kx) v(r) \right\}. \quad (13)$$

In dieser Form führt der Übergang zu Relativkoordinaten einfach auf die FOURIER-Transformierte

⁷ R. BROUT u. P. CARRUTHERS, Lectures on the Many-Electron Problem, Interscience Publishers, New York 1963.

$v(k) = 4\pi\epsilon^2/k^2$ des COULOMB-Potentials

$$\int d\tau_1 \left[\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} v(k) + 2k \frac{\partial}{\partial x_1} 0 - k^2 v(k) \right] = -\mathcal{U} k^2 v(k). \quad (14)$$

Der erste Term in (14) verschwindet, da das Integral über die Relativkoordinaten ein von r_1 unabhängiges Resultat liefert. (Strenggenommen entsteht bei endlichen Systemen ein zu vernachlässigender Oberflächenterm, entsprechendes gilt für den zweiten Term.) Zu der in (3.9) definierten Größe $J(k)$, die hier mit $J_c(k)$ bezeichnet wird, liefert also nur der dritte Term einen Beitrag, insgesamt entsteht

$$J_c(k) \equiv \left(\frac{m}{k^2} \right)^2 \frac{M_3^{(2)}}{N} = \frac{1}{k^2} \int \frac{d\tau}{Q} u_2 [1 - \cos kx] \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + Q v(k). \quad (15)$$

Der erste Anteil von (15) unterscheidet sich von (3.9) nur dadurch, daß auf Grund der kompensierenden Wirkung des Untergrunds Q_2 durch u_2 ersetzt ist. Der Grenzwert dieses Terms für $k \rightarrow 0$ ist endlich, genau wie bei Potentialen normaler Reichweite. Dagegen divergiert der zweite Term und damit auch $J_c(k)$ insgesamt für $k \rightarrow 0$. Das ist eine Folge der großen Reichweite des COULOMB-Potentials, die durch den Untergrund nur teilweise, nämlich in den Diagonalgliedern $m=n$ der ersten Zeile von (3.8), kompensiert wird. Im nächsten Abschnitt wird gezeigt, daß kollektive Anregungen vom Typ der Plasmaschwingungen unmöglich sind, solange $J(k)$ für $k \rightarrow 0$ endlich bleibt.

Das Integral in (15) wird im Anhang untersucht. Für $k \rightarrow 0$ nimmt es den Wert $\frac{4}{15} E_{\text{pot}}/N$ an, wie man auch direkt aus (15) durch den zu (3.10) analogen Grenzübergang ableiten kann. Für $k \rightarrow \infty$ erhält man den einfachen Ausdruck

$$k \rightarrow \infty: \quad J_c(k) \cong \frac{4\pi\epsilon^2 Q}{k^2} \left[1 + \frac{2}{3} \frac{u_2(0)}{Q^2} \right] \quad (16)$$

für den asymptotischen Verlauf von $J_c(k)$.

5. Dichteschwankungen großer Wellenlänge

Von den in ¹ abgeleiteten Ungleichungen erweisen sich bei Beachtung der über die einzelnen Momente vorliegenden Kenntnisse die folgenden als nützlich:

$$\begin{aligned} k_B T M_{-1} &\leq N_0 \leq k_B T M_{-1} + \frac{1}{2} \hbar \sqrt{M_{-1} M_1}, \\ k_B T M_1 &\leq N_2 \leq k_B T M_1 + \frac{1}{2} \hbar \sqrt{M_1 M_3}, \\ M_{-1} M_3 &\geq M_1^2, \\ N_0 &\geq \frac{1}{2} \hbar M_1 \sqrt{M_1/M_3}. \end{aligned} \quad (1)$$

Als erste Anwendung soll das Verhalten von Dichteschwankungen großer Wellenlänge untersucht werden. Nach den ersten beiden Ungleichungen kann N_0/M_{-1} höchstens um $\frac{1}{2} \hbar \sqrt{M_1/M_{-1}}$ und N_2/M_1 höchstens um $\frac{1}{2} \hbar \sqrt{M_3/M_1}$ vom klassischen Wert $k_B T$ abweichen. Nach (3.3) und (3.12) enthalten beide Wurzelausdrücke

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \hbar \sqrt{M_1/M_{-1}} &= \frac{1}{2} \hbar k \sqrt{N/m M_{-1}}, \\ \frac{1}{2} \hbar \sqrt{M_3/M_1} &= \frac{1}{2} \hbar k \sqrt{Q/m} \end{aligned} \quad (2)$$

einen Faktor k . Sie gehen für $k \rightarrow 0$ mit k linear gegen Null, falls M_{-1} und Q endliche Grenzwerte annehmen. $Q(k)$ hat für $k \rightarrow 0$ den Grenzwert

$$Q_0 = 2 E_{\text{kin}}/N + J_0, \quad (3)$$

wobei J_0 in (3.10) definiert wurde. Für Systeme mit Wechselwirkungen endlicher Reichweite ist J_0 endlich. Falls nun

$$\frac{1}{2} \hbar k \sqrt{Q_0/m} \ll k_B T \quad (4)$$

ist, also für große Wellenlängen, hat auch bei einem quantenmechanischen System N_2/M_1 (fast) den klassischen Wert $k_B T$. Auf jeden Fall ist dann

$$\lim_{k \rightarrow 0} N_2/M_1 = k_B T. \quad (5)$$

Das bedeutet, daß der klassische Grenzfall des FDT [I (1.13)] erreicht wird. Dazu ist nötig, daß die Schwankungen großer Wellenlänge nur mit so kleinen Frequenzen erfolgen, daß für alle zu den Momenten N_2 und M_1 wesentlich beitragenden Frequenzen $\hbar \omega \ll k_B T$ gilt. Geht außerdem noch die Temperatur nach Null, so ist die Funktion α_k'' für kleine k bei kleinen Frequenzen konzentriert. Der Fall $T=0$ wird anschließend noch direkt untersucht.

Wegen der dritten Ungleichung in (1) ist der zweite Wurzelausdruck in (2) immer größer als der erste. Geht M_3/M_1 nach Null, so gilt das also erst recht für M_1/M_{-1} . Daraus folgt

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} N_0/M_{-1} &= k_B T, \\ N_0 &= \langle Q_t Q_{-t} \rangle, \quad M_{-1} = \alpha_0. \end{aligned} \quad (6)$$

Der Grenzwert von $\langle Q_t Q_{-t} \rangle$ wurde in (2.11) auf die Kompressibilität zurückgeführt. Aus dem Vergleich von (6) mit (2.11) ergibt sich

$$\lim_{k \rightarrow 0} \alpha_0 = \frac{N}{(\partial p / \partial Q) T} \quad (7)$$

für den Grenzwert der statischen Suszeptibilität, der also insbesondere ebenfalls endlich ist. Da die Tem-

peratur in (7) gar nicht mehr vorkommt, gilt diese Beziehung auch noch für $T=0$. In (2) kann $M_{-1} = \alpha_0$ für $k \rightarrow 0$ durch den Grenzwert (7) ersetzt werden. Solange also

$$\frac{1}{2} \hbar k \sqrt{(1/m)} (\partial p / \partial Q)_T \ll k_B T \quad (8)$$

gilt, kann der klassische Zusammenhang $\langle Q_t Q_{-t} \rangle = \alpha_0 k_B T$ zwischen N_0 und α_0 benutzt werden. Die Bedingung (8) ist analog zu (4). Sie ist leichter anwendbar und wegen (7) außerdem schwächer als (4). Das heißt, daß N_0/M_{-1} den Grenzwert $k_B T$ rascher erreicht als N_2/M_1 . Das ist plausibel, da N_2/M_1 ein Verhältnis von zwei Momenten höherer Ordnung darstellt als N_0/M_{-1} und zu Momenten höherer Ordnung die größeren Frequenzen stärker beitragen.

Von besonderem Interesse ist der Fall $T=0$. Mit dem FDT [I (1.13)] für $T=0$ erhalten die beiden Ungleichungen für N_0/M_{-1} und N_2/M_1 die Form

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{N_0}{M_{-1}} &= \frac{\hbar}{2} \int_0^\infty d\omega \alpha''_t / \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha''_t \\ &\leq \frac{1}{2} \hbar k \sqrt{(1/m)} (\partial p / \partial Q)_T, \quad (9) \\ 0 \leq \frac{N_2}{M_1} &= \frac{\hbar}{2} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \alpha''_t / \int_0^\infty d\omega \omega \alpha''_t \\ &\leq \frac{1}{2} \hbar k \sqrt{Q_0/m}, \end{aligned}$$

wobei in den Wurzelausdrücken gleich die Grenzwerte für $k \rightarrow 0$ eingesetzt wurden. In kürzerer Schreibweise gilt also

$$\begin{aligned} \overline{\omega \alpha''} &\leq v' k, \quad v' \equiv \sqrt{Q_0/m}, \\ \overline{\omega \alpha''/\omega} &\leq v_s k, \quad v_s \equiv \sqrt{(1/m)} (\partial p / \partial Q)_T \quad (10) \end{aligned}$$

für die beiden Frequenzmittelwerte. Die Mittelungsfunktionen $\omega \alpha''$ und α''/ω sind neben den Mittelungsstrichen angegeben. v_s ist die normale Schallgeschwindigkeit. v' ist wegen der dritten Ungleichung aus (1) eine größere Geschwindigkeit.

Die Beziehungen (10) enthalten Aussagen über die mit Dichteschwankungen verknüpften elementaren Anregungen. Falls nämlich die Spektralfunktion $\omega \alpha''$ für $k \rightarrow 0$ ein Resonanzverhalten zeigt, so muß die Resonanzfrequenz ω_r ebenso wie die in (10) betrachteten Frequenzmittelwerte mit k nach Null gehen. Ein etwa zu k^2 proportionaler Verlauf kann zunächst nicht ausgeschlossen werden. Die experimentellen Resultate und die für konkrete Systeme durchgeführten Näherungsrechnungen zeigen aber sämtlich einen linearen Zusammenhang zwischen ω_r und k . Flüssiges He⁴ besitzt für $k \rightarrow 0$

normale Schallquanten mit $\omega_r = v_s k$ als elementare Anregungen. Der Nullschall⁸ in flüssigem He³ zeigt für $k \rightarrow 0$ ebenfalls eine lineare Dispersionsrelation mit einer größeren Schallgeschwindigkeit als die des normalen Schalls. Es sei betont, daß über die Natur von Einteilchenanregungen hier keinerlei Aussagen gemacht werden. Insbesondere hat daher das Auftreten einer Energielücke im Spektrum dieser Anregungen bei superfluiden und supraleitenden Systemen mit den hier diskutierten Dichteschwankungen nichts zu tun.

Die in (10) betrachteten Frequenzmittelwerte hängen noch empfindlich vom Verhalten von α'' für große Frequenzen ab. Daher ist ein quantitativer Vergleich mit der Resonanzfrequenz, der zu Aussagen über die Schallgeschwindigkeit führen würde, nicht möglich. Versucht man zum Beispiel, den Verlauf von $\omega \alpha''$ durch eine einzige Polstelle in der unteren Frequenzhalbebene, deren Lage Resonanzfrequenz und Dämpfung wiedergibt, zu beschreiben, so divergiert $\overline{\omega \alpha''}$ und der Wert von $\overline{\omega \alpha''/\omega}$ hängt immer noch empfindlich von dieser Näherungsannahme ab. Dieses Ergebnis zeigt den relativ starken Einfluß des an die Resonanz nach größeren Frequenzen hin anschließenden „Schwanzes“ von α'' auf $\overline{\omega \alpha''}$. Daher sollte der mit $\omega \alpha''$ gebildete Frequenzmittelwert über der Resonanzfrequenz liegen:

$$\omega_r < \overline{\omega \alpha''} \leq v' k. \quad (11)$$

Die Schallgeschwindigkeit der kollektiven Anregungen sollte also v' nicht überschreiten.

Wesentlich andere Ergebnisse ergeben sich für ein Plasma. Nach (4.15) wird $J_c(k)$ und damit auch $Q(k)$ für $k \rightarrow 0$ durch den divergenten Term

$$J_c(k) \rightarrow Q v(k) = \frac{4 \pi \epsilon^2 Q}{m} \frac{1}{k^2} = \frac{\omega_p^2}{k^2} \quad (12)$$

bestimmt. Damit ist

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{M_3}{M_1}} = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k^2 Q(k)}{m}} = \frac{\hbar \omega_p}{2} \quad (13)$$

auch für $k=0$ endlich. ω_p ist die Plasmafrequenz. An die Stelle von (5) tritt nun

$$k_B T \leq \lim \bar{\epsilon} \leq k_B T + \frac{1}{2} \hbar \omega_p, \quad \bar{\epsilon} = \overline{\epsilon(\omega, T)}. \quad (14)$$

$\bar{\epsilon} = N_2/M_1$ ist nach [I (2.13)] die mit den Oszillatorstärken gemittelte Oszillatorenenergie $\epsilon(\omega, T)$, die im Zusammenhang mit dem FDT [I (1.13)] eingeführt und definiert wurde. Die in I gegebene Ab-

⁸ A. A. ABRIKOSOW u. J. M. KHALATNIKOW, Repts. Progr. Physics **22**, 329 [1959].

schätzung für $\coth \nu$ bedeutet für $\varepsilon(\omega, T)$

$$\left\{ k_B T \right\} \leq \varepsilon(\omega, T) \leq k_B T + \hbar \omega/2, \quad (15)$$

$\hbar \omega/2$ ist die quantenmechanische Nullpunktsenergie. Der Vergleich dieser rein mathematischen, von den Stabilitätsbedingungen unabhängigen Beziehung mit (12) macht deutlich, daß für $k \rightarrow 0$ das Auftreten einer scharfen Resonanz in α_k'' bei der Plasmafrequenz ω_P mit der Stabilitätsbedingung verträglich ist, und zwar unabhängig von der Temperatur. Natürlich kann daraus noch nicht geschlossen werden, daß diese Möglichkeit auch verwirklicht wird. Das ist aber bekanntlich der Fall. Das Stabilitätskriterium zeigt deutlich, daß die anomale Reichweite der COULOMB-Wechselwirkung eine notwendige Voraussetzung für das Auftreten von kollektiven Anregungen mit für $k \rightarrow 0$ endlicher Frequenz ist. Für $T=0$ lautet (14) einfach

$$\overline{\omega \alpha''} \leq \omega_P, \quad (16)$$

analog zu (10)

Um einen Widerspruch zu vermeiden, muß im COULOMB-Fall auch die für N_0/M_{-1} geltende Ungleichung für $k \rightarrow 0$ endliche Frequenzen zulassen. Das ist wegen (2) nur möglich, wenn $M_{-1} = \alpha_0$ für $k \rightarrow 0$ nach Null geht. Das Verschwinden der statischen Suszeptibilität für sehr große Wellenlängen kann direkt verstanden werden: α_0 kann aus der Forderung bestimmt werden, daß die Energieänderung bei Störung durch ein äußeres Potential minimal ist. Diese Energieänderung besteht aus zwei Anteilen: der Wechselwirkungsenergie der induzierten Dichteänderung mit dem äußeren Feld und der elektrostatischen Selbstwechselwirkung der induzierten Dichteänderung. Diese ist bei Beachtung von (1.9)

$$E_W = \frac{1}{2} \int d\tau \varrho_{\text{ind}} V_{\text{ind}} = \frac{1}{2} \frac{1}{U} \sum_{\mathbf{t} \neq 0} \frac{4\pi \epsilon^2}{k^2} |\bar{\varrho}_{\mathbf{t}}|^2. \quad (17)$$

Bleibt $\bar{\varrho}_{\mathbf{t}}$ für $k \rightarrow 0$ endlich, so divergiert E_W . Da die Wechselwirkungsenergie mit dem äußeren Feld endlich bleibt, folgt aus der Forderung minimaler Energie $\bar{\varrho}_{\mathbf{t}} \rightarrow 0$, also $\alpha_0 \rightarrow 0$.

Eine für $k \rightarrow 0$ endliche statische Suszeptibilität würde nach (1.10) zu einer wegen $\nu(k) \sim k^{-2}$ singulären reziproken Dielektrizitätskonstante führen. Das macht nochmals deutlich, daß dadurch eine unphysikalische, anomal starke Reaktion des Plasmas auf äußere Störungen großer Wellenlänge beschrieben würde.

Für Systeme im Grundzustand, $T=0$, gilt die erste Ungleichung von (1) in der vereinfachten Form

$$T=0: \quad 0 \leq \frac{\langle \varrho_{\mathbf{t}} \varrho_{-\mathbf{t}} \rangle}{N} \leq \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\alpha_0 M_1}{N^2}} \approx \frac{\hbar k/2}{\sqrt{m(\partial p / \partial \varrho)}}. \quad (18)$$

Dabei ist für kleine k wieder α_0 durch seinen Grenzwert (7) ersetzt worden. $\langle \varrho_{\mathbf{t}} \varrho_{-\mathbf{t}} \rangle$ geht mit k nach Null. Die Ungleichung (18) ist erstmals von ONSAGER abgeleitet worden. Eine auf ONSAGER zurückgehende, von vornherein auf Systeme im Grundzustand beschränkte Ableitung wurde von PRICE⁹ veröffentlicht. Eine etwas andere Ableitung gaben HUANG und KLEIN⁶ durch eine geschickte Kombination der Momente M_{-1} , N_0 und M_1 .

Für $T \neq 0$ kann man in der ersten Ungleichung von (1) nicht den zu k proportionalen Term beibehalten und gleichzeitig α_0 neben $k_B T$ durch den Grenzwert (7) ersetzen. Das ist der Grund für die Beschränkung auf den Grundzustand in (18).

Bei Beachtung von (7) liefert die dritte Ungleichung von (1) im Grenzfall $k \rightarrow 0$ ein nicht-triviales Resultat, nämlich

$$\left(\frac{\partial p}{\partial \varrho} \right)_T \leq Q_0 = 2 \frac{E_{\text{kin}}}{N} + J_0. \quad (19)$$

Diese Ungleichung ist der Stabilitätsbedingung des in¹⁰ untersuchten Volumentests sehr ähnlich. Diese Ähnlichkeit tritt besonders klar hervor, wenn man J_0 von (3.11) in der Form

$$J_0 = \frac{1}{5N} \left\langle \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 V - \frac{1}{3} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) V \right\rangle, \quad x \frac{\partial}{\partial x} \equiv \sum_n r_n \frac{\partial}{\partial r_n} \quad (20)$$

darstellt. Dabei hat, abweichend von allen anderen Gleichungen dieser Arbeit, x die in¹⁰ benutzte symbolische Bedeutung. Eliminiert man in (19) noch die kinetische Energie mittels des Virialsatzes, so erhalten die beiden zu vergleichenden Ungleichungen die Form

Volumentest:

$$\left\langle \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 V/N \right\rangle + 15 \frac{p}{\varrho} \geq 9 \left(\frac{\partial p}{\partial \varrho} \right)_S - 2 \left\langle \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) V/N \right\rangle \quad \alpha''\text{-Test:} \quad (21)$$

$$\left\langle \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 V/N \right\rangle + 15 \frac{p}{\varrho} \geq 5 \left(\frac{\partial p}{\partial \varrho} \right)_T - \frac{14}{3} \left\langle \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) V/N \right\rangle$$

⁹ P. J. PRICE, Phys. Rev. **94**, 257 [1954].

¹⁰ R. LENK, Z. Naturforschg. **21 a**, 1547 [1966].

Die adiabatische Kompressibilität ist immer größer als die isotherme, vgl. die Beziehung (1.22) aus ¹⁰. Ist außerdem $\langle (x \partial/\partial x) V/N \rangle$ positiv, so ist die rechte Seite der Volumentest-Ungleichung sicher größer als die rechte Seite der α'' -Test-Ungleichung. Der Volumentest wäre dann stärker als der neue α'' -Test. Für Wechselwirkungspotentiale mit abstoßendem Kern ist allerdings gerade $\langle (x \partial/\partial x) V/N \rangle < 0$ zu erwarten. Denn $-(r dv/dr)$ stellt eine Funktion mit einem gegenüber v in der Ausdehnung wesentlich vergrößertem Abstoßungsbereich dar, der bei Mittelung mit der zu v gehörenden Paarverteilung zu einem positiven Erwartungswert von $-\left(x \frac{\partial}{\partial x}\right) \frac{V}{N}$ führen sollte. In diesem Fall kann von vornherein nicht entschieden werden, welche der beiden in (21) angegebenen Bedingungen stärker ist. Beim Vergleich ist zu beachten, daß der in ¹⁰ begründete Volumentest seiner allgemeinen Herleitung entsprechend auch für mehrkomponentige Systeme mit beliebigen Wechselwirkungen gilt, während der α'' -Test in der angegebenen Form auf einkomponentige Systeme beschränkt und auf Plasmen mit Untergrund nicht anwendbar ist.

6. Untere Grenzen der Dichteschwankungen

Für α_0 und N_2 existieren, außer für den im vorigen Abschnitt untersuchten Grenzfall $k \rightarrow 0$, keine brauchbaren Ausdrücke. Insbesondere lassen sich diese beiden Momente nicht auf die Paarverteilung zurückführen. Diese Größen müssen also in systematischer Weise aus dem System der in ¹ abgeleiteten Ungleichungen, zu denen noch die in Abschnitt 3 erwähnte untere Grenze für N_2 hinzukommt, eliminiert werden. Ein solches systematisches Verfahren, das hier nicht dargestellt wird, liefert zunächst einige überflüssige, weil auf andere zurückführbare Beziehungen. Die beiden einzigen voneinander unabhängigen Ungleichungen folgen aus (5.1), wenn man aus der ersten und dritten α_0 eliminiert. Die zweite liefert nichts, die vierte ist ohne weitere Umformungen geeignet. Insgesamt sind damit für N_0 zwei verschiedene untere Grenzen gegeben, nämlich

$$\begin{aligned} \text{(A):} \quad \frac{N_0}{N} &\geq k_B T \frac{M_1^2}{N M_3} = \frac{k_B T}{Q}, \\ \text{(B):} \quad \frac{N_0}{N} &\geq \frac{\hbar}{2} \frac{M_1}{N} \sqrt{\frac{M_1}{M_3}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_k}{Q}}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\varepsilon_k \equiv \hbar^2 k^2 / 4m.$$

Die Größe $Q(k)$ wurde in (3.12) definiert.

Beim Übergang zu klassischen Systemen bleibt nur die Ungleichung (A) nicht-trivial. Sie lautet dann ausführlich

$$\hbar \rightarrow 0: \quad \frac{\langle Q_t Q_{-t} \rangle}{N} \geq \frac{k_B T}{3 k_B T + J(k)}, \quad (2)$$

wobei der Gleichverteilungssatz benutzt wurde. Beim idealen Gas wird die linke Seite 1 nach (2.2), die rechte Seite erhält mit $J=0$ den Wert $1/3$, (2) ist also erfüllt. Für $k \rightarrow 0$ erhält man einfach die klassische Form der schon im vorigen Abschnitt diskutierten Kompressibilitäts-Ungleichung (5.19). Für große k kann $J(k)$ neben $3 k_B T$ vernachlässigt werden, und (2) vereinfacht sich zu

$$\begin{aligned} k \rightarrow \infty: \quad \frac{1}{N} \langle Q_t Q_{-t} \rangle &\geq \frac{1}{3}, \\ \frac{Q_2(k)}{Q} = \frac{u_2(k)}{Q} &\geq -\frac{2}{3}. \end{aligned} \quad (3)$$

Da andererseits die FOURIER-Transformierte der Paarverteilung für große k verschwindet, enthält (3) nur eine triviale Aussage. Die wesentlichen Einschränkungen liefert (2) für kleine k -Werte, insbesondere für $k \rightarrow 0$.

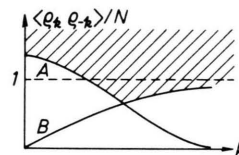


Abb. 1.

Bei quantenmechanischen Systemen liefert die eben im klassischen Grenzfall diskutierte Ungleichung (A) für $k \rightarrow 0$ wieder die Kompressibilitäts-Ungleichung (5.19). Für große k gilt $Q \cong \varepsilon_k$, so daß $k_B T/Q$ mit k^{-2} verschwindet. Die untere Grenze für N_0/N hat quantitativ den Verlauf der Kurve A der Abb. 1. Die durch (B) gegebene Grenzkurve beginnt linear mit k und geht asymptotisch gegen 1, genauer

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_k}{Q}} \cong \sqrt{\frac{\varepsilon_k}{\varepsilon_k + 2 E_{\text{kin}}/N}} \cong 1 - \frac{E_{\text{kin}}}{N \varepsilon_k}, \quad (4)$$

daraus folgt

$$k \rightarrow \infty: \quad -\frac{Q_2(k)}{Q} = -\frac{u_2(k)}{Q} \leq \frac{4 m E_{\text{kin}}}{\hbar^2 N} \frac{1}{k^2}. \quad (5)$$

Der entsprechende qualitative Verlauf der Grenzkurve B ist ebenfalls aus der Abbildung zu entnehmen. Man erkennt, daß A für kleine k und B für große k die schärfere Bedingung darstellt. Das

erlaubte Gebiet ist in der Abbildung schraffiert. Die beiden Ungleichungen (A) und (B) sind voneinander unabhängig. Sie geben untere Grenzen für die Schwankungen der Teilchendichte, die bei (A) durch die endliche Temperatur des Mediums (thermische Fluktuationen) und bei (B) durch Quanteneffekte (Quantenfluktuationen) bedingt sind.

Eine Sonderstellung nimmt wieder das Plasma mit Untergrund ein. Wegen der in Abschnitt 4 diskutierten Divergenz von $J_c(k)$ für $k \rightarrow 0$ geben beide Ungleichungen Grenzkurven, die wie in Abb. 2 dargestellt durch den Nullpunkt gehen und dort mit einem quadratischen Verlauf beginnen:

$k \rightarrow 0$:

$$(A): \frac{k_B T}{Q} \approx \frac{k_B T}{J_c(k)} \approx \frac{k_B T}{4 \pi \epsilon^2 Q} k^2 \equiv \lambda_D^2 k^2, \quad (6)$$

$$(B): \sqrt{\frac{\epsilon_k}{Q}} \approx \frac{\hbar k^2}{2 \sqrt{4 \pi \epsilon^2 Q m}} \equiv A^2 k^2.$$

λ_D ist gerade der DEBYE-Radius des klassischen Plasmas. A kann mit dem Abschirmradius im THOMAS-FERMI-Modell in Verbindung gebracht werden. Das elektrostatische Feld einer ruhenden Ladung wird in einem FERMI-Gas mit COULOMB-Wechselwirkung abgeschirmt. Der zugehörige Abschirmradius, vgl. etwa ⁷, ist

$$\lambda_{TF} = \frac{\hbar k_F}{\sqrt{3}} \frac{1}{\sqrt{4 \pi \epsilon^2 Q m}} \quad (7)$$

$\hbar k_F$ ist der FERMI-Grenzpuls. Aus (6) und (7) folgt

$$A^2 = (\sqrt{3}/2) \lambda_{TF} \lambda_F, \quad \lambda_F \equiv 1/k_F. \quad (8)$$

Im Quantenplasma tritt also die Länge $\sqrt{\lambda_{TF} \lambda_F}$ an die Stelle des DEBYE-Radius.

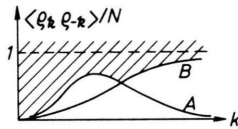


Abb. 2.

Wegen der in (4.9) formulierten Normierung von u_2/Q auf -1 beginnt auch $\langle \varrho_t \varrho_{-t} \rangle$ mit einem zu k^2 proportionalen Term, nämlich

$$k \rightarrow 0: \quad \frac{1}{N} \langle \varrho_t \varrho_{-t} \rangle = \int \frac{d\tau}{Q} u_2 [e^{i\tau t} - 1] \quad (9)$$

$$\approx \frac{k^2}{6} \int \frac{d\tau}{Q} (-u_2) \tau^2 \equiv \frac{1}{6} \overline{r^2} k^2.$$

Die beiden Ungleichungen (A) und (B) machen also im COULOMB-Fall bei $k \rightarrow 0$ Aussagen über die Reich-

weite der Paarkorrelationen, für die $\overline{r^2}$ offensichtlich ein Maß ist. Es gelten die Ungleichungen

$$\frac{1}{6} \overline{r^2} \geq \lambda_D^2, \quad \frac{1}{6} \overline{r^2} \geq A^2. \quad (10)$$

Für ein klassisches Plasma müssen also Korrelationen mindestens über Entfernungen von der Größenordnung des DEBYE-Radius erfolgen. Dieser tritt hier zwanglos und unabhängig von einem speziellen Näherungsverfahren als charakteristische Länge auf. Die entsprechende Länge $\sqrt{\lambda_{TF} \lambda_F}$ im Quantenplasma stellt das geometrische Mittel zweier Korrelationslängen dar. λ_F gibt die Reichweite der durch Austauscheffekte bereits im idealen Gas bewirkten Korrelationen. λ_{TF} gibt die Reichweite von Korrelationen auf Grund der COULOMB-Wechselwirkung, ohne Berücksichtigung von Austauscheffekten.

Bei großen k ändert sich durch die langreichweitigen COULOMB-Wechselwirkungen qualitativ nichts. Die Abb. 2 zeigt den Verlauf der Grenzkurven beim Plasma für den Fall hoher Temperaturen, in dem A für $k \rightarrow 0$ die stärkere Bedingung darstellt. Bei kleinen Temperaturen liegt A für $k \rightarrow 0$, und damit wahrscheinlich für alle k , unterhalb B.

Die in (10) enthaltenen Aussagen sollen noch in ihrer Abhängigkeit von Temperatur und Dichte des Plasmas untersucht werden. Definiert man durch $Q = r_0^{-3}$ den mittleren Teilchenabstand r_0 , so gilt zunächst

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T}{4 \pi \epsilon^2}} r_0^{3/2} \sim \frac{r_0^{3/2}}{L^{1/2}}; \quad L \equiv \epsilon^2 / k_B T. \quad (11)$$

L ist der kleinste Abstand, bis auf den sich zwei gleich geladene Teilchen mit der thermischen Energie $k_B T$ nähern können (zentraler Stoß). Andererseits ist

$$A = \left[\frac{(\hbar/2)^2}{4 \pi \epsilon^2 m} r_0^3 \right]^{1/4} \sim a_0^{1/4} r_0^{3/4}; \quad a_0 \equiv \hbar^2 / m \epsilon^2. \quad (12)$$

a_0 ist der BOHRsche Radius. Bis auf weggelassene Faktoren der Ordnung 1 lauten also die beiden Ungleichungen (10)

$$\sqrt{\overline{r^2}} \gtrsim r_0^{3/2} / L^{1/2}, \quad \sqrt{\overline{r^2}} \gtrsim a_0^{1/4} r_0^{3/4}. \quad (13)$$

a_0 ist temperaturunabhängig, L ist nach (11) zu T^{-1} proportional. Das Verhältnis der beiden Längen a_0 und L stimmt nach

$$a_0 / L = k_B T / (\epsilon^2 / a_0) \quad (14)$$

mit dem Verhältnis von thermischer Energie $k_B T$ und atomarer Energieeinheit ϵ^2 / a_0 überein. Die Abb. 3 zeigt die Grenzen (13) als Funktion von r_0

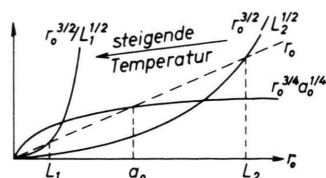


Abb. 3.

für zwei verschiedene Temperaturen. Bei der höheren ist $a_0 > L_1$, bei der tieferen $a_0 < L_2$.

Die zweite Bedingung von (13) schließt für $e^2 \rightarrow 0$ den Übergang zur Korrelationsreichweite $\lambda_F \sim r_0$ des idealen Gases aus. Das ist völlig analog zu dem Verhalten des Schwankungsquadrats $(\Delta N)^2$ beim Plasma, das in Abschnitt 4 diskutiert wurde. Ebenso wie $(\Delta N)^2$ ist auch \bar{r}^2 eine integrale Größe, deren Wert gar nichts über die Stärke der Korrelationen aussagt, so daß die Paarverteilung selbst durchaus in die des idealen Gases übergehen kann.

Zur Ableitung der eben diskutierten Ergebnisse wurde nur das Verhalten von $\varrho_2(k)$ für $k \rightarrow 0$ benutzt, vgl. (9). In der Grenze $k \rightarrow 0$ wird aber das Verhalten des Systems vollständig durch den scharfen Plasmapol im Imaginärteil des Suszeptibilität bestimmt. Die Existenz dieses Plasmapols ist eine bekannte Folge der als „random phase approximation“ bezeichneten, in den Arbeiten von BOHM und PINES¹¹ begründeten Näherungsmethode. Diese Näherung wird in der Grenze $k \rightarrow 0$ für beliebige Dichten und Temperaturen exakt, wie man durch eine Diskussion der Bewegungsgleichungen für die FOURIER-Komponenten ϱ_t des Dichteoperators zeigen kann. Diese Überlegungen, wie auch die Grundlagen der erwähnten „random phase approximation“, werden zum Beispiel von BROUT und CARRUTHERS⁷ referiert.

In den Ausgangsgleichungen von I gelten nun für scharfe Resonanzverteilungen die Gleichheitszeichen. In den Abschätzungen für $\coth \nu$, Gln. [I (3.5)] und [I (3.6)], gelten Gleichheitszeichen für $T=0$ und für $T \rightarrow \infty$. Eine Rekapitulation der zur Ableitung der beiden Ungleichungen (A) und (B) benutzten Schritte zeigt, daß (A) für $T \rightarrow \infty$ und (B) für $T=0$ beim Plasma für $k \rightarrow 0$ als Gleichungen gelten. Die beim Plasma tatsächlich auftretenden Werte liegen also für den extremen Quantengrenzfall und für den klassischen Grenzfall auf den entsprechenden Grenzkurven. Die beiden Beziehung (10) gelten daher als Gleichungen für das klassische Plasma bzw. das Plasma im Grundzustand.

¹¹ D. BOHM u. D. PINES, Phys. Rev. **85**, 338 [1952].

Ist die Temperatur so niedrig, daß $L > a_0$, mit (14) also $k_B T < \epsilon^2/a_0$ gilt, so liegt ein Teil des erlaubten Gebiets der Abb. 3 unterhalb der Geraden r_0 . Das gilt insbesondere bei der Temperatur $T=0$ für alle

$$r_s \equiv r_0/a_0 \gtrsim 1. \quad (15)$$

r_s ist der übliche dimensionslose Parameter eines Elektronengases im Grundzustand. Nach der obigen Diskussion liegt der tatsächliche Wert von $\sqrt{r^2}$ bei $T=0$ auf der Grenzkurve $a_0^{1/4} r_0^{3/4}$. $\sqrt{r^2}$ wird also bei kleinen Dichten wesentlich kleiner als r_0 . Eine einfache Überlegung zeigt, daß ein solches Verhalten zusammen mit der Normierung (4.9) von u_2/ϱ auf -1 nicht mit einem monotonen Verlauf (bzw. unwesentlichen Oszillationen) von u_2 verträglich ist: $-u_2$ kann maximal den Wert ϱ^2 annehmen, da ϱ_2 positiv bleiben muß. Bei (fast) monotonem Verlauf von u_2 folgt daraus

$$-\int \frac{d\tau}{\varrho} u_2 \lesssim \varrho [\bar{r}^2]^{3/2} = (\bar{r}^2/r_0^2)^{3/2}. \quad (16)$$

Dieser Ausdruck kann nicht auf dem Wert 1 gehalten werden, wenn $\sqrt{r^2}$ klein gegen r_0 wird. Die Voraussetzung einer (fast) monotonen Paarverteilung muß also bei kleinen Dichten aufgegeben werden. Starke Oszillationen in ϱ_2 beschreiben eine gitterähnliche Nahordnung. (Eine echte Fernordnung ist natürlich ebenfalls möglich.) Aus den Stabilitätsbedingungen ergibt sich also ein deutlicher Hinweis auf einen Phasenübergang. Tatsächlich zeigt das Elektronengas bei kleinen Dichten eine Gitterstruktur, wie durch die Arbeiten von FUCHS und WIGNER¹² gezeigt wurde.

Die qualitativen Schlüsse bleiben auch bei endlichen Temperaturen richtig. Sobald die beiden Bedingungen $k_B T \ll \epsilon^2/a_0$ und $r_0 \gg a_0$ erfüllt sind, kann die Paarverteilung keinen monotonen Verlauf mehr haben. Eine genauere Abschätzung der Parameter des vermuteten Phasenübergangs ist hier nicht möglich.

Zusammenfassung der Ergebnisse

1. Bei Systemen mit Wechselwirkungen endlicher Reichweite kann im Grenzfall großer Wellenlängen die statische Suszeptibilität für longitudinale Störungen auf die Kompressibilität des Systems zurück-

¹² K. FUCHS, Proc. Roy. Soc. London **151**, 585 [1935]. — E. P. WIGNER, Trans. Faraday Soc. **34**, 678 [1938].

geführt werden. Dieser Zusammenhang ist plausibel und wurde bereits in der Literatur benutzt.

Unter den gleichen Voraussetzungen (große Wellenlängen und endliche Reichweite) erfolgen bei Systemen im Grundzustand oder bei schwacher Anregung die Dichteschwankungen nur mit sehr kleinen Frequenzen. Daher sind für die elementaren Anregungen des Systems, soweit sie mit Dichteschwankungen verknüpft sind, nur solche Dispersionsrelationen möglich, bei denen die Resonanzfrequenz mit der Wellenzahl nach Null geht.

Zwischen Kompressibilität, kinetischer Energie und einem Wechselwirkungsintegral besteht eine allgemeine Ungleichung, ähnlich einer in ¹⁰ betrachteten.

2. Bei beliebigen Wellenlängen werden zwei untere Grenzen für die Amplitudenquadrate der Dichteschwankungen abgeleitet. Die eine fordert minimale Quantenfluktuationen, die andere minimale thermische Fluktuationen. Die thermische Bedingung ist für große Wellenlängen, die Quantenbedingungen für kleine Wellenlängen wesentlich.

3. Beim Plasma mit homogenem Untergrund führt die Kombination von festgehaltenem Untergrund und anomaler Reichweite der COULOMB-Wechselwirkung zu anomal kleinen Schwankungen der Teilchenzahl. Diese Schwankungen sind auf eine Oberflächenschicht beschränkt. Das Schwankungsquadrat ist von der Kompressibilität praktisch unabhängig. Die Grenzübergänge zu einem unendlich großen System und zu verschwindender Wechselwirkung sind nicht vertauschbar, so daß bei einem unendlich großen System der Grenzübergang $e^2 \rightarrow 0$ nicht zum Schwankungsquadrat des idealen (Quanten-)Gases führt. Die Paarverteilung selbst kann dennoch in die des idealen Gases übergehen.

In der wechselwirkungsabhängigen Summenregel tritt beim Plasma ein Zusatzterm auf, der für große Wellenlängen divergiert. Dieser Term ermöglicht das Auftreten von Plasmaschwingungen ohne Verletzung der Stabilitätsbedingungen.

Für klassische und quantenmechanische Plasmen werden Mindestwerte für die Reichweite der Paarrelationen abgeleitet. Für die Mindest-Reichweite ist im klassischen Fall der DEBYE-Radius maßgebend, im quantenmechanischen Fall das geometrische Mittel aus Abschirmlänge und mittlerem Teilchenabstand.

Im extremen Quantengrenzfall und im klassischen Grenzfall müssen die tatsächlichen Werte der Korre-

lations-Reichweite mit den berechneten Grenzen zusammenfallen. Daraus folgt, daß die Paarverteilung eines Plasmas bei niedrigen Temperaturen und kleinen Dichten keinen monotonen Verlauf haben kann. Das ist ein deutlicher Hinweis auf einen Phasenübergang zu einer Struktur mit gitterartiger Nahordnung.

Anhang: Das Integral $I(k)$

Es soll das in (3.9) definierte Integral

$$\begin{aligned} Q k^2 J(k) &= \int d\tau \varrho_2 [1 - \cos kx] \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \\ &= \int d\tau \varrho_2 [1 - \cos kr\zeta] \left[\frac{v'}{r} + \zeta^2 \left(v'' - \frac{v'}{r} \right) \right] \end{aligned} \quad (1)$$

näher untersucht werden. Es wurde in (1) für eine Auswertung in Kugelkoordinaten geschrieben. ζ ist der Cosinus des Winkels zwischen \mathbf{f} und \mathbf{r} . Die Striche bedeuten Ableitungen nach r . Die Auswertung der Winkelintegration ersetzt die von ζ abhängigen Faktoren durch ihre Mittelwerte:

$$\begin{aligned} Q k^2 J(k) &= \int d\tau \varrho_2 \left\{ \left[\frac{v'}{r} + \frac{1}{3} \left(v'' - \frac{v'}{r} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. - \left[\frac{\sin kr}{kr} \frac{v'}{r} + \left(-\frac{\partial^2}{\partial (kr)^2} \frac{\sin kr}{kr} \right) \left(v'' - \frac{v'}{r} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

$(kr)^{-1} \sin kr$ beginnt bei $kr=0$ mit dem Wert 1, die negative zweite Ableitung davon beginnt mit $1/3$ und geht asymptotisch in $(kr)^{-1} \sin kr$ über. Beide Funktionen oszillieren für große k sehr rasch. Gegenüber der ersten eckigen Klammer in (2) haben die oszillierenden Terme der zweiten eckigen Klammer einen zusätzlichen Faktor r^{-1} bei großen Abständen, fallen also rascher ab. Aus allem, insbesondere aus den raschen Oszillationen bei großen k , ergibt sich, daß die oszillierenden Terme i. a. gegenüber den nicht oszillierenden bei großen k vernachlässigt werden können. Sie können nur dann von gleicher Größenordnung sein, wenn die unmittelbare Umgebung des Nullpunkts anomale Beiträge zum Integral liefert, da nur dort die oszillierenden Terme den anderen gleichwertig sind. Ein solches Verhalten kann nur entstehen, wenn die Funktionen $\varrho_2 v'/r$ und $\varrho_2 v''$ für $r \rightarrow 0$ singulär werden. Für Wechselwirkungspotentiale, die für kleine Abstände einen abstoßenden Kern, der nicht in einem scharfen „hard core“ zu bestehen braucht, besitzen, ist das sicher nicht der Fall. $r v'$ und $r^2 v''$ haben einen ähnlichen Verlauf wie v selbst, insbesondere sind sie für kleine r nicht stärker divergent und fallen für große r nicht schwächer ab als v . Nach Voraussetzung geht v für $r \rightarrow 0$ gegen ∞ . $\varrho_2(r)$ verschwin-

det dann etwa wie $\exp(-v/k_B T)$, $\varrho_2 v$ geht also gegen Null. Wegen des exponentiellen Charakters von ϱ_2 ändert auch ein zusätzlicher Faktor r^{-2} daran nichts.

In jedem Falle fällt also $J(k)$ für große k wie k^{-2} ab. Für Potentiale mit abstoßendem Kern tragen außerdem die oszillierenden Terme zum konstanten Faktor des k^{-2} -Verlaufs nichts bei.

In Abschnitt 3 wurde diskutiert, daß v für große r stärker als r^{-3} abfallen muß, damit der Grenzwert J_0 von $J(k)$ für $k \rightarrow 0$ existiert. Unter dieser Voraussetzung konvergieren die in (2) auftretenden Integrale bei großen Abständen erst recht.

Die in (3.10) vorgenommene Grenzwertbildung unter dem Integral ist gestattet, da die nach¹³ hierfür erforderlichen Bedingungen erfüllt sind. Denn $[1 - \cos kx]/k^2$ konvergiert in jedem endlichen Volumen gleichmäßig für alle endlichen k gegen $x^2/2$ und das Integral $J(k)$ ist beim Übergang zur Integration über den gesamten unendlichen Raum ebenfalls gleichmäßig konvergent für alle endlichen k . Die letzte Behauptung folgt einfach daraus, daß die oben diskutierte Konvergenz der Integrale bei großen Abständen auch bei $k \rightarrow 0$ nicht gestört wird. Der Grenzübergang $k \rightarrow 0$ bewirkt also nicht etwa eine „gefährliche“ Vergrößerung der Reichweite des Integranden.

In (4.15) wurde gezeigt, daß bei einem Plasma ein zu (1) ganz ähnliches Integral auftritt, in dem lediglich ϱ_2 durch u_2 und v durch das COULOMB-Potential ϵ^2/r ersetzt ist. u_2 nimmt bei $r=0$ einen endlichen Wert an. v'/r und v'' sind proportional zu r^{-3} . Daher sind alle Teilintegrale in dem (2) entsprechenden Ausdruck divergent. Die Subtraktion solcher divergenter Integrale ist keine mathematisch erlaubte Operation. Um zu einem konsistenten Subtraktionsschema zu gelangen, denke man an eine geeignete Abschneidevorschrift bei kleinen r . Das entspricht einer Änderung des Potentials bei kleinen Abständen. Entsprechend werden die allgemeinen Formeln mit beliebigem v zunächst beibehalten. Bei einem Integral der Form

$$\int d\tau f(r) \left[\frac{v'}{r} + \frac{1}{3} \left(v'' - \frac{v'}{r} \right) \right] = \int d\tau f(r) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \\ = \frac{1}{3} \int d\tau f(r) \Delta v \rightarrow -\frac{4\pi}{3} \epsilon^2 f(0) \quad (3)$$

¹³ G. M. FICHTENHOLZ, Differential- und Integralrechnung, Band II, § 518, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1964.

führt dann der Grenzübergang zum COULOMB-Potential wegen $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(r)$ zu dem angegebenen Wert für die Differenz der beiden unendlichen Integrale. Um auf diese Weise alle Divergenzen in (2) zu beheben, wird (2) umgeformt zu

$$\varrho k^2 J'(k) = \int d\tau u_2 \left\{ \left[\frac{v'}{r} + \frac{1}{3} \left(v'' - \frac{v'}{r} \right) \right] \left[1 - \frac{\sin kr}{kr} \right] \right. \\ \left. + \left(v'' - \frac{v'}{r} \right) \left[\frac{1}{3} \frac{\sin kr}{kr} + \frac{\partial^2}{\partial (kr)^2} \frac{\sin kr}{kr} \right] \right\}. \quad (4)$$

Hier kann nun der Übergang zum COULOMB-Potential durchgeführt werden. Dabei verschwindet der erste Term wegen (3) und es bleibt

$$\varrho k^2 J'(k) = \epsilon^2 \int \frac{d\tau u_2}{r^3} \left[\frac{\sin kr}{kr} - 3 \left(\frac{\sin kr}{kr} + 2 \frac{\cos kr}{(kr)^2} - 2 \frac{\sin kr}{(kr)^3} \right) \right]. \quad (5)$$

Der neue Integrand ist sowohl für $r \rightarrow 0$ wie für $r \rightarrow \infty$ völlig harmlos. Für $k \rightarrow 0$ geht die eckige Klammer gegen $\frac{2}{15} (kr)^2$, also gilt

$$J'(0) = \frac{2}{15} \int \frac{d\tau}{\varrho} u_2 \frac{\epsilon^2}{r} = \frac{4}{15} \frac{E_{\text{pot}}}{N}. \quad (6)$$

Das Verhalten für große k übersieht man am besten in der Form

$$\varrho k^2 J'(k) = 8\pi\epsilon^2 \int_0^\infty dx u_2(x/k) \cdot \left[3 \frac{\sin x}{x^4} - 3 \frac{\cos x}{x^3} - \frac{\sin x}{x^2} \right]. \quad (7)$$

Hier kann dann $u_2(x/k)$ durch $u_2(0)$ ersetzt werden. Das restliche Integral kann durch partielle Integration ausgewertet werden. Mit

$$3 \int dx \frac{\sin x}{x^4} = -\frac{\sin x}{x^3} - \int dx \frac{\cos x}{x^3} \quad (8)$$

$$\text{und} \quad 2 \int dx \frac{\cos x}{x^3} = -\frac{\cos x}{x^2} - \int dx \frac{\sin x}{x^2} \quad (9)$$

erhält man für das gesuchte Integral den Wert $1/3$. Also hat $J'(k)$ den asymptotischen Verlauf

$$J'(k) \cong \frac{2}{3} \frac{4\pi\epsilon^2}{k^2} \frac{u_2(0)}{\varrho} = \frac{2}{3} \frac{u_2(0)}{\varrho} v(k), \quad (10)$$

der zu der im Text angegebenen Gl. (4.16) führt.

Herrn Prof. Dr. MACKE danke ich sehr herzlich für sein förderndes Interesse und die großzügigen Arbeitsmöglichkeiten, die er mir am Institut für Theoretische Physik der Technischen Universität Dresden gewährt hat.