

As to the errors of the absolute values of the refractive index one must realize the difficulty to give them within $\pm 3 \cdot 10^{-5}$ even if the method used is capable of such an accuracy. The reason for this difficulty is that there does not exist any really good analytical method to measure the purity of the salt in the molten state. A refractive index determination is of course such a method but in order to give the refractive index of an "absolutely" pure melt, it would be necessary to try a large number of different purification techniques. This was not done because it was outside the scope of this investigation but it seems to be a rather urgent work. All possible precautions were taken not to contaminate the melt and as mentioned above they were all clear and colorless and no attack of any kind could be seen

either on the cell walls or on the quartz. Another difficulty is to measure the temperature with sufficient accuracy which means that the reading should be correct to ± 0.1 degrees. This may sometimes be difficult in high temperature work unless a special calibration of the thermocouples is performed.

As has been shown above a systematic investigation of a large number of molten salts with a method of high precision would give interesting results from many points of view and would not only be of importance when using optical techniques to study transport properties.

Acknowledgement

This investigation is supported by the Swedish Technical Research Council and Magnus Bergvalls Stiftelse.

Quantenstatistik eines Vielteilchensystems mit Coulomb-Wechselwirkungen

(Methode der reduzierten Dichtematrizen)

D. KREMP und G. SCHMITZ

Institut für Theoretische Physik der Universität Rostock

(Z. Naturforschg. 22 a, 1366—1372 [1967]; eingegangen am 2. Mai 1967)

Aus der BOGOLJUBOW-Hierarchie für die reduzierten Dichteoperatoren wird die Zweiteilchen-Dichtematrix bis zur Ordnung e^2 für ein System geladener Teilchen im Gleichgewicht berechnet. Mit dieser Funktion wird dann für den Fall $n \lambda^3 \ll 1$ die Korrelationsenergie und die freie Energie bis zur Ordnung e^4 bestimmt.

Ein wichtiges Problem in der Theorie der Vielteilchensysteme ist die Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen den Teilchen bei der Berechnung der Mittelwerte dynamischer Größen und den thermodynamischen Funktionen, d. h., die Erfassung der Korrelationseffekte. Dieses Problem führt bei der Behandlung von Systemen mit COULOMB-Wechselwirkungen wegen des weitreichenden Charakters der COULOMB-Wechselwirkungen und den daraus resultierenden Divergenzen zu besonderen Schwierigkeiten.

Der Formalismus der Quantenstatistik gibt im Prinzip zwei Möglichkeiten zur Berechnung von thermodynamischen Funktionen. Die erste Methode besteht in der Berechnung der thermodynamischen Funktionen über die Zustandssumme. Methoden zur

Auswertung der Zustandssumme wurden von MATSUBARA¹ und von MONTROLL und WARD² entwickelt, unter Benutzung der in der Quantenelektrodynamik entwickelten Störungstheorie und des WICKSchen Theorems.

An die Methode von MATSUBARA schließt die Arbeit von WEDENOW und LARKIN³ an. In dieser Arbeit wird unter der Bedingung $n \lambda^3 \ll 1$ und $e^2/kT \lambda \ll 1$ die freie Energie mit Berücksichtigung von Austauschereffekten bestimmt.

Die Methode von MONTROLL und WARD wurde von DE WITT⁴ weiter entwickelt und auf Systeme mit COULOMB-Wechselwirkungen angewandt. Von DE WITT wurde ebenfalls die freie Energie unter den obigen Bedingungen, aber ohne Austauschereffekte, berechnet.

Neben den quantenfeldtheoretischen Methoden

¹ T. MATSUBARA, Progr. Theor. Phys. 14, 351 [1956].

² E. MONTROLL u. J. WARD, Phys. Fluids 1, 55 [1958].

³ A. WEDENOW u. A. LARKIN, Zh. Eksperim. Teor. Fiz. USSR 36, 1133 [1959].

⁴ H. DE WITT, J. Math. Phys. 3, 1216 [1962].



wurde von MORITA⁵ eine andere Methode zur Berechnung der Zustandssumme vorgeschlagen. In dieser Methode wird durch Einführung eines Quantenpotentials das quantenstatistische Problem auf ein klassisches Problem transformiert. Das Problem besteht dann in der näherungsweise Berechnung des Quantenpotentials. Dieses Potential wurde zuerst von KELBG⁶ bis zur Ordnung e^2 angegeben. Kürzlich konnten EBELING, HOFFMANN und KELBG dieses Potential mit Berücksichtigung von Austauschwirkungen bis zur Ordnung e^4 bestimmen⁷. Unter den o. a. Bedingungen wurde von EBELING, HOFFMANN und KELBG die freie Energie bis zur Ordnung e^4 mit Austauschtermen berechnet. Des weiteren sei noch auf die von JUCHNOWSKI und HETZHEIM⁸ entwickelte Methode der Auswertung der Zustandssumme mit kollektiven Variablen hingewiesen.

Die zweite grundsätzliche Methode benutzt als Informationsgröße zur Berechnung von Mittelwerten die reduzierten Dichteoperatoren. Eine Berechnung der Zweiteilchendichtematrix wurde von TRUBNIKOV und ELESIN⁹ über die Wellenfunktionen der COULOMB-Streuung durchgeführt. Mit der Zweiteilchendichtematrix berechneten TRUBNIKOV und ELESIN die freie Energie bis zur Ordnung e^4 mit Austauschwirkungen.

In dieser Arbeit sollen die reduzierten Dichtematrizen aus der BOGOLJUBOW-Hierarchie der Bewegungsgleichung berechnet werden. Die Hierarchie wird durch Störungsrechnung bis zur Ordnung e^2 gelöst. Über die Zweiteilchendichtematrix kann dann die Korrelationsenergie und die freie Energie mit Berücksichtigung der Austauschwirkungen bis zur Ordnung e^4 berechnet werden.

1. Allgemeiner Formalismus

Der Zustand eines Vielteilchensystems ist eindeutig durch den Dichteoperator ϱ_N bestimmt. ϱ_N genügt der v. NEUMANN-Gleichung

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varrho_N}{\partial t} = -[H_N, \varrho_N]. \quad (1)$$

Das hier betrachtete System ist ein Vielteilchensystem mit Paarwechselwirkungen, d. h.

$$H_N = H_N^0 + V_N; \quad H_N^0 = \sum_i p_i^2 / 2m; \quad V_N = \sum_{i < j} V_{ij}.$$

⁵ T. MORITA, Progr. Theor. Phys. Japan **22**, 757 [1959].

⁶ G. KELBG, Ann. Phys. Leipzig **12**, 219, 354 [1963].

⁷ W. EBELING, H. HOFFMANN u. G. KELBG, Beiträge aus der Plasmaphysik **7**, 233 [1967].

Es ist zweckmäßig, den Dichteoperator auf Eins zu normieren

$$\text{Sp}(\varrho_N) = \frac{1}{N!} \sum_{1 \dots s} \langle 1 \dots N | \varrho_N | N \dots 1 \rangle = 1.$$

$\langle 1 \dots N |$ sind Basisvektoren im HILBERT-Raum der N Teilchen. 1 ist eine Zusammenfassung von beliebigen Bahnvariablen und den Spinvariablen (z. B. \mathbf{k}_1, σ_1 mit $\hbar \mathbf{k}_1 = \mathbf{p}_1$). Erwartungswerte sind dann aus

$$\langle A_N \rangle = \text{Sp}(\varrho_N A_N)$$

zu berechnen. Da nun die meisten Operatoren vom additiven bzw. binären Typ sind, genügt es, die von BOGOLJUBOW und GUROW¹⁰ eingeführten Dichteoperatoren F_s zu kennen. F_s ist durch

$$L^{3s} \varrho_s = F_s = (L^{3s} / \binom{N}{s}) \text{Sp}(\varrho_N)_{(s+1 \dots N)} \quad (2)$$

$$= \frac{L^{3s}}{\binom{N}{s} (N-s)!} \sum_{s+1 \dots N} \langle s+1 \dots N | \varrho_N | N \dots 1+s \rangle$$

definiert. Der Faktor $\binom{N}{s}$ ist bedingt durch die Aufteilung der Spur in einen $N-s$ - und einen s -Teilchenkomplex. Damit bleibt die Normierung von ϱ_s auf eins und F_s auf L^{3s} erhalten. Hieraus folgt für den Mittelwert eines aus s -Teilchenoperatoren A_s aufgebauten Operators A_N

$$\langle A_N \rangle = \frac{\binom{N}{s}}{L^{3s}} \text{Sp}(A_s F_s) \quad (3)$$

$$= \frac{\binom{N}{s}}{L^{3s} s!} \sum_{1 \dots s} \langle 1 \dots s | A_s F_s | s \dots 1 \rangle.$$

Für kleine s gilt $\binom{N}{s} / L^{3s} = n^s / s! = N^s / L^{3s} s!$. L^3 ist das Volumen des Systems. Das Grundproblem der Theorie besteht also in der Bestimmung von F_s . F_s kann nun aus einer Hierarchie von Gleichungen berechnet werden. Zur Herleitung dieser Gleichungen aus (1) schreibt man für H_N

$$H_N = H_s + V_{s, N-s} + H_{N-s},$$

wo H_s der HAMILTON-Operator des s -Teilchenkomplexes ist und H_{N-s} der HAMILTON-Operator der $N-s$ Teilchen. Durch Spurbildung über $N-s$ Variable folgt dann in bekannter Weise die folgende Hierarchie von Gleichungen

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial F_s}{\partial t} = -[H_s, F_s] - n \text{Sp}[V_{s, s+1}, F_{s+1}], \quad (4)$$

$$V_{s, s+1} = \sum_i V_{i, s+1}.$$

⁸ H. HETZHEIM, Ann. Phys. Leipzig **19**, 380 [1967].

⁹ B. TRUBNIKOV u. V. ELESIN, Zh. Eksperim. Teor. Fiz. USSR **47**, 1283 [1964].

¹⁰ N. N. BOGOLJUBOW u. K. P. GUROW, Zh. Eksperim. Teor. Fiz. USSR **17**, 614 [1947].

Diese Gleichungen wurden 1947 von BOGOLJUBOW¹¹ angegeben. Sie sind jedoch in der Quantenstatistik des Gleichgewichtes nicht benutzt worden. Der Grund dafür ist, daß zur Kennzeichnung des Gleichgewichtes Randbedingungen zu erfüllen sind. An Stelle der Dichtematrizen werden daher gewöhnlich die zwei-zeitigen GREEN-Funktionen eingeführt. Für diese Funktionen lassen sich die Randbedingungen durch Spektraldarstellungen und Dispersionsrelationen günstig einführen und erfüllen.

In dieser Arbeit sollen die reduzierten Dichtematrizen im thermodynamischen Gleichgewicht aus (4) berechnet werden. Der Gleichgewichtszustand des Systems ist durch

$$Q_N = Q_N^{-1} e^{-\beta H_N}; \quad Q_N = \text{Sp}_{1 \dots N} e^{-\beta H_N}$$

bestimmt, d. h., die Gleichgewichtslösung der Hierarchie wird durch die Bedingung

$$V_s \rightarrow 0 \text{ so folgt } F_s \rightarrow F_s^0 = \frac{s!}{n^s Q_N^0} \text{Sp}_{s+1 \dots N} \exp(-\beta H_N^0)$$

festgelegt. Die Bedingung entspricht in der klassischen Statistik der Einführung einer MAXWELL-Verteilung in die BBGKY-Hierarchie. Es seien nun $E_{1 \dots N} = |1 \dots N\rangle \langle N \dots 1|$ die Projektionsoperatoren auf die Eigenräume von H_N^0 . Dann folgt aus der Spektraldarstellung von H_N^0

$$\frac{n^s}{s!} F_s^0 = Q_N^{0-1} \sum_{1 \dots N} \exp(-\beta E_N) \text{Sp } E_{1 \dots N};$$

$$E_N = \sum_{i=1}^N \varepsilon(k_i^2); \quad \varepsilon(k_i^2) = \hbar^2 k_i^2 / 2m.$$

Für ein System mit identischen Teilchen ist der Typ der Statistik zu beachten, d. h., an Stelle der $E_{1 \dots N}$ sind die $E_{1 \dots N}^\pm$ aus den symmetrischen bzw. antisymmetrischen Teilräumen zu benutzen. Dabei ist

$$|1 \dots N\rangle^\pm = \left[\frac{N!}{N! n_i!} \right]^{1/2} A^\pm |1 \dots N\rangle;$$

$$A^\pm = \frac{1}{N!} \sum_{P_N} \delta^\pm(P_N) P_N.$$

Wegen der Orthogonalität der $|1 \dots N\rangle$ folgt dann

$$\frac{n^s}{s!} F_s^{0\pm} = \frac{1}{Q_N^0} \sum_{1 \dots s} e^{-\beta E_s} E_{1 \dots s}^\pm \frac{1}{(N-s)!} \sum_{s+1 \dots N} e^{-\beta E_{N-s}} \cdot A$$

$$= \frac{1}{(2j+1)^s Q_N^0} \sum_{1 \dots s} E_{1 \dots s}^\pm (-\beta)^{-s} \frac{\delta^s Q_N^0}{\delta \varepsilon(k_1) \dots \delta \varepsilon(k_s)},$$

$$(A \equiv \langle s+1 \dots N | N \dots s+1 \rangle)$$

¹¹ N. N. BOGOLJUBOW, Lektionen über Quantenstatistik, Kiew 1949.

also ist

$$n^s F_s^{0\pm} = s! \sum_{1 \dots s} n(k_1) \dots n(k_s) E_{1 \dots s}^\pm. \quad (5)$$

Dabei ist $(2j+1)n(k) = 1/(e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \mp 1)$ für BOSE- oder FERMI-Teilchen. In der Impulsdarstellung folgt aus (5)

$$\langle 1 \dots s | F_s | s \dots 1 \rangle$$

$$= \frac{s!}{n^s} \sum_{P_s} n(k_1) \dots n(k_s) \langle P_s(1 \dots s) | s \dots 1 \rangle \delta_{P_s}. \quad (5a)$$

2. Berechnung der reduzierten Dichtematrizen durch Störungsrechnung

Zur Berechnung der F_s muß die Hierarchie durch Störungsrechnung abgebrochen werden. Es ist nahe-legend, für Systeme mit

$$n \lambda^3 \ll 1; \quad \lambda = \sqrt{2\pi \hbar^2 / m k T}$$

eine Entwicklung nach der Dichte zu versuchen. Eine Dichteentwicklung ist jedoch für Systeme mit COULOMB-Wechselwirkungen nicht möglich, da die Koeffizienten in einer solchen Entwicklung wegen des weitreichenden Charakters der COULOMB-Wechselwirkungen divergieren. Es gibt verschiedene Verfahren auch für COULOMB-Wechselwirkungen die Hierarchie abzurechnen¹². Für den Zweck der quantenstatistischen Rechnung ist es zweckmäßig, die von GUERNSEY¹³ für die klassische BBGKY-Hierarchie entwickelte Störungsrechnung zu benutzen. Zu diesem Zweck führen wir die Parameter ε und δ ein, die am Schluß der Rechnung wieder 1 gesetzt werden.

$$[H_s, F_s] + \varepsilon[V_s, F_s] + \delta n \text{Sp}[V_{s,s+1}, F_{s+1}] = 0. \quad (6)$$

Unter der Bedingung $e^2/kT\lambda \ll 1$ kann der Term mit ε als Störungsterm angesehen werden, während der Term mit δ wegen der großen Reichweite der COULOMB-Wechselwirkungen als endlich zu betrachten ist. Wir machen dann den folgenden Ansatz für F_s

$$F_s = \sum_{k,l} \delta^k \varepsilon^l F_s^{(kl)} = \sum_l \varepsilon^l \bar{F}_s^{(l)}, \quad \bar{F}_s^{(l)} = \sum_k \delta^k F_s^{(kl)}. \quad (7)$$

Die vollständige Summation über δ^k beseitigt die COULOMB-Divergenzen und entspricht der Abschir-

¹² N. N. BOGOLJUBOW, Probleme der dynamischen Theorie in der statistischen Physik, Moskau 1946. — G. SCHMITZ, Phys. Letters **21**, 174 [1966].

¹³ R. GUERNSEY, Phys. Fluids **7**, 792 [1964].

mung des COULOMB-Potentials. Auf diese Weise entsteht eine konvergente Störungsreihe in ϵ . F_s wird als abgeschirmte Verteilung bezeichnet. Durch den Ansatz (7) zerfällt die Hierarchie in

$$[H_s, F_s^{(kl)}] + [V_s, F_s^{(kl-1)}] + \text{Sp}[V_{s, s+1}, F_s^{(k-1, l)}] = 0. \quad (8)$$

Diese Gleichungen sind der Ausgangspunkt der Störungsrechnung.

a) Berechnung von $F_s^{(0)}$: Für $F_s^{(0)}$ entsteht aus

(6) die Gleichung

$$[F_s^{(0)}, H_s^{(0)}] = 0,$$

die wegen obiger Bedingung die Lösung

$$F_s^{(0)} = \frac{s!}{n^s} \sum_{1 \dots s} n(k_1) \dots n(k_s) E_{1 \dots s} \quad (9)$$

besitzt.

b) Berechnung von $F_s^{(0,1)}$: Nach Gl. (6) folgt $F_s^{(0,1)}$ aus

$$[H_s, F_s^{(0,1)}] + [V_s, F_s^{(0)}] = 0.$$

Es ist zweckmäßig, diese Gleichung in der k -Darstellung zu lösen:

$$(E_s - E_{s'}) \langle 1 \dots s | F_s^{(0,1)\pm} | s' \dots 1' \rangle = - \langle 1 \dots s | [V_s, F_s^{(0)\pm}] | s' \dots 1' \rangle$$

oder mit Gl. (9)

$$\langle \dots | F_s^{(0,1)-} | \dots \rangle = \frac{s!}{n^s} \frac{\prod n(k_i) - \prod n(k'_i)}{E_s - E_{s'}} \langle 1 \dots | V_s A_s^- | s' \dots 1' \rangle \quad (10)$$

mit

$$\langle \dots | V_s A_s^- | \dots \rangle = \sum_{i < j} \sum_{P_s} \delta_{P_s} P_s \prod_{r \neq j, i} \delta(\mathbf{k}_r - \mathbf{k}'_r) V(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}'_i) \delta(\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}'_i - \mathbf{k}'_j) \langle \sigma_1 \dots \sigma_s | \sigma'_1 \dots \sigma'_s \rangle,$$

$$V(\mathbf{l}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp\{i \mathbf{l} \mathbf{q}\} V(q) d\mathbf{q} = \frac{e_i e_j}{2\pi^3 l^2}.$$

Aus $\langle 1 \dots s | F_s^{(0,1)-} | s \dots 1 \rangle$ ist nun zur Vermeidung der COULOMB-Divergenzen in der Theorie die abgeschirmte Dichtematrix $\langle 1 \dots s | \bar{F}_s^{(1)-} | 1 \dots s \rangle$ zu berechnen. Zur Vereinfachung der Bestimmung von $\langle \bar{F}_s^{(1)-} | \dots \rangle$ beachten wir die folgenden Punkte, die sich bei der Berechnung von Mittelwerten der dynamischen Größen herausstellen:

a) $\langle F_s^{(0,1)} | \dots \rangle$ kann in einen klassischen und einen quantenmechanischen Anteil aufgespalten werden, d. h.,

$$\langle F_s^{(0,1)} | \dots \rangle = \langle F_s^{(0,1)} | \dots \rangle_{\text{kl}} + \langle F_s^{(0,1)} | \dots \rangle_{\text{qu}}.$$

b) Die Divergenzen sind nur durch $\langle F_s^{(0,1)} | \dots \rangle_{\text{kl}}$ bedingt.

Das Problem der Abschirmung reduziert sich also auf die Abschirmung von $\langle 1 \dots s | F_s^{(0,1)} | s \dots 1 \rangle_{\text{kl}}$. Für die weiteren Rechnungen wird die Substitution $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k} - \mathbf{l}/2$, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{l}/2$ gemacht. Weiter beachten wir, daß im Fall $n \lambda^3 \ll 1$, der von jetzt ab nur betrachtet werden soll, $(2j+1) n(k) \approx n \lambda^3 e^{-\beta \epsilon(k)}$ ist. Dann folgt mit $\gamma = \beta \hbar^2 / 2m$

$$\langle F_r^{(0,1)} | \dots \rangle_{\text{kl}} = \beta \lambda^{3s} \sum_{i < j} \exp\{-\gamma \sum_{n \neq j, i} k_r^2\} \prod_{n \neq j, i} \delta(\mathbf{l}_n) V(\mathbf{l}_i) \delta(\mathbf{l}_i + \mathbf{l}_j) \frac{\langle \sigma_1 \dots \sigma_s | \sigma_s \dots \sigma_1 \rangle_s!}{(2j+1)^s}.$$

$\langle \bar{F}_s^{(0,1)} | \dots \rangle_{\text{kl}}$ ist dann wegen (8) aus der Gleichung

$$[H_s^0, F_s^{k,1}]_{\text{kl}} + [V_s, F_s^{k,0}]_{\text{kl}} + n \text{Sp}[V_{s, s+1}, F_{s+1}^{k-1,1}]_{\text{kl}} = 0$$

in bekannter Weise (siehe GUERNSEY) zu bestimmen. Das Resultat ist

$$\langle \bar{F}_s^1 | \dots \rangle_{\text{kl}} = s! \beta \lambda^{3s} \langle \dots | \Phi | \dots \rangle \exp(-\gamma \sum_r k_r^2)$$

und $\langle | \Phi | \rangle = \sum_{i < j} \prod_{n \neq j, i} \delta(\mathbf{l}_n) \delta(\mathbf{l}_i + \mathbf{l}_j) \Phi(\mathbf{l}_i) \frac{\langle \sigma_1 \dots \sigma_s | \sigma_s \dots \sigma_1 \rangle}{(2j+1)^s}; \quad \Phi(l) = \frac{e_i e_j}{l^2 + \alpha^2} \frac{1}{4\pi^2}.$

Die abgeschirmte Dichtematrix folgt also zu ($\kappa^{-1} = \text{DEBYE-RADIUS}$)

$$\langle |\bar{F}_s^1| \rangle = \frac{s!}{(2j+1)^s} \left[\left(\frac{\Pi n(\mathbf{k}_i + \frac{1}{2}\mathbf{l}_i) - \Pi n(\mathbf{k}_i - \frac{1}{2}\mathbf{l}_i)}{n^s(E_s - E_s')} - \lambda^{3s} \exp\{-\gamma \Sigma k_i^2\} \langle |V_s| \rangle + \beta \exp\{-\gamma \Sigma k_i^2\} \langle |\Phi| \rangle \right) + \frac{\Pi n(\mathbf{k}_i + \frac{1}{2}\mathbf{l}_i) - \Pi n(\mathbf{k}_i - \frac{1}{2}\mathbf{l}_i)}{n^s(E_s - E_s')} \sum_{P_s \neq 1} \langle |V_s P_s| \rangle \right].$$

3. Berechnung von Mittelwerten in der Impulsdarstellung, Zweiteilchen-Dichtematrix

Mittelwerte von Operatoren in der k -Darstellung sind durch

$$\frac{n^s}{s!} \text{Sp}(A_s F_s) = \frac{n^2}{(s!)^2} \sum_{1 \dots s} \langle 1 \dots s | A_s F_s | s \dots 1 \rangle$$

gegeben. In einigen Fällen werden diese Formeln besonders einfach. Zunächst beachten wir, daß A_s und H_N nicht vom Spin abhängen sollen. Dann kann in den Dichtematrizen über die Spins heraussummiert werden. Für Mittelwerte von binären Operatoren des Typs

$$\langle \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | A_2 | \mathbf{k}_2' \mathbf{k}_1' \rangle = A(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2') \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1' - \mathbf{k}_2')$$

folgt mit der Substitution $\mathbf{k}_i' \rightarrow \mathbf{k}_i - \mathbf{l}_i/2, \mathbf{k}_i \rightarrow \mathbf{k}_i + \mathbf{l}_i/2$

$$\begin{aligned} \langle A_2 \rangle &= \frac{1}{4} n^2 \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 d\mathbf{l}_1 d\mathbf{l}_2 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) A_2(\mathbf{l}_1) F_2(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2), \\ \langle A_2 \rangle &= \frac{1}{4} n^2 \int d\mathbf{l}_1 d\mathbf{l}_2 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) A_2(\mathbf{l}_1) F(\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2). \end{aligned} \quad (11)$$

Dabei ist

$$F(\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2) = \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 F(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2). \quad (12)$$

Die entscheidende Informationsgröße zur Berechnung von Mittelwerten vom oben angegebenen Typ ist also $F(\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2)$. Wir berechnen diese Größe. Zunächst ist nach Summation über die Spinvariablen

$$\begin{aligned} F(k_1 k_2 l_1 l_2) &= 2 \lambda^6 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \exp\{-\gamma \sum_i^2 k_i^2\} \\ &\cdot \left[\beta \Phi(l_1) + V(l_1) \left\{ \exp\{-\gamma \sum_i^2 l_i^2/4\} \frac{\exp\{-\gamma \sum_i^2 \mathbf{k}_i \mathbf{l}_i\} - \exp\{+\gamma \sum_i^2 \mathbf{k}_i \mathbf{l}_i\}}{\hbar^2 \mathbf{l}_1 (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/m} - \beta \right\} \right. \\ &\left. \pm \frac{V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)}{2j+1} \exp\{-\gamma \sum_i^2 l_i^2/4\} \frac{\exp\{-\gamma \sum_i^2 \mathbf{k}_i \mathbf{l}_i\} - \exp\{+\gamma \sum_i^2 \mathbf{k}_i \mathbf{l}_i\}}{\hbar^2 \mathbf{l}_1 (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/m} \right]. \end{aligned}$$

Hier wurde die Bedingung $n \lambda^3 \ll 1$ ausgenutzt, d. h. $(2j+1) n(k) \approx n \lambda^3 e^{-\beta \epsilon(k)}$.

Außerdem ist es zweckmäßig, zur Berechnung des Integrals (12) Relativ- und Schwerpunktskoordinaten einzuführen. Dann folgt:

$$F(l_1 l_2) = 2 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \left[\beta \Phi(l_1) (2\pi)^3 + V(l_1) \{I - (2\pi)^3 \beta\} \pm \frac{I_{\text{ex}}}{2j+1} \right] (2\pi)^3.$$

Die Berechnung der Integrale I und I_{ex} ergibt:

$$I = e^{-\gamma l_1^2/2} \frac{\lambda^3}{\sqrt{2}} \int e^{-\gamma k^2/2} \frac{\sinh(\gamma \mathbf{k} \mathbf{l}_1)}{\mathbf{k} \mathbf{l}_1} d\mathbf{k} = \beta (2\pi)^3 {}_1F_1(1, \frac{3}{2}, -\gamma l_1^2/2)$$

und

$$I_{\text{ex}} = \frac{2m e^2 \lambda^3}{\hbar^2 (2\pi)^2 \sqrt{2}} \int e^{-\gamma l_1^2/2} e^{-\gamma k^2/2} \frac{\sinh(\gamma \mathbf{k} \mathbf{l}_1)}{\mathbf{k} \mathbf{l}_1} \frac{d\mathbf{k}}{k^2} = \beta e^2 \lambda^2 f(\gamma l_1^2)$$

mit

$$f(\gamma l^2) = e^{-\gamma l^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n+1)(2n+1)!} (\gamma l^2)^n.$$

Wir bekommen also für $F^{(1)}(l_1 l_2)$

$$F^{(1)}(l_1 l_2) = 2 \beta e^2 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \left[\frac{4\pi}{l_1^2 + \kappa^2} + \frac{4\pi}{l_1^2} \{ {}_1F_1(1, \frac{3}{2}, -l_1^2/2) - 1 \} \pm \frac{\lambda^2}{2j+1} 2\pi^3 f(\gamma l_1^2) \right].$$

Entsprechend folgt aus (5 a)

$$F^{(0)}(l_1 l_2) = (2\pi)^6 \delta(\mathbf{l}_1) \delta(\mathbf{l}_2) \pm \frac{1}{2j+1} \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \frac{\lambda^3}{\sqrt{2}} e^{-\gamma l_i^{3/2}}$$

für die 0. Näherung.

4. Korrelationsenergie eines Elektronengases bei $n \lambda^3 \ll 1$, freie Energie

Mit der Funktion $F(l_1 l_2)$ kann die mittlere Energie und die freie Energie eines Elektronengases mit positivem Untergrund für den Fall $n \lambda^3 \ll 1$, $e^2/k T \lambda \ll 1$ berechnet werden

$$\langle E \rangle = n \text{Sp}(H_1 F_1) + \frac{1}{2} n^2 \text{Sp}(V_{12} F_2) = E_{\text{id}} + E_{\text{korr}}.$$

Die Größe E_{korr} ist die Korrelationsenergie, die hier nach (11), also aus

$$E_{\text{korr}} = \frac{1}{4} n^2 \int V(l_1 l_2) F(l_1 l_2) d\mathbf{l}_1 d\mathbf{l}_2 = \frac{1}{4} n^2 \delta(0) \int V(l) F(l) dl$$

berechnet werden soll. Es ist

$$\begin{aligned} E_{\text{korr}} &= \frac{n N}{4 (2\pi)^3} \int V(l) F^0(l) d\mathbf{l} + \int V(l) F^{(1)} d\mathbf{l} \\ &= \frac{e^2 n N}{4 \pi^2} \left[\frac{\lambda^3}{2\sqrt{2}} \int e^{-\gamma l^{3/2}} d\mathbf{l} + \beta e^2 4\pi \left(\int \frac{1}{l^2 + \kappa^2} \frac{d\mathbf{l}}{l^2} + \int ({}_1F_1 - 1) \frac{d\mathbf{l}}{l^2} \right) - \frac{1}{2} \lambda^2 \int f(\gamma l^2) \frac{d\mathbf{l}}{l^2} \right]. \end{aligned}$$

An dieser Stelle wird die Bedeutung der Abschirmung deutlich. Mit der nichtabgeschirmten Funktion $F^{(0)}(l_1 l_2)$ hätten wir an Stelle des 2. und 3. Integrals das Integral $\int ({}_1F_1/l^2) dl$ zu setzen. Dieses Integral ist aber divergent (siehe Anhang). Nach Ausführung der Integration folgt dann

$$E_{\text{korr}} = E_{\text{Deb}} + E_{\text{qua}} + E_{\text{ex}}.$$

Mit

$$\begin{aligned} E_{\text{Deb}} &= \frac{1}{2} N k T \mu &&= \text{DEBYE-Anteil,} \\ E_{\text{qua}} &= \frac{1}{2} N n \cdot e^4 \lambda / 2 k T &&= \text{Anteil der Quanteneffekte ohne Austauschereffekte,} \\ E_{\text{ex}} &= \frac{1}{2} n N e^2 \left(\frac{1}{2} \lambda^2 - e^2 \lambda \sqrt{2} c / k T \right) &&= \text{Austauschterme.} \end{aligned}$$

Die Konstante ist

$$c = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[(2n-1)!]^2}{(2n+1)(2n+1)!} = \frac{1}{2} \pi \ln 2; \quad \mu = \kappa^3 n^{-1}.$$

Also ist

$$E_{\text{korr}} = \frac{1}{2} N n \lambda^2 e^2 \left[-\frac{1}{2} + (e^2/k T \lambda) \sqrt{2} c + (e^2/k T \lambda) \cdot \pi / \sqrt{2} \right] - \frac{1}{2} N k T \mu.$$

Aus E_{korr} kann der Korrelationsanteil der freien Energie F_{korr} über den Aufladeprozess bestimmt werden

$$F_{\text{korr}} = (1/L^3) \int_0^1 (1/e^2) de^2 \cdot E_{\text{korr}}.$$

Man erhält dann für den Korrelationsanteil der freien Energie eines Elektronengases

$$F_{\text{korr}} = \frac{1}{2} n^2 e^2 \left[-\frac{1}{2} + (e^2/2 k T \lambda) (1 + \ln 2) \cdot \frac{1}{2} \pi \sqrt{2} \right] \lambda^2 - \frac{1}{3} n k T \mu.$$

Dieser Ausdruck ist in Übereinstimmung mit den Resultaten von TRUBNIKOW und ELESIN, EBELING, HOFFMANN und KELBG. Das Resultat von DE WITT folgt bei Vernachlässigung der Austauschereffekte.

Herrn Prof. Dr. KELBG und Herrn Dr. EBELING danken wir für wertvolle Hinweise und Diskussionen.

Anhang

Wir berechnen das Integral

$$I = \int_0^{\infty} [{}_1F_1(1, \frac{3}{2}, -l^2/2) - 1] (1/l^2) dl.$$

Mit der Integraldarstellung der Funktion ${}_1F_1(\alpha, \beta, \gamma)$ folgt

$${}_1F_1(\alpha, \beta, z) - 1 = \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta-\alpha)} \int_0^1 (e^{uz} - 1) u^{\alpha-1} (1-u)^{\beta-\alpha-1} du,$$

d. h.
$$\int ({}_1F_1 - 1) \frac{dl}{l^2} = \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(1)\Gamma(\frac{1}{2})} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^1 (1-u)^{-1/2} (e^{-\gamma(l^2/2)u} - 1) \frac{dl}{l^2} du.$$

Mit $p = \sqrt{\gamma u/2}$ ergibt die Integration über dl

$$\begin{aligned} I &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{\Gamma(1)\Gamma(\frac{1}{2})} \int_0^1 (1-u)^{-1/2} [(1/\varepsilon) e^{-p^2\varepsilon^2} - 1/\varepsilon - p\sqrt{\pi} (1 - \Phi(\varepsilon p))] du \\ &= -\frac{1}{2} \sqrt{\pi} \sqrt{\gamma/2} \int_0^1 (\sqrt{u}/\sqrt{1-u}) du. \end{aligned}$$

Das Integral ist einfach auszuwerten und ergibt: $I = -\frac{1}{4} \sqrt{\pi^3} \sqrt{\gamma/2}$.

Man sieht leicht, daß durch die Subtraktion von 1 gerade die Divergenzen vermieden werden.

Erzeugung elektromagnetischer Wellen in Plasmen durch Streuung longitudinaler Plasmawellen an longitudinalen Plasmawellen

R. WAGNER

Institut für Theoretische Physik und Sternwarte der Universität Kiel

(Z. Naturforsch. 22 a, 1372—1391 [1967]; eingegangen am 14. März 1967)

Special interactions of plasma waves are examined in a plasma consisting of protons and electrons in thermodynamic equilibrium. Collisions of particles are neglected. We compute the following two cases: a) interaction of two plane plasma electron waves with each other; b) interaction of one plane plasma electron wave with the thermal fluctuations of the plasma which are represented by thermal plasma electron and ion waves. The electric field originating from the interactions is described by an equation obtained from the system of the MAXWELL-VLASOV-equations for protons and electrons. This equation is solved for the transverse electric field at large distances assuming that the potential energy gained by an electron in the plasma waves is small compared with its thermal energy. For case a) electromagnetic radiation is emitted near $2\omega_{pe}$ where ω_{pe} is the electron plasma frequency. For case b) the thermal plasma ion waves yield radio emission close to ω_{pe} , whereas the thermal plasma electron waves yield emission close to $2\omega_{pe}$. The intensities and scattering cross sections for case b) are compared with the results of other authors.

Die Entstehung elektromagnetischer Wellen in einem Plasma ist in den letzten Jahren — besonders im Hinblick auf die solaren Radiobursts¹ — häufig diskutiert worden. Die Untersuchung der Bursts vom Typ II und III² im m-Wellengebiet führt auf die Frage, unter welchen Bedingungen ein Plasma elektromagnetische Energie abstrahlt in nur einem oder höchstens zwei schmalen Frequenzbändern von wenigen MHz Breite, deren mittlere Frequenzen in der

Nähe der Plasmafrequenz ω_{pe} liegen und sich im Fall zweier Bänder nahezu wie 1 : 2 verhalten. Wegen des Auftretens von ω_{pe} liegt es nahe, die Emission mit Plasmawellen in Verbindung zu bringen. Dann ist jedoch zu klären, wie diese longitudinalen Plasmawellen transversale elektromagnetische Wellen aussenden können. In linearer Näherung kompensieren sich Leitungs- und Verschiebungsstrom einer Plasmawelle. Daher ist zur Emission von

¹ J. P. WILD, S. F. SMERD u. A. A. WEISS, Ann. Rev. Astron. Astrophys. 1, 291 [1963].

² J. P. WILD u. C. C. MCCREARY, Australian J. Sci. Res. (A) 3, 387 [1950].