

Quantenmechanische Verteilungsfunktion für ein Elektronengas

G. SCHMITZ und D. KREMP

Institut für Theoretische Physik der Universität Rostock (DDR)

(Z. Naturforsch. **23 a**, 1392—1395 [1968]; eingegangen am 30. Mai 1968)

The reduced distribution functions for an electron-gas are calculated from the Bogoljubow hierarchy by a perturbation expansion of the density operators with respect to two parameters. The limiting cases $n\lambda^3 \ll 1$ and $n\lambda^3 \gg 1$ are discussed. In the case $n\lambda^3 \gg 1$ the polarization function for small values of the temperature $T \neq 0$ is given.

In einer früheren Arbeit¹ wurden auf der Grundlage der Gleichgewichtshierarchie für die reduzierten Dichteoperatoren die thermodynamischen Funktionen eines Elektronengases im Grenzfall $n\lambda^3 \ll 1$ untersucht.

In dieser Arbeit sollen die quantenmechanischen Verteilungsfunktionen für geladene Teilchen im thermischen Gleichgewicht ohne Einschränkung bezüglich $n\lambda^3$ aus der Hierarchie bestimmt werden. Die quantenmechanische Verteilungsfunktion wurde schon früher von FUJITA und HIROTA² mit der Methode der Greenschen Funktionen berechnet. Im weiteren sollen aus der allgemeinen Verteilungsfunktion die bekannten Grenzfälle $n\lambda^3 \ll 1$ bzw. $n\lambda^3 \gg 1$ diskutiert werden. Der Grenzfall $n\lambda^3 \ll 1$ ist dadurch ausgezeichnet, daß die erforderliche Abschirmung der Coulomb-Wechselwirkung eine Debye-Abschirmung ist. Aus diesem Grund ist dieser Fall einfacher zu behandeln und führte zur Ausarbeitung spezieller Methoden^{1, 3-5}. In dem zu behandelnden allgemeinen Fall ist aber bekanntlich eine solche klassische Abschirmung nicht möglich.

Der Zustand des Vielteilchensystems ist durch die reduzierten Dichteoperatoren

$$F_s = L^{3s} \text{Sp}_{s \dots N} (\varrho_N) \quad (L^3 \text{ Volumen})$$

bestimmt. ϱ_N ist die auf 1 normierte Wahrscheinlichkeitsdichte. Die F_s sind im thermischen Gleichgewicht bestimmt durch das System^{1, *}

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

$$V_s \rightarrow 0: F_s \rightarrow F_s^0 = \frac{1}{n^s} \sum_{1 \dots s} n(k_1) \dots n(k_s) E_s^\pm,$$

$$n(k) = [e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m - \mu} + 1]^{-1}. \quad (1)$$

Zur Lösung dieses Systems soll im folgenden eine systematische Methode speziell für Systeme mit Coulomb-Wechselwirkung dargelegt werden.

1. Berechnung der Verteilungsfunktion

Die Hierarchie von Gleichungen soll durch eine Störungsrechnung nach der Wechselwirkung entkoppelt werden. Dazu setzen wir $H_s = H_s^0 + V_s$ und erhalten die Gleichung

$$[H_s, F_s] + [V_s, F_s] + n \text{Sp}_{s+1} [V_{s, s+1}, F_{s+1}] = 0. \quad (2)$$

Im folgenden betrachten wir die Terme proportional V_s als Störungsterme. Auf Grund des weitreichenden Charakters der Coulomb-Kräfte ist eine einfache Entwicklung nach der Wechselwirkung nicht möglich. Die Abänderung der Störungsrechnung wird dadurch erreicht, daß wir die Störungsterme zusätzlich nach ihrer Abhängigkeit von der im allgemeinen nicht als klein anzunehmenden Dichte unterscheiden. Zu diesem Zweck entkoppeln wir die Hierarchie durch die Entwicklung

$$F_s = \sum_{q, l=0}^{\infty} F_s^{(ql)}. \quad (3)$$

Die $F_s^{(ql)}$ werden aus der Gleichung bestimmt

$$0 = [H_s^{(0)}, F_s^{(ql)}] + [V_s, F_s^{(q, l-1)}] + n \text{Sp}_{s+1} [V_{s, s+1}, F_{s+1}^{(q-1, l)}]. \quad (4)$$

Die Abschirmung des Coulomb-Potentials erreicht man durch Partialsummation über „q“. Es folgt dann die modifizierte Störungsreihe

$$F_s = \sum_{l=0}^{\infty} \bar{F}_s(l) \quad (5)$$

¹ D. KREMP u. G. SCHMITZ, Z. Naturforsch. **22 a**, 1366 [1967].

² S. FUJITA u. R. HIROTA, Phys. Rev. **118**, (6) 1960 [1968].

³ H. J. HOFFMANN u. W. EBELING, Beitr. Plasmaphys. **8**, 43.

⁴ D. KREMP u. W. D. KRAEFT, Z. Phys. **208**, 475 [1968].

⁵ B. A. TRUBNIKOW u. V. F. ELESIN, Sh. exp. teor. UdSSR **47**, 1279 [1964].

* Der Spin-Faktor in der entsprechenden Formel in ¹ ist nicht richtig.



mit den abgeschirmten Koeffizienten

$$\begin{aligned}\bar{F}_s^{(0)} &= F_s^{(00)}, \\ \bar{F}_s^{(1)} &= \sum_{q=0}^{\infty} F_s^{(q,1)} + F_s^{(q+1,0)}, \\ \bar{F}_s^{(l)} &= \sum_{q=0}^{\infty} F_s^{(q,l)}, \quad l > 1.\end{aligned}$$

Aus obiger Gleichung ist zu entnehmen, daß $F_s^{(q+1,0)}$ um eine Ordnung höher in der mittleren Dichte als $F_s^{(q,1)}$ ist und im allgemeinen zu berücksichtigen ist, im Unterschied zur Hochtemperaturnäherung.

Im folgenden soll der Koeffizient $\bar{F}_s^{(1)}$ bestimmt werden. Mit der Bezeichnung $[H_s^0; F_s] = R_s \cdot F_s$ erhält man für $q=0$

$$F_s^{(1,0)} + F_s^{(0,1)} = -\frac{1}{R_s} \{ [V_s, F_s^{(00)}] + n \operatorname{Sp}_{s+1} [V_{s,s+1} F_{s+1}^{(00)}] \}.$$

In der Impulsdarstellung gilt

$$\begin{aligned}\langle \dots \sigma_i \mathbf{k}_i + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_i \dots | F_s^{(10)} + F_s^{(01)} | \dots \sigma'_i \mathbf{k}_i - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_i \dots \rangle &= -\frac{1}{n^s} \sum_{i < j} \\ \langle \dots | V_{ij} \Delta^- | \dots \rangle &\frac{n(k_r)}{E_s\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{l}}{2}\right) - E_s\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{l}}{2}\right)} \{ n(\mathbf{k}_i - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_i) n(\mathbf{k}_j + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_j) \\ &\cdot [1 - n(\mathbf{k}_i - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_i) - n(\mathbf{k}_j - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_j)] - n(\mathbf{k}_i + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_i) n(\mathbf{k}_j - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_j) \cdot [1 - n(\mathbf{k}_j + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_j) - n(\mathbf{k}_i - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_j)] \}. \quad (6)\end{aligned}$$

Insbesondere gilt für $s=2$

$$\begin{aligned}\langle | F_2^{(01)} + F_2^{(10)} | \rangle &= -\frac{1}{n^2} \frac{\delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2)}{E_2\left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{l}}{2}\right) - E_2\left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{l}}{2}\right)} \cdot \{ V(l_1) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1} \delta_{\sigma_2 \sigma'_2} - V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \delta_{\sigma_1 \sigma'_2} \delta_{\sigma_2 \sigma'_1} \} \\ &\cdot [n(\mathbf{k}_1 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) n(\mathbf{k}_2 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) \bar{n}(\mathbf{k}_1 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) \bar{n}(\mathbf{k}_2 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) - n(\mathbf{k}_1 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) n(\mathbf{k}_2 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) \bar{n}(\mathbf{k}_1 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) \bar{n}(\mathbf{k}_2 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1)] \\ &\text{mit } \bar{n} = 1 - n(k) \quad \text{und} \quad V(l_1) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{e^2}{l_1^2}. \quad (7)\end{aligned}$$

Benutzt man den Ausdruck (7) zur Berechnung thermodynamischer Funktionen, so führt der direkte Term auf Coulomb-Divergenzen. (7) muß also abgeschirmt werden. In den weiteren Rechnungen mit $q \geq 1$ sind also nur die direkten Terme zu berücksichtigen. Die entsprechenden Beiträge ergeben sich aus der Rekursionsformel

$$F_s^{(q,1)} + F_s^{(q+1,0)} = \frac{1}{R_s} n \operatorname{Sp}_{s+1} [V_{s,s+1}, F_{s+1}^{(q-1,1)} + F_{s+1}^{(q,0)}]. \quad (8)$$

Wir geben noch den nächsten Schritt für $s=2$, $q=1$ in der Impulsdarstellung an

$$\begin{aligned}\langle \dots | F_2^{(1,1)} + F_2^{(2,0)} | \dots \rangle &= \frac{1}{n^2} (2j+1) \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) V^2(l_1) \int d\mathbf{k}_3 \frac{1}{(\hbar^2/m) \mathbf{l}_1(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3)} \\ &\cdot \frac{\exp[-\beta(\hbar^2/m) \mathbf{l}_1(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)] - 1}{(\hbar^2/m) \mathbf{l}_1(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} [n(\mathbf{k}_3 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) - n(\mathbf{k}_3 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1)] \\ &\cdot n(\mathbf{k}_1 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) n(\mathbf{k}_2 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) \bar{n}(\mathbf{k}_1 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1) \bar{n}(\mathbf{k}_2 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1).\end{aligned}$$

Mit (8) können alle weiteren Beiträge zu $\bar{F}_2^{(1)}$ angegeben werden.

Im weiteren beschränken wir uns auf die Berechnung der Größe

$$\bar{F}_2(\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2) = \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \langle \mathbf{k}_1 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1, \sigma_1, \mathbf{k}_2 + \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_2, \sigma_2 | \bar{F}_2^{(1)} | \mathbf{k}_2 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_2, \sigma'_2, \mathbf{k}_1 - \tfrac{1}{2} \mathbf{l}_1, \sigma'_1 \rangle, \quad (9)$$

die alle zur Berechnung thermodynamischer Funktionen wichtige Informationen enthält. Zur übersichtlichen Darstellung der Terme der Partialsumme führen wir analog BALESCU⁶ die Funktion

$$II(l, \tau) = \int d\mathbf{k} \exp[-(\hbar^2/m) \tau \mathbf{l} \cdot \mathbf{k}] n(\mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{l}) \bar{n}(\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{l}) \quad (10)$$

ein. Dann gilt für $q=0$ und $q=1$

$$F_2^{(10)}(l_1 l_2) + F_2^{(0,1)}(l_1 l_2) = - \frac{(2j+1)^2}{n^2} V(l_1) \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \int_0^\beta II(l_1, \beta - \tau) II(l_1 \tau) d\tau \\ + (\text{Austauschterme}) \quad (11)$$

und

$$F_2^{(2,0)}(l_1 l_2) + F_2^{(11)}(l_1 l_2) = \frac{(2j+1)^3}{n^2} V^2(l_1) \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \\ \cdot \int_0^\beta d\tau_2 \int_0^\beta d\tau_1 II(l_1 \beta - \tau_2) II(l_1 \tau_2 - \tau_1) II(l_1 \tau_1). \quad (12)$$

Für beliebiges q ist

$$F_2^{(q,1)} + F_2^{(q+1,0)} = + \frac{(2j+1)^{q+2}}{n^2} V(l_1) V(l_1)^q \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \\ \cdot \int_0^\beta d\tau_{q+1} \dots \int_0^\beta d\tau_1 II(l_1 \beta - \tau_{q+1}) \dots II(l_1 \tau_{q+1} - \tau_q) \dots II(l_1 \tau_1). \quad (13)$$

Damit kann die Partialsummation in bekannter Weise ausgeführt werden⁷.

Für die vollständige Verteilungsfunktion erhält man dann

$$F_2(l_i l_j) = \frac{(2j+1)^2}{n^2} \left\{ \delta(l_i) \delta(l_j) n^2 - \frac{\delta(\mathbf{l}_i + \mathbf{l}_j)}{(2j+1)} \int n(\mathbf{k} + \frac{1}{2}\mathbf{l}) n(\mathbf{k} - \frac{1}{2}\mathbf{l}) d\mathbf{k} - \delta(l_i + l_j) \right. \\ \cdot \left[\frac{1}{\beta} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{II^2(l\nu) V(l)}{1 + (2j+1) V(l) II(l\nu)} \right. \\ \left. \left. + \int d\mathbf{k}_i d\mathbf{k}_j V(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j) n(\mathbf{k}_i + \frac{1}{2}\mathbf{l}) n(\mathbf{k}_j - \frac{1}{2}\mathbf{l}) \bar{n}(\mathbf{k}_i - \frac{1}{2}\mathbf{l}) \bar{n}(\mathbf{k}_j + \frac{1}{2}\mathbf{l}) \right] \right\} \quad (14)$$

mit der Polarisationsfunktion

$$II(l\nu) = \int_0^\beta \exp[-i2\pi\nu(\tau/\beta)] II(l\tau) d\tau = \int d\mathbf{k} \frac{n(\mathbf{k} + \mathbf{l}) - n(\mathbf{k})}{i\omega\beta^{-1} - E(\mathbf{k} + \mathbf{l}) + E(\mathbf{k})}.$$

Dieses Resultat wurde zuerst von FUJITO, HIROTA² angegeben und gestattet eine Berechnung der mittleren Energie bis e^4 .

2. Der Grenzfall $n\lambda^3 \ll 1$

In diesem Grenzfall unterscheiden wir die Näherungen der statischen und dynamischen Approximation. In beiden Fällen wird in F_2 $n(k)$ ersetzt durch

$$n(k) = \frac{n\lambda^3}{(2j+1)} \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right), \\ \lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi m k T}}.$$

Bei sehr hohen Temperaturen liefert der Term $\nu=0$ den entscheidenden Beitrag zur Verteilungsfunktion.

Diese Näherung wird als statische Approximation bezeichnet. Um die Verteilungsfunktionen zu bestimmen, muß $II(l, 0)$ berechnet werden. Die Berechnung führt auf Integrale, die in¹ bestimmt wurden. Es folgt als Resultat

$$II(l, 0) = \frac{(2\pi)^3 n\beta}{2j+1} {}_1F_1\left(1, \frac{3}{2}, -\frac{4}{\lambda^2 l^2}\right) \quad (15)$$

und damit der Ringanteil

$$F_2^{\text{Ring}} = - (2\pi)^3 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \\ \cdot \frac{4\pi e^2}{l_1^2} {}_1F_1^2\left(1, \frac{3}{2}, -\frac{\lambda^2 l_1^2}{4}\right) \\ \cdot \frac{\kappa^2}{1 + \frac{\kappa^2}{l_1^2} {}_1F_1\left(1, \frac{3}{2}, -\frac{\lambda^2 l_1^2}{4}\right)} \quad (16)$$

⁶ P. BALESCU, Statistical Mechanics of Charges Particles, Interscience Publishers of John Wiley & Sons, London 1963.

⁷ E. W. MONTROLL u. J. C. WARD, Phys. Fluids **1**, 55 [1958].

Im klassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0 \rightarrow \lambda \rightarrow 0$ folgt die Debye-Verteilung.

Die statische Approximation liefert den klassischen Grenzfall, aber die quantenmechanischen Korrekturen können nicht korrekt sein. Das liegt in der Beschränkung auf den Anteil $\nu=0$. Dadurch wird

das Zweikörperproblem in der Näherung e^2 nicht exakt quantenmechanisch behandelt. Um die exakten quantenmechanischen Korrekturen zur Ordnung e^2 zu erhalten, darf $\Pi(l, \nu)$ in (14) nur im Nenner durch die statische Polarisationsfunktion ersetzt werden.

Wir schreiben F_2^{Ring} in der Form

$$F_2^{\text{Ring}} = \frac{(2\pi)^6}{n^2 \beta} \frac{\delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2)}{(2j+1)} \left[\frac{\Pi^2(00) V(l)}{1 + (2j+1) \Pi(00) V(l)} + \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{\Pi^2(l\nu) V(l)}{1 + (2j+1) \Pi(l\nu) V(l)} - \frac{\Pi^2(00) V(l)}{1 + (2j+1) \Pi(00) V(l)} \right].$$

Da nun $[\sum \Pi^2(l\nu) - \Pi(00)] V(l)$ nicht zu Coulomb-Divergenzen bei der Berechnung von \bar{E} führt, können die Nenner in der Summe entwickelt werden

und es folgt bis auf höhere Ordnungen in $n\lambda^3$

$$F_2^{\text{Ring}} = - \frac{(2\pi)^6}{(2j+1) n^2 \beta} \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \cdot \left\{ \frac{\Pi^2(00) V(l)}{1 + (2j+1) \Pi(00) V(l)} + V(l) [\sum \Pi^2(l\nu) - \Pi^2(00)] \right\}.$$

Die Summe kann mit den vorhergehenden Beziehungen leicht auf den Term $F^{(01)}(l_1 l_2)$ zurückgeführt werden. $F^{(01)}(l_1 l_2)$ wird in ¹ berechnet. Damit erhalten wir in Übereinstimmung mit ¹

halten wir in Übereinstimmung mit ¹

$$F_2^{\text{Ring}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2) \beta e^2 \left[\frac{4\pi}{l_1^2 + \kappa^2} + \frac{4\pi}{l_1^2} \left({}_1F_1 \left(1, \frac{3}{2}, -\frac{\lambda^2 e^2}{4} \right) - 1 \right) \right] + O(n\lambda^3).$$

Spezielle Hochtemperaturrechnungen wie in ¹ führen also nicht, wie in der Literatur oft behauptet wird, auf die statische Approximation.

also nicht, wie in der Literatur oft behauptet wird,

3. Das entartete Elektronengas $n\lambda^3 \gg 1$

Die Polarisationsfunktion wird berechnet, indem für den Grundzustand gut bekannt⁸; wir geben hier die Integrale über die Fermi-Verteilung ausgewertet

für $n(k)$ die Fermi-Verteilung gesetzt wird. Sie ist noch die ersten Temperaturkorrekturen an, wobei werden nach ⁹

$$\int_0^\infty f(\varepsilon) n(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\mu f(\varepsilon) d\varepsilon + 2(kT)^2 f'(\mu) \int_0^\infty \frac{z dz}{e^z + 1} + \dots$$

Die Rechnung ergibt mit den Variablen

$$u = \frac{2\pi\beta^{-1}m}{\hbar^2 l k_F}; \quad y = \frac{l}{k_F}; \quad \hbar k_F = \text{Fermi-Impuls.}$$

$$\Pi(y, u) = \frac{2\pi k_F m}{\hbar^2 y} \left[\frac{1}{2} (u^2 + 1 - \frac{1}{4} y^2) \ln \frac{(1 + \frac{1}{2} y)^2 + u^2}{(1 - \frac{1}{2} y)^2 + u^2} + y \left(1 - u \arctan \left[\frac{2u}{u^2 - (1 - \frac{1}{2} y^2)} \right] \right) - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \cdot \ln \frac{(1 + \frac{1}{2} y)^2 + u^2}{(1 - \frac{1}{2} y)^2 + u^2} + \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^3 \left(\frac{1+y}{u^2 + (1 + \frac{1}{2} y)^2} - \frac{1-y}{u^2 + (1 - \frac{1}{2} y)^2} \right) \right].$$

Für den Grundzustand $T=0$ folgt bei analytischer Fortsetzung auf die reelle Achse $u \rightarrow iu$ die von LINDHARDT¹⁰ angegebene Polarisationsfunktion.

Betrachtet man den Fall $y \ll 1$, so folgt

$$\Pi(y, u) = \frac{4\pi m k_F}{\hbar^2} \left[1 - u \arctan \frac{1}{u} - \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{\varepsilon_F} \right)^2 \frac{1}{(u^2 + 1)^2} \right].$$

Im Grundzustand ist dies die bekannte Brueckner-Funktion.

Herrn Prof. Dr. G. KELBG und Herrn Dr. W. EBELING danken wir für fördernde Diskussionen.

⁸ D. PINES, Many Body Problem, Benjamin, New York 1962.

¹⁰ J. LINDHARD, Kgl. Danske Math.-fys. Medd. **28**, No. 8 [1954].

⁹ L. D. LANDAU u. E. M. LIFSHITZ, Statistische Mechanik, Berlin 1966.