

Dieses Werk wurde Ihnen durch die Universitätsbibliothek Rostock zum Download bereitgestellt.

Für Fragen und Hinweise wenden Sie sich bitte an: digibib.ub@uni-rostock.de

---

Gerd Röpke Thomas Bornath

**Klassische und Quantenstatistik dichter Systeme im Gleichgewicht und  
Nichtgleichgewicht stochastischer Prozesse : Beiträge der 5. Schule  
"Statistische Physik" Serrahn, 28. 10.-2. 11. 1985**

Rostock: Wilhelm-Pieck-Universität, 1986

<https://purl.uni-rostock.de/rosdok/ppn1870255062>

Druck Freier  Zugang



OCR-Volltext

ISSN 0138-3140

**Klassische und Quanten-  
statistik dichter Systeme  
im Gleichgewicht  
und Nichtgleichgewicht –  
stochastische Prozesse**



**ROSTOCKER  
PHYSIKALISCHE  
MANUSKRIPTE**

**Heft 9**

### Hinweis

Auf Anfrage verschickt die Sektion Physik der Wilhelm-Pieck-Universität Rostock ausführliche Anleitungen zur Lösung der Seminararbeiten mit folgendem Inhalt:

- Aufgabenstellungen
- wichtige Beziehungen
- Lösungshinweise
- Diskussion der Ergebnisse
- Verallgemeinerungen.

Zusammenfassende Darstellungen der Arbeiten Rostocker Autoren zur Quantenstatistik sind enthalten in:

Ebeling, W., Kraeft, W.D., Kremp, D.: Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids, in: Ergebnisse der Plasmaphysik und der Gaselektronik, Band 5, Akademie-Verlag, Berlin 1976

Ebeling, W. et al.: Transport Properties of Dense Plasmas, in: Ergebnisse der Plasmaphysik und der Gaselektronik, Band 6, Akademie-Verlag, Berlin 1983

Röpke, G.: Statistische Mechanik des Nichtgleichgewichts, Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1986

KLASSISCHE UND QUANTENSTATISTIK DICHTER SYSTEME  
IM GLEICHGEWICHT UND NICHTGLEICHGEWICHT  
STOCHASTISCHE PROZESSE

Beiträge der V. Schule "Statistische Physik"  
Serrahn, 28. 10. - 2. 11. 1985

Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik  
Rostock 1986

Herausgeber: Der Rektor der Wilhelm-Pieck-Universität Rostock

Wissenschaftliche Leitung: Doz. Dr. sc. nat. Gerd Röpke

Wissenschaftliche Bearbeitung: Dipl.-Phys. Thomas Bornath

Herstellung der Druckvorlage: Hiltrud Bahlo

Redaktionsschluß: 31. 1. 1986

Zitat-Kurztitel: Rostock.Phys.Manuskr. (1986)9

Wilhelm-Pieck-Universität Rostock

Abt. Wissenschaftspublizistik

Vogelsang 13/14, Telefon 369 577

Rostock, DDR - 2500

Genehmigungs-Nr.: C 138/86

Druck: Ostsee-Druck Rostock, Betriebsteil Ribnitz, Werk II

II-15-14-0,32

Inhalt

	Seite
Vorwort (G. RÜPKE)	5
Programm	6
Teilnehmer der "V. Schule Statistische Physik"	8
W.D. KRAEFT Thermodynamics and Scattering Theory	10
G. RÜPKE The Chemical Picture and Principles to Treat Quantum Statistical Perturbative Expansions	15
A. KOHNEL Zur Diagrammtechnik für Greensche Funktionen mit Spinoperatoren	21
M. MALZ Multiphonon-Infrarotabsorption (MIRA) in Kristallen unter Berücksichtigung von Gitteranharmonizitäten und nichtlinearen Dipolmomenten	26
G. HEINRICH Equilibrium Statistical Mechanics of Polymers and Topological Constraints	29
S. STEPANOW; G. HELMIS On the Evaluation of the Diffusion Coefficient of a Polymer Chain in Solution by Means of the Kirk- wood-Equation	34
A. TEUBEL Stochastische Modellprozesse - Anwendung an einem Beispiel	39
A. ENGEL Dynamik von Phasenfronten in ungeordneten Medien	45
F. SCHWEITZER On the Droplet Formation in Dependence on Thermo- dynamic Constraints	50
K. HENNEBERGER Nichtgleichgewichts-Greensche Funktionen und kine- tische Gleichungen	57
V. MAY Nichtgleichgewichts-Greenfunktionstechnik Teilweise Kohärenz von Exzitonen	63

T. BORNATH, M. SCHLANGES The Method of Green's Functions in Non-Equilibrium Statistical Mechanics	67
M. SCHLANGES, T. BORNATH Approximations of Multi-Particle Green's Functions	72
I. HARTMANN Quantenkinetische Theorie der Fluktuationen	77
F. REINHOLZ Quasiteilchenenergien in relativistischer Kern- materie	82
D. BLASCHKE, G. RÜPKE Pauli-Blocking-Effekte in dichter Kernmaterie	89
G. RÜPKE Zusammenstellung der in den Seminaren behandelten Aufgaben	95

## Vorwort

In Fortsetzung der Tradition, die die statistische Physik in der DDR hat, wurde die "V. Schule Statistische Physik" vom 28.10. bis 2.11.1985 von der WPU Rostock in Serrahn bei Güstrow durchgeführt.

Ziele dieser Veranstaltung waren neben der Vorstellung aktueller Forschungsarbeiten aus verschiedenen Einrichtungen und der Weiterbildung des Nachwuchses, insbesondere auf dem Gebiet der Quantenstatistik, auch die Verknüpfung der statistischen Physik mit anderen Disziplinen, wie beispielsweise die Kernphysik, Elementarteilchenphysik und Astrophysik. Es wurden Vorlesungen, Spezialvorträge und Seminare durchgeführt; die Schwerpunkte bildeten die Statistik des Gleichgewichts (klassische und Quantenstatistik), stochastische Prozesse, Nichtgleichgewichtsstatistik sowie Materie unter extremen Bedingungen. Bei Darstellung der Methodik wurde insbesondere auf die Monografie "Quantum Statistics of Charged Particle Systems" von Kraeft et al. Bezug genommen, die zwischenzeitlich im Akademie-Verlag/Berlin sowie bei Plenum/New York, London erschienen ist.

Den Teilnehmern aus den verschiedensten Einrichtungen sei für Beiträge und Diskussionen gedankt, bei der Organisation dieser Schule hatten vor allem Dipl.-Phys. David Blaschke und Dipl.-Phys. Dirk Tamme Anteil. Insbesondere möchten wir uns seitens der WPU Rostock bei Herrn Hinninger und den Mitarbeitern des Ferien- und Schulungsobjektes des VEB Hydrogeologie Nordhausen in Serrahn bedanken, das für die guten Bedingungen sorgte, unter denen diese Schule stattfand. Einige Beiträge sind in dem vorliegenden Heft zusammengestellt; Frau Hiltrud Bahlo sei für die Manuskriptanfertigung herzlich gedankt.

G. Röpke

Montag, 28.10.85:

Programm

G. Röpke (Rostock): Eröffnung

H. Krienke (Rostock): Berechnung von Strukturfunktionen für klassische dichte Systeme

D. Kremp (Rostock): Bethe-Salpeter-Gleichung (I)

Revierförster: Lichtbildervortrag

Dienstag, 29.10.85:

D. Kremp (Rostock): Bethe-Salpeter-Gleichung (II)

W.D. Kraeft (Greifswald): Quantenstatistische Berechnung von Gleichgewichtseigenschaften

G. Röpke (Rostock): Quantenstatistische Berechnung von Transport- und optischen Eigenschaften

W.D. Kraeft: Seminar

M. Funke (Halle): Einführung in die Renormierungsgruppentheorie anhand eines Beispiels

H.L. Vörtler (Leipzig): Monte-Carlo-Simulation klassischer molekularer Fluide

G. Weigl (Rostock): Interionische Wechselwirkung in polarisierbaren dipolaren Hartkugel-Lösungsmitteln

A. Kühnel (Leipzig): Diagrammtechnik für Spinsysteme

R. Redmer (Rostock): Zustandsgleichung für Alkali-Metalle

P. Haronska (Rostock): Thermodynamische Eigenschaften des H-Plasmas

G. Heinrich (Merseburg): Topologieerhaltung und statistische Mechanik

G. Röpke: Seminar

Diskussionsrunde (Kunst)

Mittwoch, 30.10.85:

A. Möbius (Dresden): Experimente zur minimalen metallischen Leitfähigkeit

A. Teubel (Leipzig): Stochastische Modellprozesse und ihre Anwendung anhand eines Beispiels

L. Schimansky-Geier (Berlin): Stochastik nichtlinearer Prozesse

Exkursion ins Nebeltal

H. Krienke: Seminar

A. Engel (Berlin): Frontenbewegung in zufälligen Medien

G. Kluge (Jena): Prigogine-Defay-Verhältnis für Systeme mit einem stochastischen Ordnungsparameter  
S. Stepanov (Merseburg): Berechnung des Diffusionskoeffizienten von Polymerketten im Rahmen der Fokker-Planck-Gleichung  
T. Boseniuk (Berlin): Funktionale Mastergleichungen  
F. Schweitzer (Rostock): Stochastische Beschreibung und Bi-stabilität des Keimbildungsprozesses  
F. Reinholz (Rostock): Quasiteilchenenergien in relativistischer Kernmaterie  
H. Wegener, G. Röpke (Rostock): Quanten-Hall-Effekt  
Buchlesung aus "Der Lauf der Dinge"

Donnerstag, 31.10.85:

K. Henneberger (Güstrow): Kinetische Gleichungen  
H. Stoltz (Berlin): Supraleitung (I)  
L. Schimansky-Geier: Seminar Stochastik  
D. Blaschke: Seminar Funktionale Integration  
G4-Verteidigung (Prof. Henneberger, Güstrow)  
H. Stoltz (Berlin): Supraleitung (II)  
V. May (Güstrow): Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen und teilweise Kohärenz von Exzitonen  
T. Bornath (Rostock): Reellzeitige Green-Funktionen für das Nichtgleichgewicht (I)  
M. Schlanges (Rostock): Reellzeitige Green-Funktionen für das Nichtgleichgewicht (II)  
I. Hartmann (Rostock): Quantenkinetische Theorie der Fluktuationen  
A. Möbius (Dresden): Zustandsdichte im Coulomb-Gap  
P. Selbmann (Berlin): Monte-Carlo-Simulation elektronischer Nichtgleichgewichtssysteme  
M. Schulz (Merseburg): Phononenähnliche Anregungen in Festkörpern  
Grillabend

Freitag, 1.11.85:

- B. Kämpfer (Rossendorf): Phasenübergänge im frühen Universum  
G. Dautcourt (Potsdam): Gravitation und Strukturbildung  
M. Kirchbach (Rossendorf): Chirale Symmetrie  
D. Blaschke (Rostock): Pauli-Blocking-Effekte in dichter Kernmaterie  
A. Schiller (Leipzig): Gitter-Eichfeldtheorie  
M. Malz (Erfurt): Infrarotabsorption in Kristallen unter Berücksichtigung von Gitteranharmonizitäten und nichtlinearen Dipolmomenten  
G. Röpke: Abschluß und Resümé

Liste der Teilnehmer

- S. Arndt (EMAU Greifswald)  
G. Bartsch (PH Güstrow)  
U. Bauerschäfer (TH Merseburg)  
D. Blaschke (WPU)  
T. Bornath (WPU)  
T. Boseniuk (HU Berlin)  
R. Brettschneider (HU)  
D. Bruder (FSU Jena)  
G. Dautcourt (ZIAP Potsdam)  
A. Engel (HU)  
S. Flach (TU Dresden)  
A. Freyberg (TH Magdeburg)  
M. Funke (MLU Halle)  
V. Galindo (TU Dresden)  
P. Haronska (WPU)  
I. Hartmann (WPU)  
G. Heinrich (TH Merseburg)  
K. Henneberger (PH Güstrow)  
A. Hoell (WPU)  
A. Hubatschek (WPU)  
B. Kämpfer (ZfK Rossendorf)  
A. Kaschke (HU)  
M. Kirchbach (ZfK Rossendorf)  
G. Kluge (FSU)

W.D. Kraeft (EMAU)	P. Selbmann (HU)
D. Kremp (WPU)	J. Sonnenburg (WPU)
H. Krienke (WPU)	S. Stepanov (TH Merseburg)
A. Kühnel (KMU Leipzig)	H. Stoltz (ZIE Berlin)
A. Leike (KMU)	W. Strobel (FSU)
M. Luft (EMAU)	D. Tamme (WPU)
R. Mahnke (WPU)	A. Teubel (KMU)
M. Malz (PH Erfurt)	R. Thamm (WPU)
A. Markendorf (TU Dresden)	H.-L. Vörtler (ZIS Leipzig)
F. Marlow (HU)	H. Voß (WPU)
V. May (PH Güstrow)	U. Wächter (WPU)
P. Mazenko (HU)	D. Wegner (TH Magdeburg)
T. Meyer (EMAU)	G. Weigl (WPU)
A. Möbius (ZfW Dresden)	H. Zimdahl (FSU)
F. Moralez (WPU)	
R. Redmer (WPU)	
F. Reinholtz (WPU)	
G. Röpke (WPU)	
A. Schiler (KMU)	
L. Schimansky-Geier (HU)	
M. Schlanges (WPU)	
U. Schlink (TU Dresden)	
H. Schrepp (TH Magdeburg)	
W. Schuhmacher (ZIS Leipzig)	
M. Schulz (TH Merseburg)	
F. Schweitzer (WPU)	

Prof. Dr. W. Ebeling und Dr. R. Der konnten infolge Krankheit leider nicht teilnehmen.

Thermodynamics and Scattering Theory

W.D. KRAEFT

Summary

A brief review is given on the possibilities to apply concepts of scattering theory in the determination of thermodynamic functions of many particle systems. Special attention is paid to systems the interparticle interaction of which supports the formation of bound state.

The aim of this note is not to achieve completeness in the representation of the subject given, but to give some possibilities of the application of scattering quantities.

In the thirties, Beth and Uhlenbeck /1/ expressed the second virial coefficient in terms of bound state energies of pairs and scattering phase shifts. Since that time, there was a large number of papers which exploited the different connections between the relevant quantities.

We will mainly focus our attention to the approximation of the second virial coefficient for systems the elementary particles of which may form two particle bound states.

We mention only that in the case of higher approximations (third virial coefficient, three particle scattering processes) the multi channel scattering theory (Taylor /2/, Dashen, Ma and Bernstein /3/) must be applied. Certain special discussions in this connection in /4/.

Especially the scattering of charges by neutral bound states involves in certain approximation the introduction of the polarization potential. See, e.g., /23/ for a derivation within the Green's function approach.

From the theoretical point of view, in quantum statistics the most straight-forward expression for the virial coefficients uses the resolvent (operator)  $G(z) = (H-z)^{-1}$ , where  $H$  is the relevant hamiltonian. The second virial coefficient  $B$  reads ( $c_1 = \text{const}$ )

$$B = c_1 \int_c \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} \text{Tr} \{ G(z) - G^0(z) \} . \quad (1)$$

The contour  $c$  encircles the singularities of  $G(z)$ , including bound and scattering states.  $G^0(z)$  means free motion. Eq. (1) follows from the definition

$$B = c_1 \text{Tr} \{ e^{-\beta H} - e^{-\beta H^0} \} . \quad (2)$$

We want to remark that (1) is the basis for treating bound and scattering states (contributing to  $B$ ) on the same footing. For systems with finite densities,  $G$  is closely related to the two particle Green's function /5,15/. The T-matrix of scattering theory comes into the play with the Lippmann-Schwinger equation /2/

$$G = G^0 + G^0 T G^0 \quad (3)$$

and, consequently /2/

$$T = V + V G^0 T . \quad (4)$$

Expressions for thermodynamic quantities using the T-matrix, were given, e.g., by Baumgartl /6/ and in /5/, /7b,c/. Closely connected to the representations just mentioned are such by the on-shell S-matrix of scattering theory, namely

$$S(E) = 1 - 2\pi i T(E + i\epsilon) . \quad (5)$$

Relevant thermodynamic expressions are given in /3/ and /5/. For central symmetrical potentials, the partial wave decomposition of quantities is appropriate.

Here we mention the representation of the second virial coefficient using the scattering amplitudes of partial waves /8/. Another equation (for the pressure /5/, /7a,b/) using Jost functions  $f_1(-k) \rightarrow D_1(z)$  reads

$$p - p_0 = \frac{k_B T}{2} \sum_{ab} \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \left[ 1 - \delta_{ab} \frac{(-1)^\ell}{(2s_\ell + 1)} \right] \\ \times \frac{(-1)}{2\pi i} \int_c dz \ln |1 - z_a z_b \exp[-\beta(z - \frac{p^2}{2M})]| \frac{d}{dz} \ln D_\ell(z) \quad (6)$$

$z_a$  - fugacity.

If a Bose-pole occurs in eq. (6) within the continuum of scattering state, it can be shown that this pole is compensated by a Pauli-blocking factor /24/.

Equation (6) is of special interest as it includes bound and scattering contributions as well in a compact manner. If there is an energy gap between bound and scattering states, (6) may be decomposed to give (in the nondegenerate limit and neglecting exchange contributions) the Beth-Uhlenbeck formula /1/. Here the relations must be used  $S_1(k) = f_1(k)/f_1(-k) = \exp(2i\delta_1(k))$ , where  $\delta_1(k)$  is the scattering phase shift and  $\hbar^2 k^2/2m = E$ .

Another branch of possibilities is the linkage between thermodynamic functions and poles of the S-matrix.

The poles in the complex angular momentum plane (1) are referred to as Regge-poles /9/. Corresponding representations of thermodynamic quantities were given in /10/, /11/.

Of special interest is the connection between the poles of the S-matrix in the complex momentum plane ( $k$ ) and the second virial coefficient. Expressions of such type are also of interest for nuclear matter and read /12/, /13/

$$B = c_2 \sum_{\substack{\text{poles} \\ k_i}} \omega(k_i) , \quad \omega(z) = -\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iz}}{t-z} dt \quad (7)$$

The poles of the S-matrix are zeroes of the Jost function  $f_1(-k)$ . The poles are located at positive imaginary values ( $ik_{Bi}$  - bound states), negative imaginary values ( $-ik_{Ai}$  - anti bound states) and at complex values ( $\pm k_i - ik_{Ci}$  - resonances). Again, in (7) the bound and scattering states are taken into account in a compact manner. We want to mention that the three types of poles contribute to the scattering part of  $B$ . Representations (1), (6) and (7) are especially of interest if one wants to discuss general properties of thermodynamic quantities.

In /7b/ the analyticity of the second virial coefficient with respect to the coupling parameter was shown. In /14/ the compensation between certain bound state and scattering state contributions was proved; in /15/ especially the power series expansion of the thermodynamic functions with respect to the coupling parameter is proved for Coulomb systems. In detail, there is a compensation between the divergent contributions of the bound and scattering states, or of discontinuities, respectively, leading to the Planck-Larkin sum of bound states /15/.

Using Levinson's theorem, a partial compensation may be managed /15-18/. In /18/, a compensation up to the level of the Planck-Larkin sum of bound states is established using Levinson's theorem.

The direct determination of Coulomb Green's functions was dealt with in /19/ in order to consider bound and scattering states simultaneously.

A recent determination of phase shifts was performed in transport theory /20/ and thermodynamics /21/. Reference /22/ gives two more monographs on scattering theory.

#### References

- /1/ Beth, G.E., Uhlenbeck, E.: *Physica* 3 (1936) 729; 4 (1937) 915
- /2/ Taylor, J.R.: *Scattering theory*, John Wiley and Sons, New York 1972; Mir, Moscow 1975
- /3/ Dashen, R., Ma, S., Bernstein, J.: *Phys.Rev.* 187 (1969) 345
- /4/ Ebeling, W. et al.: *Transport properties of dense plasmas*, Akademie-Verlag, Berlin 1983; Birkhäuser, Basel 1984, chapter 4;  
Klimontovich, Yu.L., Kremp, D., Kraeft, W.D.: Kinetic equations for chemically reacting gases and partially ionized plasmas, *Advances in Chemical Physics*, in press
- /5/ Kremp, D., Kilimann, M.K., Kraeft, W.D., Stoltz, H., Zimmermann, R.: *Physica* 127A (1984) 646
- /6/ Baumgartl, B.J.: *Z.Physik* 198 (1967) 148
- /7/ a. Kraeft, W.D., Ebeling, W., Kremp, D.: *Phys.Letters* 29A (1969) 466  
b. Kremp, D., Kraeft, W.D., Ebeling, W.: *Physica* 51 (1971) 146  
c. Kremp, D., Kraeft, W.D., Lambert, A.J.D.: *Physica* 127A (1984) 72
- /8/ Landau, L.D., Lifshits, E.M.: *Theoretical Physics*, Vol.5 (in Russian), Nauka, Moscow 1964
- /9/ DeAlfaro, V., Regge, T.: *Potential scattering*, North Holland, Amsterdam 1965; Mir, Moscow 1966
- /10/ Mishima, N., Suzuki, A., Yamazaki, M.: *Progr.theor.Phys.* 46 (1971) 1360
- /11/ Gau, R.: Diploma thesis, Rostock University 1973
- /12/ Nussenzveig, H.M.: *Acta phys.austr.* 38 (1973) 130;  
Minelli, T.A., Vitturi, A., Zardi, F.: *Il Nuovo Cim.* 14A (1973) 827
- /13/ Kremp, D., Gau, R., Schlanges, M., Kraeft, W.D.: *Physica* 86A (1977) 613;  
Gau, R., Schlanges, M., Kremp, D.: *Physica* 109A (1981) 531
- /14/ Kremp, D., Kraeft, W.D.: *Phys.Letters* 38A (1972) 167

- /15/ Ebeling, W., Kraeft, W.D., Kremp, D.: Theory of bound states and ionization equilibrium ..., Akademie-Verlag, Berlin 1976; Mir, Moscow 1979
- /16/ Kremp, D.: Wiss.Z.Päd.Hochschule Güstrow, Heft 2, p. 107 (1974)
- /17/ Böllé, D.: Nuclear Physics A 353 (1981) 377c and references quoted therein
- /18/ Zimmermann, R., Kremp, D.: in preparation
- /19/ Zimmermann, R.: J.Phys. B 18 (1985) 2817
- /20/ Meister, C.V.: Doctor thesis, Rostock University 1981; Kraeft, W.D., Luft, M., Mihajlov, A.: Physica 120A (1983) 263
- /21/ Zimmermann, R., Stolz, H.: phys.stat.sol. (b) 131 (1985) 151
- /22/ Sunakava, S.: Quantum theory of scattering (in Russian), Mir, Moscow 1979 (transl. from the Japanese)  
Sitenko, A.G.: Lectures on scattering theory (in Russian), Vyshche Shkola, Kiev 1971
- /23/ Röpke, G.: Physica A 121 (1983) 92  
Höhne, F.E., Redmer, R., Röpke, G., Wegener, H.:  
Physica 128A (1984) 643
- /24/ Schmidt, M., Röpke, G.: in preparation

Author:

Prof. W.D. Kraeft  
Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald  
Sektion Physik/Elektronik

DDR - 2200 Greifswald  
Domstraße 12a

## The chemical picture and principles to treat quantum statistical perturbative expansions

G. RÖPKE

Physical properties of a many-particle system are represented by correlation functions. Examples are the thermodynamic properties, the transport properties and the optical properties of a system of charged particles /1/ which is described by the Hamiltonian

$$H = \sum_p E(p) a_p^\dagger a_p + \frac{1}{2} \sum_{pp'q} V(p,p',q) a_{p+q}^\dagger a_{p-q}^\dagger a_{p'} a_p \quad (1)$$

with  $V(p,p',q) = e_p e_{p'}/\epsilon_0 q^2$ ;  $p$  denotes momentum, spin and species of the "elementary" particle having the mass  $m_p$  and the electrical charge  $e_p$ . Other examples are the properties of nuclear matter, see /2/, and of quark matter, see /3/.

The correlation functions are evaluated by using the technique of thermodynamic Green functions. Within a perturbative treatment, a Green function is represented by an infinite series of diagrams which give a compact representation of all contributions of a given order of the interaction potential. This allows to apply methods of topology.

The Feynman rules for evaluating the  $n^{\text{th}}$ -order contribution to the Green function are found in the textbooks, see /4,5/. We give a short review of Feynman rules in momentum space. The elements of a diagram are:

## 1. Particle propagators

$$\overrightarrow{\omega_1} = G_1^0(1, \omega_1) = (i\omega_1 - \hbar^{-1}(E(1) - \mu_1))^{-1} \quad (2)$$

where  $\omega_1$  contains even (odd) integers for bosons (fermions),  $\omega_1 = 2n_1\pi/\beta\hbar$  ( $\omega_1 = (2n_1+1)\pi/\beta\hbar$ );

## 2. Interaction lines

$$\overrightarrow{-\frac{q}{\hbar}} \overrightarrow{\omega_m} = V(q, \omega_m) = V(q) \quad (3)$$

where  $V(q) = 1/\epsilon_0 q^2$  in the Coulomb case;  $\omega_m$  even;

3. Vertices

$$\begin{array}{c} q \not\propto \omega_m \\ \times \quad \quad \quad \times \end{array} = \Gamma^o(1\omega_1, 1'\omega'_1, q\omega_m) \\ = e_1 \delta_{p_1-p'_1, q} \delta_{\omega_2-\omega'_1, \omega_m} \delta_{s_1, s'_1} \delta_{G_1 G'_1} \quad (4)$$

which connect particle propagators and interaction lines, at each vertex momentum, energy, spin and species are conserved. Now we find the nth-order contribution to the single particle Green function, e.g., in the following way:

4. Draw all topologically distinct connected graphs with  $n$  interaction lines and  $(2n+1)$  directed particle lines;
5. Multiply by  $[-\beta h^2]^{-n} (-1)^F$  where  $F$  is the number of closed fermion loops, and sum over all internal variables (let  $\sum_p = (2\pi)^{-3} \int d^3 p$ );

6. Whenever a particle line either closes on itself or is joined by the same interaction line (Hartree-Fock type insertions), insert a convergence factor  $\exp(i\omega_1 \gamma)$ ,  $\gamma \rightarrow +0$ , which follows from the order of the operators in the potential (1). Some examples how to use this formalism are given in the last contribution of these proceedings.

We can assume a fast convergence of the perturbation expansion only in some special cases so that it is sufficient to consider the lowest orders with respect to the interaction. In general, we have to perform infinite partial summations, and we have to apply some physical ideas or principles in order to select the relevant contributions. Typical prescriptions are, cf./6/:

(i) Introduction of the quasiparticle concept. All particle propagators in a given topological structure are "dressed" to give a full quasi-particle propagator. This quasiparticle concept, especially the Hartree-Fock approximation, is well known in solid state physics in connection with the effective mass approximation.

(ii) Screening of the interaction. Each interaction line in a given topological structure is replaced by a "dressed" line containing an arbitrary number of polarization insertions. The treatment of screening is necessary in Coulomb systems in order to avoid divergencies of the lowest order contributions in

the perturbation expansion.

(iii) The chemical picture. (1) The formation of bound states may have a significant influence on the physical properties of a many particle system as, e.g., the partially ionized plasma. (2) Bound states are introduced performing an infinite sum of ladder-type diagrams.

Let us formulate the chemical picture in more detail. According to the principle, that free "elementary" particles and bound states (composites) should be treated on the same footing, we introduce new elements to construct partial summations of diagrams:

1a. The n-particle cluster propagator which is related in the low density limit to the solution of the isolated n-particle problem (energy eigenvalues  $E_{\alpha P}^0$ , wave function  $\Psi_{\alpha P}^0(1, \dots, n)$ ;  $\alpha$  - internal quantum number,  $P$  - total momentum):

$$\underline{\underline{G_n^0}} = (G_n^0(\alpha P, \omega_n)) = (i\omega_n - \hbar^{-1}(E_{\alpha P}^0 - \hbar))^{-1} \quad (5)$$

The corresponding matrix elements in the single particle representation are

$$G_n^0(1, \dots, n; 1', \dots, n'; \omega_n) = \sum_{\alpha P} \Psi_{\alpha P}^0(1, \dots, n) G_n^0(\alpha P, \omega_n) \Psi_{\alpha P}^{*k}(1', \dots, n') \quad (6)$$

3a. The coupling of the cluster to the interaction potential is introduced by the vertex

$$\begin{array}{c} q, \omega_m \\ \times \xrightarrow{\qquad} \Delta \xleftarrow{\qquad} \times \\ \alpha P, \omega_n \qquad \alpha' P', \omega'_n \end{array} = \Gamma_n^0(\alpha P \omega_n, \alpha' P' \omega'_n, q \omega_m) \\ \approx \sum_{1 \dots n} \Psi_{\alpha P}^{*k}(1, \dots, n) \sum_i c_i \Psi_{\alpha P}^0(1, \dots, i+q, \dots, n) \\ \times \delta_{P-P', q} \delta_{\omega_n-\omega'_n, \omega_m} \quad (7)$$

in the low density limit.

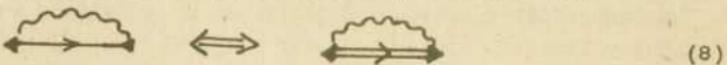
In the case of a plasma (1), the formation of neutral atoms is described by the two-particle cluster (5), and the coupling to the Coulomb interaction is given in the limit  $q \rightarrow 0$  by the dipole matrix element according to (7) replacing  $\Psi_{\alpha P}^0(\dots, 1+q, \dots)$  by  $\Psi_{\alpha P}^0(\dots, 1, \dots) + q \frac{\partial}{\partial p_i} \Psi_{\alpha P}^0(\dots, 1, \dots)$ .

Now we formulate the prescription which realizes the chemical picture:

4a. In addition to a given topological structure, we select all diagrams where a single particle propagator is replaced by a  $n$ -particle cluster propagator. Notice that we have to avoid disconnected diagrams and double counting of diagrams by subtracting some special diagrams of lower order.

The chemical picture may be considered as a guiding idea how to select relevant diagrams from the infinite perturbation expansion. We give some examples, see also the last contribution of these proceedings:

(i) The single particle self-energy in a Coulomb system is completed by the two-particle selfenergy, see e.g. /7/

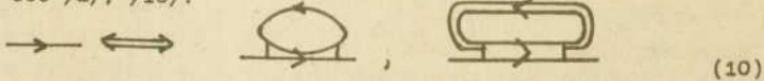


(ii) The RPA-expression for the polarization function is completed by the atomic polarizability, see /8/



(iii) The linearized Boltzmann equation is completed by the collision integral including bound states (polarization potential) and by the additional equation for the distribution function of the  $n$ -particle bound states, see /9/.

(iv) Deriving the equation of state, the free single particle propagator  $G_1^0$  is completed by the  $n$ -particle cluster propagator, see /2/, /10/:



The chemical picture is well understood only in the low density limit, where according to (5), (7) a simple interpretation in terms of isolated bound states can be given. Composites are not fully equivalent to elementary constituents if density effects of higher order are considered. With increasing density, the simple chemical picture breaks down, cf. /11/, because of statistical correlations as the Pauli principle, e.g. The consistent evaluation of the Bethe-Goldstone equation for the  $n$ -particle cluster allows to include these density effects, cf. /2/. Similarly, density corrections arise also in evaluating the  $n$ -particle cluster vertex  $\Gamma_n$ .

Another problem in applying the chemical picture is the treatment of a dynamic interaction which would arise, e.g., by introducing the screened potential. Then, the one-frequency propagator is obtained from the Bethe-Goldstone equation only for the static approximation of the interaction potential, cf. /7/, /9/ and /12/ for the introduction of an effective in-medium interaction. The dynamic character of the interaction can be treated by help of perturbation theory.

The modifications of bound state properties because of medium effects is a highly interesting problem in the chemical picture which can be treated in a systematic way using the method of Green functions. Another approach to a many particle system which allows to introduce the chemical picture is the formalism of functional integration, where according to the Hubbard-Stratonovich transformation of the effective action functional, new fields are introduced which are related to n-particle clusters, see /13/.

In conclusion, the chemical picture works as a prescription to select relevant diagrams in order to include cluster (bound state) formation at low density, but from these diagrams results are evaluated which are valid for arbitrary density.

#### References

- /1/ Kraeft, W.D., Kremp, D., Ebeling, W., Röpke, G.: Quantum Statistics of Charged Particle Systems, Akademie-Verlag, Berlin, and Plenum Press, New York and London 1986
- /2/ Röpke, G., Münchow, L., Schulz, H.: Nucl.Phys. A379 (1982) 536  
Röpke, G., Schmidt, M., Münchow, L., Schulz, H.: Nucl.Phys. A399 (1983) 434
- /3/ Röpke, G., Blaschke, D., Schulz, H.: NBI-preprint 85-38
- /4/ Fetter, A.L., Walecka, J.D.: Quantum Theory of Many Particle Systems, McGraw-Hill, New York 1971
- /5/ Kadanoff, L.P., Baym, G.: Quantum Statistical Mechanics, Benjamin, New York 1962
- /6/ Ebeling, W., Kraeft, W.D., Kremp, D.: Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids, Akademie-Berlag, Berlin 1976
- /7/ Röpke, G., Kilimann, K., Kremp, D., Kraeft, W.D., Zimmermann, R.: phys.stat.sol.(b) 88 (1978) k59  
Zimmermann, R., Kilimann, K., Kraeft, W.D., Kremp, D., Röpke, G.: phys.stat.sol.(b) 90 (1978) 175
- /8/ Röpke, G., Der, R.: phys.stat.sol.(b) 92 (1979) 501

- /9/ Röpke, G.: *Physica* A121 (1983) 92  
Höhne, F.E., Redmer, R., Röpke, G., Wegener, H.: *Physica*  
128A (1984) 643  
Kremp, D., Schlanges, M., Bornath, T.: *J.Stat.Phys.*, in  
press
- /10/ Stoltz, H., Zimmermann, R.: *phys.stat.sol.(b)* 94 (1979) 135
- /11/ Hanamura, E.: *J.Phys.Soc.Japan* 37 (1974) 1553  
Girardeau, M.: *J.math.Phys. (New York)* 19 (1978) 2605  
Brittin, W.E., Sakakura, A.Y.: *Phys.Rev.* A21 (1980) 2050
- /12/ Kremp, D., Kilimann, K., Kraeft, W.D., Stoltz, H., Zimmer-  
mann, R.: *Physica* 127A (1984) 646  
Redmer, R., Röpke, G.: *Physica* 130A (1985) 523
- /13/ Blaschke, D., Röpke, G., Reinhardt, H.: in preparation

Author

Doz. Dr. G. Röpke  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik

DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

Zur Diagrammtechnik für Greensche Funktionen mit Spinoperatoren

A. KOHNEL

1. Einleitung

Die Anwendung der Methode der Greenschen Funktionen (GF) in der statistischen Physik hat sich vielfältig bewährt. Die Behandlung von Spinmodellen mit dieser Methode stößt jedoch auf zusätzliche Schwierigkeiten wegen der Vertauschungsregeln der Spinoperatoren und wegen des Verschwindens der  $(2S+1)$ -ten Potenz der Leiteroperatoren. Bei der Entwicklung einer Diagrammtechnik bereiten diejenigen Terme Schwierigkeiten, die wegen des Versagens des üblichen Wick-Theorems zusätzlich auftreten. Wir konnten zeigen, daß die Berechnung der ersten beiden Ordnungen der Störungstheorie nach verschiedenen Methoden das gleiche Ergebnis liefert /1/. Dagegen ist die Summation der Störungsreihe bei verschiedenen Autoren unterschiedlich /2/. Es ist bisher nicht gelungen, die Dysonsche Tieftemperaturmagnetisierung /3/ unter Verwendung von GF mit Spinoperatoren zuverlässig zu reproduzieren /4/. Diese Tatsache ist interessant im Zusammenhang mit der Arbeit /5/, in der gezeigt wird, daß die unphysikalischen Zustände im Dysonschen Vorgehen nicht weit oberhalb der physikalischen Zustände liegen. In /6/ wird eine Diagrammtechnik vorgestellt, die wiederum nicht erkennen läßt, wie die Störungsreihe zweckmäßig zu summieren ist. Es erscheint daher angebracht, die Grundzüge der Diagrammtechnik für GF mit Spinoperatoren noch einmal zu analysieren.

2. Störungsreihe und Wick-Theorem

Spinoperatoren gehorchen den Vertauschungsregeln

$$[s_f^z, s_g^z] = \pm \delta_{fg} s_f^z, \quad [s_f^+, s_g^-] = 2 \delta_{fg} s_f^z \quad (1)$$

und erfüllen die Beziehungen

$$s^{+(2S+1)} = 0, \quad s^{-(2S+1)} = 0 \quad (2)$$

Die Kommutatoren (1) sind wiederum Operatoren, was die unmittelbare Anwendung des Wick-Theorems in der üblichen Form unmöglich macht. Wir wollen hier das isotrope Heisenberg-Modell behandeln, dessen Hamilton-Operator ist  $H = H_0 + H_1$  mit

$$H_0 = \mu_B \mathcal{H} + J(0) \quad \text{und} \quad H_1 = - \sum_{f,g} J_{fg} (S_f^+ S_g^- + S_f^- S_g^+) \quad (3)$$

$\mu_B$  ist das Bohrsche Magneton,  $\mathcal{H}$  das äußere Magnetfeld;  $J(0)$  ist die Fourier-Transformierte von  $J_{fg}$  für  $k=0$ ,  $J_{ff}=0$ . Zu berechnen ist die Greensche Einteilchen-Funktion in der Matsubara-Technik /7/

$$G_{lm}(\tau_l - \tau_m) = - \langle T\{S_l^+(\tau_l) S_m^-(\tau_m) G(1/T)\} \rangle_o / \langle G(1/T) \rangle_o \quad (4)$$

wobei  $G$  die übliche S-Matrix ist. Die Operatoren sind im Wechselwirkungsbild zu nehmen, die Mittelung erfolgt mit  $H_0$ . Durch Reihenentwicklung der S-Matrix entsteht die Störungsserie, in der Spuren von immer mehr Operatoren auftreten. Diese Spuren werden mit der folgenden Beziehung zerlegt, die das Analogon zum Wick-Theorem für Spinoperatoren darstellt /8/:

$$\begin{aligned} \langle T(S_1^{\alpha_1} S_2^{\alpha_2} \dots) \rangle_o &= \frac{1}{2 \langle S^z \rangle_o} \left\{ G_{12}^o(\tau_1 - \tau_2) \langle T([S_1^{\alpha_1}, S_2^{\alpha_2}] S_3^{\alpha_3} \dots) \rangle_o \right. \\ &\quad \left. + G_{13}^o(\tau_1 - \tau_3) \langle T(S_2^{\alpha_2} [S_1^{\alpha_1}, S_3^{\alpha_3}] \dots) \rangle_o + \dots \right\} \quad (5) \end{aligned}$$

Darin ist  $G_{lm}^o(\tau_l - \tau_m)$  die ungestörte Greensche Funktion, deren Fourier-Transformierte ist

$$G^o(\omega_n, \vec{k}) = \frac{2 \langle S^z \rangle_o}{i\omega_n - \epsilon_0} \quad (6)$$

$\omega_n$  sind die Bose-Frequenzen. Die in (5) auftretenden Kommutatoren sind wiederum Operatoren, die ihrerseits wieder mit anderen in der Spur enthaltenen Operatoren kontrahiert werden können. Diese Kontraktionen ergeben zusätzliche Terme im Vergleich zum Bose-Fall, wenn die Kommutatoren c-Zahlen sind und aus den Spuren herausgezogen werden können. Die Diagrammdarstellung gerade dieser Terme bereitet die Schwierigkeiten. Außerdem entstehen Spuren über immer mehr  $S^z$ -Operatoren, die noch zu berechnen sind (s. /8/).

Alle bis zur zweiten Ordnung der Störungstheorie auftretenden Diagramme sind in Abb. 1 wiedergegeben. Eine ausgezogene Linie

bedeutet  $G^0$ , ein Punkt die transversale Wechselwirkung  $-\int dt \sum f_{ij} J_{ij}$ , eine gestrichelte Linie  $K^{zz} = \langle S_1^z S_m^z \rangle_o - \langle S^z \rangle_o^2$ ; die gestrichelte Doppellinie steht für  $K^{zzz}$ , den nicht zerfallenden Teil von  $\langle S_1^z S_m^z S_n^z \rangle_o$ . Ein offener Kreis bedeutet  $\langle S^z \rangle_o$ . Zusätzliche Faktoren  $1/(2 \langle S^z \rangle_o)$  sind einzuführen für die Verbindung einer Wellenlinie mit einer einlaufenden  $G^0$ -Linie und für ein auf eine  $G^0$ -Linie aufgesetztes Dreieck, die Verbindung einer  $G^0$ -Linie mit einer (einfach oder doppelt) gestrichelten Linie erhält den Faktor  $1/\langle S^z \rangle_o^2$ . Ein Dreieck bedeutet den Faktor  $1/(2 \langle S^z \rangle_o^2)$ , wenn es mit einer Seite auf einer  $G^0$ -Linie liegt.

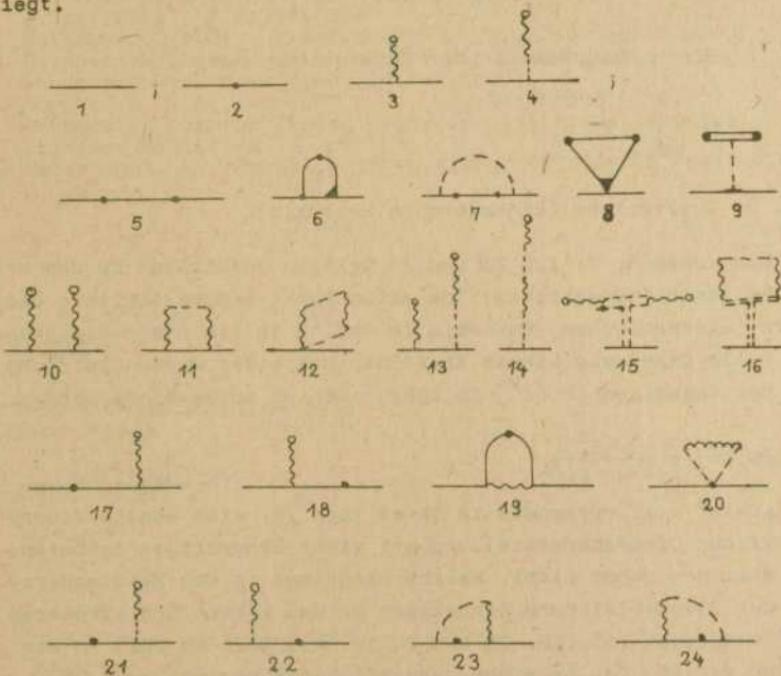


Abb. 1 Diagramme bis zur zweiten Ordnung der Störungstheorie

### 3. Summation

Oblicherweise wird die Störungsreihe für die Greensche Einteilchenfunktion mit Hilfe der Dyson-Gleichung summiert

$$= \longrightarrow + \longrightarrow \odot \longrightarrow \quad (7)$$

Die irreduziblen Diagramme 3, 8, 9, 14, 15 und 16 in Abb. 1 lassen sich nicht in die Dyson-Gleichung (7) einbeziehen, weil sie nur eine GF mit zwei freien Enden enthalten. Es stellt sich heraus, daß diese Diagramme in der Entwicklung für  $\langle S^z \rangle$  enthalten sind (Abb. 2) und somit einen Faktor  $\langle S^z \rangle$  statt  $\langle S^z \rangle_0$  im Zähler der GF ergeben. Die Diagramme 13, 21, 22 sind reduzible Diagramme, die zur Entwicklung von  $\langle S^z \rangle$  einer G-Linie beitragen.

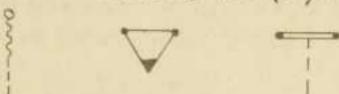


Abb. 2 Erste Diagramme in der Entwicklung von  $S^z$



Abb. 3 Zusätzliche (kinematische Eckteile)

Die Diagramme 6, 7, 12, 23 und 24 bringen zusätzlich zu den ursprünglichen (dynamischen) Eckteilen Punkt und Wellenlinie die neuen (kinematischen) Eckteile in Abb. 3 in die Dyson-Gleichung ein. Alle Diagramme können somit mit Hilfe der Dyson-Gleichung und der Summation zu  $\langle S^z \rangle$  im Zähler der GF aufsummiert werden zu

$$G(\omega_n, \vec{k}) = \frac{2 \langle S^z \rangle}{i\omega_n - \epsilon(\vec{k})}$$

Barjachtar u.a. verwenden in ihrem Buch /6/ eine weniger übersichtliche Diagrammdarstellung mit nicht eindeutigen Symbolen. Sie erkennen daher nicht, welche Diagramme in den Massenoperator der Dyson-Gleichung einbezogen werden können und summieren mehr Diagramme (15, 16, 20 und 22 in Abb. 26.1 in /6/) in den Zähler der GF, der so einen zusätzlichen Summanden zu  $2 \langle S^z \rangle$  erhält. Infolge dieser unüblichen Summation zum Zähler der GF ergibt sich in /6/ eine Spinwellenenergie, die nicht mit der nach verschiedenen Methoden berechneten Spinwellenenergie in einer Theorie 1. Ordnung

$$\epsilon(\vec{k}) = \mu_B \delta + 2 \langle s^z \rangle [J(0) - J(k)] + \frac{1}{N \langle s^z \rangle} \sum_{\vec{q}} [J(\vec{q}) - J(\vec{q}-\vec{k})] [n(\vec{q}) + 2K^{22}(\vec{q})]$$

Übereinstimmt, weil dabei insbesondere die zusammengehörigen Diagramme 12 und 20 in Abb. 1 unterschiedlich summiert werden.

#### Literatur

- /1/ Kühnel, A., Trumper, S.: Acta Phys. Polon. A44 (1973) 493
- /2/ Kühnel, A.: Acta Phys. Polon. A54 (1977) 303
- /3/ Dyson, F.J.: Phys. Rev. 102 (1956) 1217, 1230
- /4/ Kühnel, A., Singer, W.: Acta Phys. Polon. A59 (1981) 153
- /5/ van Hemmen, J.L., Brito, A.A.S., Wreszinski, W.F.: J. Stat. Phys. 37 (1984) 187
- /6/ Barjachtar, W.G., Kriworutschko, W.N., Jablonski, D.A.: Greensche Funktionen in der Theorie des Magnetismus, Naukowa Dumka, Kiew 1984 (in Russisch)
- /7/ Abrikosov, A.A., Gorkov, L.P., Dzyaloshinski, I.E.: Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Prentice Hall 1963
- /8/ Haberlandt, H., Kühnel, A.: phys.stat.sol.(b) 60 (1973) 625

#### Verfasser

Prof. Dr. A. Kühnel  
Karl-Marx-Universität Leipzig  
Sektion Physik

DDR - 7010 Leipzig  
Karl-Marx-Platz

Multiphonon-Infrarotabsorption (MIRA) in Kristallen unter Berücksichtigung von Gitteranharmonizitäten und nichtlinearen Dipolmomenten

M. I. MALZ

Für die Infrarotabsorption, als eine Wechselwirkung zwischen einem Festkörpersystem und einem elektromagnetischen Feld, liefert die harmonische Näherung δ-förmige Absorptionslinien. Die experimentell gefundene Temperaturabhängigkeit, die Linienverbreiterung und -verschiebung bzgl. der harmonischen Absorptionstheorie werden durch Multiphononprozesse verursacht, die durch die Berücksichtigung von Nichtlinearitäten im Phononensystem, Nichtlinearitäten bzgl. des Gitterpotentials und des elektrischen Moments, erfaßbar sind. Mittels des Dichtematrixformalismus und des Apparates der Greenfunktionen wurde eine lineare halbklassische Responsetheorie aufgebaut, in der der Festkörper im Rahmen einer quantenmechanischen Vielteilchentheorie und das elektromagnetische Feld klassisch betrachtet wurden. Entsprechend der Placzekschen Konzeption kann man das Kristallpotential und das elektrische Moment nach den Verschiebungen aus den Gleichgewichtslagen entwickeln und normalkoordinatentransformieren. Der Absorptionskoeffizient lässt sich damit durch Dipol-Dipol-Matsumurafunktionen unter Einführung harmonischer Phononpropagatoren ausdrücken:

$$\alpha_{\mu\nu}(\omega) = \frac{\omega}{\epsilon_0 C_0 n' V} \lim_{\delta \rightarrow 0} \operatorname{Im} \frac{1}{\langle \hat{S}(\beta) \rangle} * \int du \langle \hat{T}_u \hat{M}_\mu(u) \hat{M}_\nu(u) \hat{S}(\beta) \rangle e^{i\omega_p u} \Big|_{i\omega_p \rightarrow \omega + i\delta}$$

Die Beiträge zum Absorptionskoeffizienten wurden diagrammatisch berechnet, wobei Scheitelpunkte des Typs —●— die verallgemeinerten Kopplungsparameter und Scheitelpunkte des Typs ~~~■— die vom Dipolmoment herkommenden Koeffizienten repräsentieren. Man erhält connected, partconnected und disconnected Diagramme. Mit den disconnected Diagrammen kürzt sich nach dem Verbundgraphentheorem der Faktor  $\langle \hat{S}(\beta) \rangle$  aus dem

Absorptionskoeffizienten. Die als partconnected bezeichneten Diagramme beschreiben die MIRA im Falle eines statischen äußeren Feldes. Die weitere Diskussion wurde auf connected Diagramme für die MIRA in inversionssymmetrischen, kovalenten Kristallen mit verschwindendem Dipolmoment erster Ordnung beschränkt. Unter Mitnahme von Nichtlinearitäten bzgl. des Dipolmoments und der Gitteranharmonizität sind in der Ordnung  $k=2$  und  $k=4$  zehn Diagramme zu diskutieren.

Die Diagramme a), b), c) liefern auch ohne das explizite Auftreten von Anharmonizitäten in den Diagrammstrukturen einen von Null verschiedenen Beitrag. Das Diagramm a) beschreibt in der niedrigsten möglichen Ordnung bei kovalenten Kristallen  $k=2$  die MIRA durch die Erzeugung und/oder Vernichtung von zwei Phononen durch ein Photon ohne einen weiteren anharmonischen Prozeß. Ebenfalls ohne die Erzeugung oder Vernichtung von "Bad"phononen trägt das Diagramm b) zum Zwei-Phononenregime und das Diagramm c) zum Drei-Phononenregime bei. Alle übrigen Diagramme erfassen neben einer Multiphononankopplung des Photons an den Festkörper auch anharmonische Prozesse; die Diagramme d), e), g) und i) im Zwei-Phononenbereich und die Diagramme f), h) und k) bis zum Dreiphononenbereich. Direkte Beiträge zum Einphononbereich sind durch Inversionssymmetriebetrachtungen herausgefallen.

Der hier gewählte Zugang erklärt die MIRA-Spektren über eine Summe von  $\delta$ -artigen Peaks. Die Amplituden der Peaks sind durch die Koeffizienten der Reihenentwicklungen gewichtet und sind Funktionen der Temperatur und der Frequenz. Alle zehn Diagramme liefern einen temperatur- und frequenzabhängigen Beitrag zum Absorptionskoeffizienten, wobei Diagramm a) für eine lineare Temperaturabhängigkeit und die übrigen Diagramme für eine quadratische Temperaturabhängigkeit im Hochtemperaturfall stehen. Im Tieftemperaturfall lässt sich das Ausfrieren der Differenzprozesse zeigen.

Detailliertere qualitative und quantitative Aussagen machen noch umfangreiche Untersuchungen der kombinierten Zustandsdichten, der Auswahlregeln für die Phonon-Phonon-Wechselwirkungsprozesse und numerische Abschätzungen notwendig.

### Literatur

- /1/ Barron, T.H.K., Klein, M.L.: in: Horton, G.K., Maradudin, A.A.: *Dynamical Properties of Solids*, Vol. 1, North-Holland Publ. Company, Amsterdam 1974
- /2/ Born, M., Huang, K.: *Dynamical Theory of Crystal Lattices*, Clarendon Press, Oxford 1954
- /3/ Elk, K., Gasser, W.: *Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik*, Akademie-Verlag, Berlin 1979
- /4/ Maradudin, A.A., Fein, A.E.: *Phys. Rev.* 128 (1962) 2589
- /5/ Günther, B.: *Dissertation (A)* PH Erfurt/Mühlhausen 1985

### Verfasser

Diplomlehrer M. Malz  
Pädagogische Hochschule Erfurt/Mühlhausen  
Sektion Mathematik/Physik  
WB Theoretische Physik

DDR - 5010 Erfurt

PSF 307

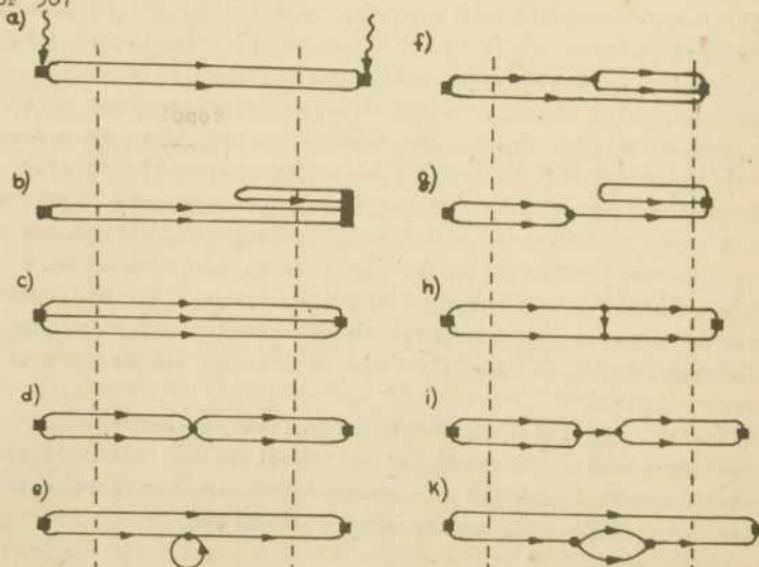


Abb. 1 Diagramme der Ordnung  $k=2$  und  $k=4$  für kovalente inversionsymmetrische Kristalle

Equilibrium Statistical Mechanics of Polymers and Topological Constraints

G. HEINRICH

Introduction

Many physical phenomena have a topological aspect. In polymer physics the self-entanglements or mutual entanglements of macromolecules play an important role. This can be illustrated by two examples:

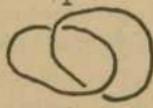
- It has been shown /1/ that interlocked DNA rings are widely distributed in nature - a fact of some importance in genetics since a DNA catenane cannot finish the replication cycle as the two daughter molecules would be linked with each other.
- A more exhaustive elucidation of the structure-property relationship of (technical important) rubber-elastic polymer materials could be achieved by considering the horrendously complex topological constraints of polymer networks using mean-field approximations (for a review see /2,3/).

In the following we give a short introduction into the statistical mechanics of the simplest case of two topologically linked polymer loops. Especially, we want to examine that this problem can be recast as a local gauge invariant field theory in the limit that the number of components goes to zero /4,5/. The corresponding solution of the two-dimensional case of an entangled polymer chain with a point-like obstacle /6/ can be used to derive the exact time-dependent Green's function for a particle diffusing in the presence of a half-plane barrier /7/.

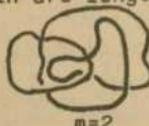
Configurational statistics of entangled polymers

We consider two mutually entangling closed polymers  $\Gamma_1(s_1)$  and  $\Gamma_2(s_2)$  where  $s_i$  ( $i=1,2$ ) denotes the chain arc length parameter.

$\Gamma_1(s_1)$



$\Gamma_2(s_2)$     or



etc.

A flexible polymer  $\underline{r}(s)$  of a dilute polymer solution has a short-range repulsive (= excluded volume) interaction between two segments separated along the chain contour and takes a self-avoiding random walk. Its statistical weight (Green's function) can be expressed as

$$G(\underline{r}, \underline{r}_0; LO) = \int_0^L D\underline{r}(s) \exp\left(-\int_0^L \mathcal{L}_0 ds - \frac{1}{2l^2} \iint_0^L \iint_0^L v(\underline{r}(s) - \underline{r}(s')) ds ds'\right) \quad (1)$$

$\underline{r}(0) = \underline{r}_0$

Usually, the self-avoiding interaction  $v(\underline{r})$  has been assumed to be short ranged and effectively replaced by  $l^2 v_0 \delta(\underline{r})$  with  $v_0$  the excluded volume of the chain.

$$\mathcal{L}_0 = \frac{3}{2l} (\partial \underline{r}(s) / \partial s)^2 \quad (2)$$

denotes the "Langrangian" of a free random walk with  $l$  the fundamental step length (segment length of the macromolecule) and  $L$  the full contour length.

Introducing a random Gaussian potential  $\phi(\underline{r})$  with correlation function just given by the interaction  $v(\underline{r})$ ,

$$\langle \phi(\underline{r}) \phi(\underline{r}') \rangle = l^{-2} v(\underline{r} - \underline{r}'), \quad (3)$$

eq. (1) becomes

$$G(\underline{r}, \underline{r}_0; LO) = \left\langle \int_0^L D\underline{r}(s) \exp\left(-\int_0^L (\mathcal{L}_0 + i\phi(\underline{r}(s))) ds\right) \right\rangle_{\phi} \quad (4)$$

where  $\langle \dots \rangle_{\phi}$  denotes averaging over all realizations of  $\phi$ . The self-avoiding walk can be viewed as a random walk under fluctuating imaginary potential.

The criterion for deciding whether the two molecules 1 and 2 are linked or not is provided by the topological invariant /8/

$$I_{12} = (4\pi)^{-1} \oint \oint d\underline{r}_1 \times d\underline{r}_2 \frac{\underline{r}_1 - \underline{r}_2}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|^3} = m \quad (5)$$

Then, the Green's function for one polymer (e.g. 1) takes the form

$$G_m(\underline{r}, \underline{r}_0; LO) = \left\langle \int_0^L D\underline{r}(s) \delta(I_{12}-m) \exp\left(-\int_0^L (\mathcal{L}_0 + i\phi(\underline{r}(s))) ds\right) \right\rangle_{\phi}$$

$$= \int \frac{dq}{2\pi} e^{-imq} \left\langle G_g(\underline{r}, \underline{r}_0; LO/\phi) \right\rangle_{\phi} \quad (7)$$

where

$$G_g(\underline{r}, \underline{r}_0; LO | \phi) = \int_{C_2}^{\underline{r}} D\underline{r}(s) \exp(-\int_0^L (\mathcal{L}_0 + i\phi) ds + igI_{12}) \quad (8)$$

Function (8) can be converted to that of a single quantum particle moving in a magnetic field produced by the other polymer (Edwards /6/). If one takes  $\underline{r}_2(s_2)$  as the field source the current density  $j_2$  can be defined via /5/

$$\underline{j}_2(\underline{r}) = \oint_{C_2} ds_2 \dot{\underline{r}}_2(s_2) \delta(\underline{r} - \underline{r}(s_2)); \dot{\underline{r}}_2 = \partial \underline{r}_2(s_2) / \partial s_2 \quad (9)$$

This current produces the "magnetic field"  $\underline{B}$  at the point  $\underline{r}$  according to the Biot-Savart law:

$$\underline{B}(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C_2} d\underline{r}_2(s_2) \times \frac{\underline{r}_1 - \underline{r}_2(s_2)}{|\underline{r} - \underline{r}_2(s_2)|^3} \quad (10)$$

which satisfies  $\text{div } \underline{B} = 0$  and  $\text{rot } \underline{B} = \underline{j}_2$ . The vector potential of this magnetic field is

$$\underline{A}(\underline{r}) = \frac{1}{4\pi} \oint_{C_2} d\underline{r}_2(s_2) \frac{1}{|\underline{r} - \underline{r}_2(s_2)|} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{\underline{j}_2(\underline{r}') d^3 \underline{r}'}{|\underline{r} - \underline{r}'|} \quad (11)$$

and yields  $\text{rot } \underline{A} = \underline{B}$ ,  $\text{div } \underline{A} = 0$  so that  $\Delta \underline{A} = -\underline{j}_2$ .

In terms of the magnetic field, expression (5) can be written

$$I_{12} = \oint_{C_1} \underline{B}(\underline{r}_1) d\underline{r}_1 = \oint_{C_1} \underline{B}(\underline{r}_1) \dot{\underline{r}}_1(s_1) ds_1 \quad (11)$$

and hence,  $G_g$  takes the form

$$G_g(\underline{r}, \underline{r}_0; LO | \phi, \underline{B}) = \int_{C_2}^{\underline{r}} D\underline{r}(s) \exp(-\int_0^L ds (\mathcal{L}_0 + i\phi + ig \dot{\underline{r}}(s) \underline{B}(\underline{r}(s)))) \quad (12)$$

which satisfies a "Schrödinger"-equation of a quantum charged particle moving under the magnetic field  $\underline{B}$  and an imaginary electric potential  $i\phi$ :

$$\left( \frac{\partial}{\partial L} - \frac{1}{6} (\nabla + ig\underline{B})^2 + i\phi \right) G_g = \delta(L) \delta(\underline{r} - \underline{r}_0) \quad (13)$$

Eqs. (10) and (11) exhibit a symmetry transformation, for, under an isotopic deformation of  $C_2$ , such that  $C_2 \rightarrow \tilde{C}_2$  and  $I_{12} \rightarrow \tilde{I}_{12} = I_{12}$  (preserving the linking number), we have  $\underline{B}(\underline{r}_1) \rightarrow \tilde{\underline{B}}(\underline{r}_1)$ ,  $\underline{B}(\underline{r}_1) + \nabla \mathcal{L}(\underline{r}_1)$  where  $\mathcal{L}(\underline{r}_1)$  is the solid angle subtended by the curve  $C_2 - \tilde{C}_2$  at  $\underline{r}_1$ . A similar equation is recognized in electromagnetism as a local gauge transformation of the vector

potential.

The term  $\exp(i\int_{C_1} B(r_1) dr_1)$  is known as the Wilson loop integral used in gauge theories of confinement /9/. It may be identified with a parallel displacement operator for vectors of the internal space which allows to examine the gauge description of electromagnetism from a topological point of view /10/.

Performing Fourier-transformation of the function (12) with respect to the chain arc length ( $s \rightarrow z$ ), introducing a field-theoretical functional integral representation of the Green's function, averaging with the method of replicas and finally Fourier-inversion with respect to the winding number leads to our starting expression for the Green's function of fixed linking number /5/:

$$G_m(\underline{r}, \underline{r}_0; z | B) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\Psi d\Psi^* \prod_{a=1}^n \Psi_a(\underline{r}) \cdot \Psi_a^*(\underline{r}_0) e^{-F_0 K^{-1/2}} \\ * \exp(-\frac{1}{2} K^{-1} (m - i \int d^3 r_1 B)^2) \quad (14)$$

with the free energy  $F_0 = \frac{1}{2} |\nabla \Psi|^2 + z |\Psi|^2 + v_0 |\Psi|^4$  and  $K = 1 \int d^3 r_1 B^2 |\Psi|^2$ .  $\Psi \equiv (\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n)$  denotes the n-component field and  $i = \frac{e}{2i} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$  a "quantum current density".

The whole problem can be expressed in terms of field theoretical languages. The statistical weight of B is characterized by the fluctuations of the constraining polymer. Two approximations simplify the situation drastically:

- the assumption of a fixed configuration of the constraining polymer /5/
- performing the average over all the configurations of the back-ground macromolecule in the topological invariant (5) /4/.

#### References

- /1/ Wang, J.C.: Accounts Chem. Res. 6 (1973) 252
- /2/ Heinrich, G.: Diss.B, TH Merseburg 1985
- /3/ Heinrich, G., Straube, E., Helmke, G.: Advances in Polymer Science, Springer, Heidelberg, to be published 1986
- /4/ Brereton, M.G., Shah, S.: J.Phys. A13 (1980) 2751
- /5/ Tanaka, F.: Progress of Theor. Physics 68 (1982) 148

- /6/ Edwards, S.F.: Proc.Phys.Soc. 91 (1967) 513  
/7/ Wiegel, F.W., Boersma, J.: Physica 122A (1983) 325  
/8/ Alexandroff, P., Hopf, H.: Topologie I, Springer-Verlag,  
Berlin 1935  
/9/ Wilson, K.G.: Phys.Rev. D10 (1974) 2455  
/10/ Leinaas, J.M.: Fortschritte der Physik 28 (1980) 579

Author

Dr. G. Heinrich  
Technische Hochschule "Carl Schorlemmer"  
Leuna-Merseburg  
Sektion Physik

DDR - 4200 Merseburg  
Otto-Nuschke-Straße

On the evaluation of the diffusion coefficient of a polymer chain in solution by means of the Kirkwood diffusion equation

S. STEPANOW; G. HELMIS

### Abstract

The exact formulae for the diffusion coefficient and the mobility of a polymer chain in solution obtained by Fixman and Akcasu are derived here in a unified way.

Recently Fixman /1/ and Akcasu /2/ considered the question of the evaluation of the diffusion coefficient in a polymer chain in solution in the framework of the Kirkwood diffusion equation. Fixman studied the response of the velocity of the polymer chain to the external force, and obtained an exact expression for the mobility of the chain  $\mu$ . Akcasu started from the Einstein formula for the diffusion coefficient D. Using the projection operator technique she obtained an exact expression for D which is connected with  $\mu$  by means of the Einstein relation. In this paper we give the method enabling us to derive in an unique way the formulae for D and  $\mu$ , obtained earlier by Fixman and Akcasu in different ways. As a model we use the continuous model of polymer chain. The method can also be applied to the discrete model which was used by Fixman and Akcasu. The configuration of a chain is given by the vector position function  $r(s)$  ( $0 \leq s \leq L$ ), where L is the contour length of the chain. Instead of  $r(s)$  it is advisable to use its Fourier transform  $\xi_k$

$$r(s) = \sum_{k=0}^{\infty} Q_{sk} \xi_k$$

where  $Q_{s0} = 1/\sqrt{L}$  and  $Q_{sk} = \sqrt{2/L} \cos(\pi s k/L)$ .

The Kirkwood diffusion equation for the transition probability density  $P(\xi; t; \xi^0, t_0)$  ( $\xi = (\xi_0, \xi_1, \dots)$ ) is given by /3/

$$\partial P(\xi, t; \xi^0, t_0) / \partial t - L P(\xi, t; \xi^0, t_0) = \delta(t-t_0) \delta(\xi-\xi^0) \quad (1)$$

$$\text{where } L = \nabla_k^Y H_{kn}^{Y^0} (\nabla_n^A + \nabla_n^A U - \beta f_n^A) \quad (2)$$

$U$  is the free energy of the chain in units of  $k_B T$ ,  $f_n$  is the Fourier transform of the force density  $f(s)$ ,  $H_{kn}^{AV} = D_0 \delta_{kn} + T_{kn}^{AV}$  ( $D_0 = kT l/\zeta$ ,  $l$  is the statistical segment length and  $\zeta$  is the monomer friction coefficient)

$T_{kn}^{AV} = \int d\mathbf{s}_1 \int d\mathbf{s}_2 Q_{ks_1} T^{AV}(r(s_1) - r(s_2)) Q_{ks_2}$ , and  $T$  is the tensor of the hydrodynamic interaction given by its Fourier transform

$$T^{AV}(r(s_1) - r(s_2)) = \frac{kT}{\eta} \int q \frac{1}{q^2} (\delta^{AV} - \frac{q^A q^V}{q^2}) \exp(i q(r(s_1) - r(s_2)))$$

where  $\eta$  is the solvent viscosity and  $\int q = \int d^3 q / (2\pi)^3$ .

Now we split  $L$  as a sum of  $L_{int} = -\beta \nabla_k H_{kn}^{AV} f_n$  and  $L_o = L - L_{int}$ . Analogous to the formulation of the propagator method in quantum mechanics one can rewrite (1) in the integral form

$$P_f(t, t_o) = P(t, t_o) - \beta \int_{t_o}^t dt' \int d\mathbf{x}' P(t, t') \nabla_k^{AV} H_{kn}^{AV} f_n P_f(t', t_o) \quad (3)$$

The abbreviation  $P(t, t_o) = P(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_o)$  is used in (3).

Because  $P(t, t_o)$  describes the Brownian motion of the centre of mass of the polymer chain, it does not possess the stationary solution. However, the transition probability of the internal coordinates  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$   $P_i(t, t_o) = \int d\mathbf{x}'_o P(t, t_o)$  possesses the stationary solution

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_i(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t_o) = P_{eq}(\mathbf{x}) \sim \exp(-U)$$

It is well known that  $P(t, t')$  obeys the inverse Kolmogorov equation

$$-\partial P(t, t') / \partial t' = L^+ P(t, t') \quad (4)$$

where  $L^+$  is the adjoint of the operator  $L$  given by eq. (8).

By use of (4) it can be shown that the following identity

$$P_{eq}(\mathbf{x}) = \int' d\mathbf{x}' P_i(\mathbf{x}, t; \mathbf{x}', t') P_{eq}(\mathbf{x}') \quad (5)$$

holds, where the prime at the integral in (5) means the integration over  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$  The functions  $P_{eq}$  and  $P_i(t, t')$  do not depend on the coordinate of the centre of mass  $\mathbf{x}_o$ .

Let us consider the evaluation of the average of a stochastic variable  $C(\mathbf{x})$ . According to the definition

$$\langle C_t \rangle = \int d\mathbf{x} C P(t, t_o) \quad (6)$$

and  $\langle c_t \rangle_a = \int d\mathbf{f}^0 \langle c_t \rangle_{eq}(\mathbf{f}^0)$ . Differentiation of (6) with respect to  $t$  gives

$$\partial \langle c_t \rangle / \partial t = \langle L^+ c \rangle \quad (7)$$

where

$$L^+ = \nabla_k^A H_{kn}^{AV} \nabla_n^V - (\nabla_n^A U) H_{nk}^{AV} \nabla_k^V + \beta f_n^A H_{nk}^{AV} \nabla_k^V \quad (8)$$

is the adjoint of  $L$ . Rewriting (7) in the integral form, followed by iteration, we arrive at

$$\langle c_t \rangle = \exp(L^+ t) C(0) \quad (9)$$

In an analogous way the average  $\langle A(t)B(t') \rangle = \int d\mathbf{f} \int d\mathbf{f}' P(t,t')B(\mathbf{f}')P(t',t_0)$  can be represented as follows

$$\langle A(t)B(t') \rangle = \exp(L^+ t') B(0) \exp(L^+(t-t')) A(0) \quad (10)$$

Now we identify  $C$  with  $(\mathbf{f}_0 - \mathbf{f}_0^0)^2$ . Then (7) gives

$$\frac{d}{dt} \langle \Delta \mathbf{f}_0^2(t) \rangle_a = 3LD(t) = \langle H_{oo}^{MM} \rangle_a - \langle A^M \Delta \mathbf{f}_0^M(t) \rangle_a \quad (11)$$

where the quantity  $A^M = \nabla_n^V U H_{no}^{VM}$  is introduced. For large  $t$   $D(t)$  gives the diffusion coefficient of the polymer chain. The first term on the right hand side of (11) gives the Kirkwood formula for the diffusion coefficient. The equation (11) alternatively can be rewritten as follows

$$3LD(t) = \langle v_c^M(t) \Delta \mathbf{f}_0^M(t) \rangle_a \quad (12)$$

where  $v_c$  will be interpreted as the velocity of the polymer chain

$$v_c^M(t) = -\frac{1}{\sqrt{L}} ((\nabla_n^V U) H_{no}^{VM} + H_{on}^{MV} \nabla_n^V \ln P(t,t_0)) \quad (13)$$

Because  $H_{oo}$  does not depend on  $\mathbf{f}_0$ , the first term on the right hand side of (11) (designated by  $3LD_0$ ) is given by a conformational average. In the second term of (11) we will explicitly separate the coordinate  $\mathbf{f}_0$ . At first we represent  $L$  as follows  $L = L_o + L_c$ , where  $L_o$  is given by (2) with the difference that the summation start with  $k,n = 1$  and  $L_c$  is

$$L_c = \nabla_o^A H_{oo}^{AV} \nabla_o^V + 2 \nabla_o^A H_{on}^{MV} \nabla_n^V + \nabla_o^A H_{on}^{MV} \nabla_n^V U \quad (14)$$

Now we consider  $L_c$  as a perturbation and express  $P(t,t_0)$  in a way analogous to eq. (3). Up to first order of  $L_c$  it follows

that

$$P(t, t_0) = \delta(\xi_0 - \xi'_0) P_1(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt' \int d\xi' P_1(t, t') L_C \delta(\xi_0 - \xi'_0) P_1(t', t_0) \quad (15)$$

We designate the second term in (11) by  $-3L D_1(t)$ . Using (15) after some simple transformations we arrive at

$$3L D_1(t) = - \int dt' \int d\xi' \int d\xi' A'' P_1(t, t') (2 H_{\text{om}}^{xx} \nabla_m^x + \\ + (\nabla_m^x U) H_{\text{mo}}^{xx} P_1(t', 0) P_{\text{eq}}$$

Using (5) we transform the right hand side of the above equation to

$$3L D_1(t) = \int_{t_0}^t dt' \int d\xi' \int d\xi' A''(\xi') P_1(\xi', t; \xi', 0) A''(\xi') P_{\text{eq}}(\xi') \quad (16)$$

By means of the eq. (8) eq. (16) can be represented in the operator form

$$3L D_1(t) = \int_{t_0}^t dt' ((\exp(L_0^{xx} t') A) A)_a \quad (17)$$

Finally, we obtain for the diffusion coefficient

$$D = \frac{1}{3L} ((H_{\text{oo}}^{xx})_1 - \int_{t_0}^{\infty} dt' \int d\xi' \int d\xi' A''(\xi') P_1(\xi', t'; \xi', 0) A(\xi') P_{\text{eq}}(\xi')) \quad (18)$$

The eq. (18) coincides with that by Akcasu obtained by means of the projection operator technique.

Now we will evaluate the average velocity of the polymer chain on which a constant force  $F$  acts. The average velocity of the chain is given by

$$v_c^x(t) = \frac{1}{fL} \frac{\partial}{\partial t} \langle \xi'_0 \rangle_a \quad (19)$$

Identifying  $C$  in (7) with  $\xi'_0$  we obtain

$$\sqrt{L} v_c^x(t) = \beta f_n^x \langle H_{\text{no}}^{xx} \rangle_a - \langle A'' \rangle_a^f \quad (20)$$

The symbol  $f$  in (20) means that the average has to be carried out by means of the perturbed transition probability given by eq. (3). Then, for the second term in (20) we arrive at

$$\langle A'' \rangle_a^f = \langle A'' \rangle_a - \beta \int_{t_0}^t dt' \int d\xi' \int d\xi' \int d\xi'_0 A'' P(t, t') \nabla_k^x H_{\text{kn}}^{xx} f_n^x P(t', 0) P_{\text{eq}} \quad (21)$$

$A''$  does not depend on  $\xi'_0$ . Because  $\int d\xi'_0 P(t, t') = P_1(t, t')$  also does not depend on  $\xi'_0$ , the integration over  $\xi'_0$  in (21) can be carried out and we arrive at

$$\langle A^M \rangle_a = \beta \int_0^t dt' \int d\mathbf{f} \int d\mathbf{f}' A^M P_1(t, t') f_n^{xy} H_{nk}^{xy} v_k u_{eq}$$

In the case of a constant force ( $f_n^x = F^x \delta_{no}/\sqrt{L}$ ) for the velocity of the polymer chain follows

$$v_c^x(t) = \frac{\beta}{3L} ((H_{00}^{MM})_a - \int_0^t dt' \int d\mathbf{f} \int d\mathbf{f}' A^M P_1(t, t') A^M P_{eq}) F^x \quad (22)$$

Finally, for the mobility of the polymer chain  $\mu = v_c^x/F^x$  we arrive at

$$\mu = \frac{\beta}{3L} ((H_{00}^{MM})_a - \int_0^\infty dt \int d\mathbf{f} \int d\mathbf{f}' A^M(\mathbf{f}) P_1(\mathbf{f}, t; \mathbf{f}', 0) A^M(\mathbf{f}') P_{eq}(\mathbf{f}')) \quad (23)$$

As expected  $\mu$  is connected with D by the Einstein relation  
 $D = kT\mu$ .

#### References

- /1/ Fixman, M.: J.Chem.Phys. 14 (1981) 1710
- /2/ Akcasu, A.Z.: Macromolecules 15 (1982) 1321
- /3/ Stepanow, S.: J.Phys. A 17 (1984) 3041

#### Authors

Dr. S. Stepanow, Prof. Dr. G. Helmrich  
 Technische Hochschule "Carl Schorlemmer"  
 Leuna-Merseburg  
 Sektion Physik

DDR - 4200 Merseburg

Otto-Nuschke-Straße

Stochastische Modellprozesse - Anwendung an einem Beispiel

A. TEUBEL

1. Einleitung

Das Verhalten physikalischer Systeme unter dem Einfluß stochastischer Störungen ist von großem Interesse. Gegenüber ihrem deterministischen Analogon können diese Systeme qualitativ neue Eigenschaften zeigen, die bei Änderung gewisser, das System oder das Rauschen charakterisierender Parameter, auftreten (rauschinduzierte Übergänge) ///. Dies betrifft sowohl stationäre Eigenschaften, wie etwa Modalität der stationären Wahrscheinlichkeitsdichte  $P_s$ , als auch dynamische Eigenschaften, wie das Langzeitverhalten von Momenten oder Korrelationen.

Obwohl diese Systeme fernab vom Gleichgewicht sind, können einige Begriffe aus der Theorie der Gleichgewichtsphasenübergänge erfolgreich übertragen werden. So ändern sich z.B. die Extremalstellen von  $P_s$  in der Nähe von Bifurkationen ähnlich wie Ordnungsparameter. Bei dynamischen Eigenschaften wird ein Übergang von exponentiellem zu algebraischem Abklingen von Korrelationen als Analogie zur kritischen Verlangsamung diskutiert.

Mit Hilfe stochastischer Differentialgleichungen

$$\dot{x}_t = f(x_t) + g(x_t) \cdot y_t \quad (1)$$

lassen sich eine Vielzahl dieser Systeme phänomenologisch beschreiben. Dabei treibt die stochastische Kraft  $y_t$  - z.B. äußere Felder oder nicht explizit interessierende innere Freiheitsgrade - den zu untersuchenden  $x$ -Prozeß an. Um über ihn quantitative Aussagen zu machen (etwa Berechnung von  $\langle x_t x_s \rangle$ ,  $P(x,t)$ ), ist es notwendig, einfache Modellprozesse zu betrachten. D.h., solche Prozesse, deren statistische Eigenschaften durch wenige Parameter charakterisiert werden.

## 2. Stochastische Modellprozesse

### 2.1. Gaußprozesse

Die einfachsten kontinuierlichen Modellprozesse werden durch eine Gaußverteilung beschrieben. Ihre Verwendung lässt sich z.B. physikalisch dann motivieren, wenn das Rauschen  $y_t$  durch Überlagerung einer Vielzahl kleiner unabhängiger Störungen entsteht (zentraler Grenzwertsatz). Gaußprozesse werden vollständig durch ihr Moment  $\langle y_t \rangle$  und ihre Autokorrelation  $\langle y_t y_s \rangle$  charakterisiert (Kumulanten ab 3. Ordnung verschwinden). Komplizierte Mittelwerte, die auch Funktionale des Prozesses enthalten können, lassen sich mit Hilfe verschiedener Theoreme bestimmen /5,8,9/.

Der Wienerprozeß (WP) bzw. Ornstein-Uhlenbeck-Prozeß (OUP) gehören zur Klasse der Gaußprozesse mit Markoveigenschaft. Der WP  $W_t$  besitzt stationäre und unabhängige Zuwächse mit  $\langle W_t \rangle = 0$  und  $\langle W_t W_s \rangle = \Gamma \min(t,s)$  und kann den Ort eines Brownschen Teilchens beschreiben. Da der Prozeß jedoch nirgends differenzierbar ist, existiert für das Teilchen keine Geschwindigkeit im gewöhnlichen Sinne. Diese kann durch den OUP  $v_t$  modelliert werden. Der OUP ist der einzige stationäre Gaußsche Markovprozeß und besitzt eine exponentiell abfallende Autokorrelation (Satz von Doob). D.h.,  $\langle v_t \rangle = 0$  und  $\langle v_t v_s \rangle = \delta^2 \exp(-\gamma|t-s|)$ . Im Grenzübergang  $\delta, \gamma \rightarrow \infty$  mit  $\delta^2/2\gamma = \Gamma$  geht er in einen  $\delta$ -korrelierten Prozeß, das Gaußsche weiße Rauschen über, das im Sinne einer Distribution verstanden werden muß. Für das durch das GWR angetriebene System (1) existiert eine weit ausgearbeitete Theorie, und es kann eine Vielzahl exakter Resultate erhalten werden (siehe z.B. Lit. in /2/). Ist man an den Effekten endlicher Korrelationszeit interessiert, so kann man jedoch für ein durch den OUP angetriebenes System (1) nur wenige exakte Ergebnisse ableiten. Ein Oberblick über den Zusammenhang der drei Prozesse wird in Abb. 1 gegeben (siehe auch /6/).

### 2.2. Dichotomer Markovprozeß (DMP), Kubo-Anderson-Prozeß (KAP), Känguruh-Prozeß (KP)

Der einfachste diskrete Prozeß, der DMP, springt mit gleicher Wahrscheinlichkeit zwischen den zwei Werten  $I_t = \pm \Delta$ . Die An-

zahl der Sprünge in der Zeit  $t$  ist poissonverteilt mit einer mittleren Sprungfrequenz  $\alpha$ . Im stationären Fall wird er vollständig durch  $\langle I_t \rangle = 0$  und  $\langle I_t I_s \rangle = \Delta^2 \exp(-2\alpha|t-s|)$  charakterisiert. Höhere Momente und kompliziertere Mittelwerte lassen sich wieder mit Hilfe verschiedener Theoreme berechnen /3,9/. Die Differentiationsformel von Shapiro und Loginov soll angegeben werden. ( $\phi_t[I]$  ist ein Funktional von  $I_\tau$ ,  $\tau \leq t$ .)

$$\frac{d}{dt} \langle I_t \phi_t[I] \rangle = -2\alpha \langle I_t \phi_t[I] \rangle + \langle I_t \dot{\phi}_t[I] \rangle \quad (2)$$

Da  $I_t^2 \equiv \Delta^2$ , erhält man z.B. für (1) mit (2) aus der stochastischen Liouvillegleichung für die Dichte  $\delta(x-x_t)$  ein geschlossenes Differentialgleichungssystem für  $\langle \delta(x-x_t) \rangle$  und  $\langle I_t \delta(x-x_t) \rangle$ . Im Grenzfall des GWR ( $\Delta, \alpha \rightarrow \infty$ ,  $\Delta^2/2\alpha = \Gamma$ ) geht dieses in die Fokker-Planck-Gleichung über. Im Gegensatz zum OUP erhält man für den DMP eine größere Anzahl exakter Resultate (z.B.  $P_s(x)$  mit Maxima  $x_{\max}$ ).

Eine Verallgemeinerung, der KAP, wird gegeben, wenn zu den poissonverteilten Sprungzeiten  $t_i$  (mit mittlerer Sprungfrequenz  $\alpha$ ) der Prozeß mit einer Wahrscheinlichkeit  $P(s_i)$  auf den Wert  $s_i$  (unabhängig von  $s_{i-1}$ ) springt. Im stationären Fall ist dann  $\langle y_t \rangle = 0$  und  $\langle y_t y_s \rangle = \langle s^2 \rangle \exp(-\alpha|t-s|)$ . Obwohl auch hier (2) gültig ist, bricht das beim DMP erwähnte Verfahren zur Herleitung eines geschlossenen Gleichungssystems wegen  $\langle y_t^2 \rangle + \text{const}$  nicht ab, und es sind nur Näherungsverfahren anwendbar.

Eine Erweiterung hiervon ist der Känguruuhprozeß. Er springt mit einer vom Absprungpunkt  $z$  abhängigen Frequenz  $\alpha(z)$ . Die Sprungzeiten sind also nicht mehr poissonverteilt. Die Übergangsraten wird durch  $W(y'|y) = \alpha(y) \cdot Q(y')$  gegeben. Die stationäre Wahrscheinlichkeit ist dann  $P_s(y) = Q(y) \langle \alpha \rangle / \alpha(y)$ . Durch entsprechende Wahl von  $\alpha(y)$  kann man Prozesse "beliebiger" Korrelationsfunktion erzeugen (etwa  $t^{-\mu}$ ) /4/.

### 3. Das Stratonovichmodell

Für das eindimensionale, nichtlineare Stratonovichmodell unter dem Einfluß eines DMP

$$\dot{x}_t = a \cdot x_t - x_t^3 + I_t \cdot x_t \quad (3)$$

wird die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte angegeben und kurz diskutiert ( $I_t$  beschreibt also die stochastische Änderung des Kontrollparameters  $a$ ). Dieses Modell dient zur Beschreibung autokatalytischer Reaktionen, hydrodynamischer Instabilitäten oder von Lasern und stellt ein vereinfachtes  $\varphi^4$ -Modell dar. Der DMP springt zwischen den zwei Werten  $\pm \Delta$ . Jede durch eine Realisierung  $I_t$ ,  $t \leq t$  erzeugte Trajektorie  $x_t[I]$  wird durch  $x_t [I \equiv +\Delta]$  und  $x_t [I \equiv -\Delta]$  beschränkt. Für  $t \rightarrow \infty$  gelangen also alle Trajektorien in das endliche Intervall  $[x_\infty [+ \Delta], x_\infty [- \Delta]]$ , den Träger von  $P_s(x)$ . Für das System (3) wird er in Abhängigkeit vom Parameter  $a/\Delta$  in Abb. 2 dargestellt. D.h.,  $P_s(x)$  ist außerhalb des schraffierten Gebietes Null. Im Träger gilt:

$$P_s(x) = N \cdot |x|^{-2(\lambda+\mu)-1} \cdot (a+\Delta-x^2)^{\lambda-1} (x^2-a+\Delta)^{\mu-1} \quad (4)$$

unter der Voraussetzung  $P(x > 0, t=0) = 1/2$  mit  $2\lambda = \alpha/(a+\Delta)$ ;  $2\mu = \alpha/(a-\Delta)$ . Die stationäre Wahrscheinlichkeitsdichte (4) ist im Falle  $a \leq 0$  bzw.  $\alpha = 0$  nicht normierbar und geht in entsprechende  $\delta$ -Verteilungen über. Das qualitative Verhalten von  $P_s(x)$  wird in der gesamten  $(\alpha/2\Delta, a/\Delta)$ -Parameterebene in Abb. 3 gezeigt. Der Übergang von monomodal zu bimodal erfolgt bei der Bifurkationslinie

$$a_c = (\alpha^2 + \Delta^2)^{1/2} - \alpha \quad (5)$$

In ihrer Nähe verhält sich das Maximum

$$x_{\max} = A(\alpha, \Delta) (a - a_c(\alpha, \Delta))^{1/2} \quad (6)$$

wie ein Ordnungsparameter bei kontinuierlichen Phasenübergängen. Der kritische Exponent  $\beta = 1/2$  hängt nur von der Wahl von  $f(x)$  und  $g(x)$ , nicht aber von den Rauschparametern ab. Im mittleren Bereich der Abb. 3 hat  $P_s(x)$  Maxima, die kein deterministisches Analogon besitzen und als rauschinduzierte Übergänge bezeichnet werden. Eine ausführliche Diskussion des Modells und die Angabe der zeitlichen Entwicklung von Momenten  $\langle x_t^n \rangle$  ist in /1,2/ enthalten.

### Literatur

- /1/ Behn, U., Schiele, K.: JINR Dubna E17-84-300 (1984)
- /2/ Behn, U., Schiele, K., Teubel, A.: ersch.in: Wiss.Z. KMU Leipzig (1985)
- /3/ Bourret, R., Frisch, U., Pouquet, A.: Physica 65 (1973) 303
- /4/ Brissaud, A., Frisch, U.: J.Math.Phys. 15 (1974) 524
- /5/ Furutsu, K.: J.Res.NBS D 667 (1963) 303
- /6/ Gardiner, C.W.: Handbook of Stochastic Methods, Springer Berlin 1982
- /7/ Horsthemke, W., Levefer, R.: Noise Induced Transitions, Springer, Berlin 1984
- /8/ Новиков, Е.А.: ЖЭТФ 47 (1964)
- /9/ Шапиро, З.Е; Логинов, В.И.: Динамические системы при случайных воздействиях, Наука, Новосибирск 1983

### Verfasser

Dipl.-Phys. Andreas Teubel  
Karl-Marx-Universität Leipzig  
Sektion Physik

DDR - 7010 Leipzig  
Karl-Marx-Platz 10

Abb. 1 Zusammenhang zwischen WP, OUP und GWR

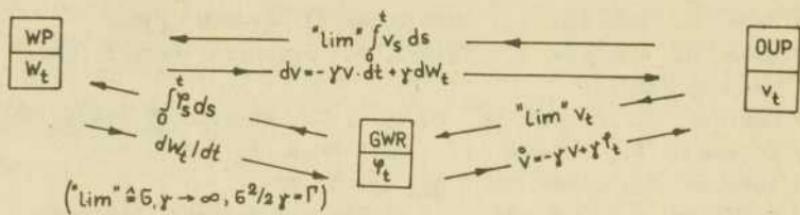


Abb. 2 Träger von  $P_s(x)$  in Abhängigkeit von  $a/\Delta$

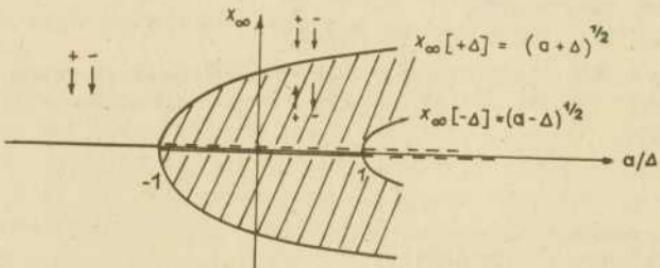
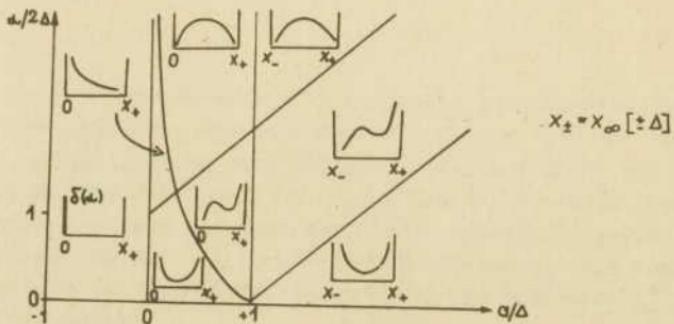


Abb. 3 Qualitative Form von  $P_s$  für  $x \geq 0$  in der Parameter-ebene



Dynamik von Phasenfronten in ungeordneten Medien

A. ENGEL

Wir betrachten ein physikalisches System, dessen Zustand eindeutig durch eine Funktion  $n(r,t)$  der Ortskoordinate  $r \in R^d$  und der Zeit  $t$  bestimmt ist (skalarer Ordnungsparameter). Die Dynamik lässt sich in vielen Fällen durch Differentialgleichungen vom Reaktions-Diffusionstyp

$$\partial_t n(r,t) = W(n) + D \partial_r^2 n(r,t) \quad (1)$$

beschreiben. Für Systeme fern vom thermodynamischen Gleichgewicht und Gleichgewichtssysteme mit kooperativem Verhalten ist die Funktion  $W(n)$  nichtlinear. Wesentliche Konsequenz dieser Nichtlinearität ist die Existenz mehrerer homogener stationärer Lösungen

$$n(r,t) \equiv n_i \quad \text{mit } W(n_i) = 0$$

Ist die Diffusion hinreichend schwach bzw. die Nichtlinearität hinreichend stark, so existiert eine Vielzahl von Systemkonfigurationen, für die  $n(r,t) = n_i$  für  $r \in G_i$  gilt, wobei die Gebiete  $G_i \subset R^d$  durch schmale Übergangsschichten voneinander getrennt sind. Solche Übergangsschichten treten unter dem Namen Phasenfronten, Grenzflächen, Oberflächen, Interfaces, Diskommensurationen und Solitonen in einer Vielzahl physikalischer Systeme auf. Die Dynamik des Systems ist im Grenzfall starker Nichtlinearität bereits durch die zeitliche Entwicklung dieser Frontkonfigurationen gegeben. Im vorliegenden Beitrag soll die Wirkung stochastischer Einflüsse auf die Dynamik von Phasenfronten bistabiler Systeme untersucht werden.

Für bistabile Systeme hat  $W(n)$  drei Nullstellen  $n_1, n_2, n_3$ , wobei die mittlere,  $n_2$ , einem instabilen stationären Zustand entspricht. Eine große Zahl von Beispielen physikalischer Systeme, die durch (1) mit bistabilem  $W(n)$  beschrieben werden, findet man in /1-3/. Für diesen Fall ist gut bekannt, daß (1) eine

eindimensionale Kinklösung  $n_0(z-vt)$ ,  $n_0(\xi) \rightarrow n_1$  für  $\xi \rightarrow -\infty$ ,  $n_0(\xi) \rightarrow n_3$  für  $\xi \rightarrow +\infty$  besitzt. Diese Lösung entspricht einer Phasenfront in Form einer zur z-Achse senkrechten Hyper-ebene, die sich entlang der positiven z-Achse mit der Geschwindigkeit v bewegt. Bezeichnet man die Vektoren in dieser Hyper-ebene mit  $x \in \mathbb{R}^{d-1}$ ,  $(x, z) = r$ , so können Abweichungen von der planaren Phasenfront mit Hilfe einer Funktion  $f(x, t)$  durch das Ordnungsparameterprofil

$$n(r, t) = n_0(z - f(x, t)) \quad (2)$$

beschrieben werden (Abb. 1).

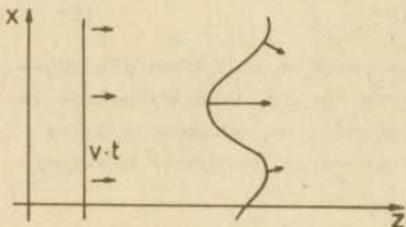


Abb. 1 Planare und ge-krümmte Phasenfront in  $d=2$  Dimensionen

Aus (1) kann mit Hilfe des Ansatzes (2) im Grenzfall starker Nichtlinearität die Bewegungsgleichung für  $f(x, t)$  systematisch ermittelt werden /4-6/. Man erhält:

$$\frac{\partial_t f(x, t)}{\sqrt{1+(\partial_x f)^2}} = v + D \partial_x \frac{\partial_x f}{\sqrt{1+(\partial_x f)^2}} \quad (3)$$

Die links stehende Normalengeschwindigkeit der Front setzt sich somit aus einem ortsunabhängigen Anteil  $v$  (Geschwindigkeit der planaren Front) und einem lokalen Anteil proportional zur mittleren Krümmung  $k = \partial_x \frac{\partial_x f}{\sqrt{1+(\partial_x f)^2}}$ , zusammen. Der zweite Term

führt zu einer Glättung der auftretenden Distortionen. Im folgenden wird nur der Fall  $|\partial_x f| \ll 1$  betrachtet, für den (3) sich vereinfacht zu

$$\partial_t f(x, t) = v + D \cdot \partial_x^2 f(x, t) \quad (4)$$

Der Einfluß von Unordnung kann durch einen stochastischen Quell-term in (1) modelliert werden:

$$\partial_t n(r,t) = W(n) + D \partial_r^2 n(r,t) + H(r,t) \quad (5)$$

Die Statistik des Zufallfeldes  $H(r,t)$  sei gaußsch mit den Momenten

$$\overline{H(r,t)} \equiv 0, \quad \overline{H(r,t)H(r',t')} = S(|r-r'|, |t-t'|) \quad (6)$$

Es sollen insbesondere zeitlich kurz korrelierte Unordnung (thermisches Rauschen) mit  $S(r,t) \sim \delta(t) \cdot S(r)$  und statische (eingefrorene) Unordnung  $S(r,t) = S(r)$ , wie sie etwa durch Störstellen in einem Festkörper realisiert ist, betrachtet werden. Aus (5) und (2) folgt analog zu (4)

$$\partial_t f(x,t) = v + D \partial_x^2 f(x,t) + h(x, f(x,t), t) \quad (7)$$

mit /7/

$$h(x,z,t) = \left[ \int d\xi e^{\frac{v\xi}{D} (\partial_\xi n_0)^2} \right]^{-1} \int d\xi e^{\frac{v\xi}{D} \partial_\xi n_0(\xi)} H(x, \xi + z, t) \quad (8)$$

Die Statistik von  $h(x,z,t)$  ist wieder gaußsch mit  $\overline{h(x,z,t)} \equiv 0$  und  $\overline{h(x,z,t)h(x',z',t')} = K(|x-x'|, |z-z'|, |t-t'|) \quad (9)$

wobei  $K(x,z,t)$  durch (6) und (8) festgelegt ist.

Die wesentliche Schwierigkeit bei der Lösung von (7) ist der nichtlineare letzte Term und die auszuführende Mittelung über die Unordnung. Beides lässt sich nach räumlicher Fouriertransformation in systematischer Weise durch eine Diagrammentwicklung realisieren /8,9/. Damit lassen sich folgende Auswirkungen der Unordnung auf die Frontausbreitung quantitativ beschreiben:

### 1. Frontaufrauhung

Diese wird durch die sogenannte statistische Breite  $\overline{f^2(x,t)}$  beschrieben. Man erhält in erster Ordnung der Störungstheorie:

$$\overline{f^2} = h^2 \int \frac{dq}{2\pi} \frac{d^{d-1}k}{(2\pi)^{d-1}} \frac{K(q,k)}{D^2 k^4 + v^2 q^2} \sim \frac{h^2}{D \cdot v} L^{3-d} \quad (d \leq 3) \quad (10)$$

für statische Unordnung und

$$\overline{f^2} = \frac{h^2}{2D} \int \frac{dq}{2\pi} \frac{d^{d-1}k}{(2\pi)^{d-1}} \frac{K(q,k)}{k^2} \sim \frac{h^2}{D \cdot A} L^{3-d} \quad (d \leq 3) \quad (11)$$

für thermische Unordnung. Hierbei bezeichnen  $K(q, k)$  die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion (8),  $\Delta$  die Korrelationslänge,  $h$  die Stärke des stochastischen Feldes und  $L$  die Systemausdehnung in  $x$ -Richtung.

### 2. Geschwindigkeitskorrektur

Für thermische Unordnung gilt stets  $\bar{f}(x, t) = vt$ , so daß nur Schwankungen um die deterministische Frontbewegung auftreten. Statische Unordnung hingegen bremst die Front, was man auch intuitiv erwartet. In zweiter Ordnung der Störungstheorie erhält man für die Geschwindigkeitskorrektur /10,11/

$$\Delta v = \sqrt{\int \frac{dq}{2\pi} \frac{d^{\frac{d-1}{2}} k}{(2\pi)^{d-1}} \frac{q^2 K(q)}{D^2 k^4 + v^2 q^2} \sim h^2 D^{\frac{1-d}{2}} \sqrt{\frac{d-3}{2}} \Delta^{-\left(\frac{d+1}{2}\right)}} \quad (12)$$

### 3. Pinning

Aus Konsistenzgründen muß in (12)  $\Delta v \ll v$ , bzw.

$$v \geq v_{pin} \sim h^{\frac{4}{3-d}} D^{\frac{1-d}{3-d}} \Delta^{\frac{d+1}{d-3}} \quad (13)$$

gelten. Für  $v \lesssim v_{pin}$  unterbindet die Unordnung jegliche Frontausbreitung (vgl. Abb. 2)

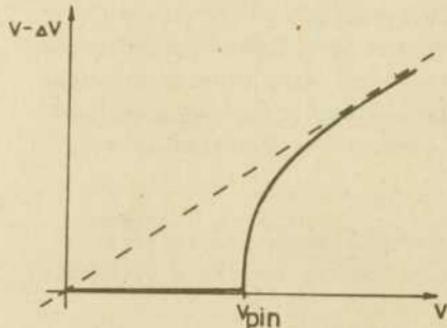


Abb. 2 Tatsächliche Frontgeschwindigkeit ( $v - \Delta v$ ) in einem stochastischen Feld als Funktion der freien Frontgeschwindigkeit  $v$

### 4. Unordnungsinduzierte Frontbewegung

Ist die Stärke der Unordnung vom Systemzustand abhängig (multiplikatives Rauschen), so sind die Amplituden des stochastischen Feldes vor und hinter der Front unterschiedlich. Das führt zu einem zusätzlichen Beitrag zu  $\Delta v$ , der für  $v \rightarrow 0$  nicht verschwindet. Eine deterministisch ruhende Front führt somit unter

dem Einfluß zustandsabhängiger Unordnung eine gerichtete Bewegung aus /12/. Dieser Effekt kompliert die Theorie rauschinduzierter Phasenübergänge, indem er eine Möglichkeit angibt, wie die in dieser Theorie studierten stationären Verteilungsfunktionen von einer beliebigen Anfangsbedingung aus erreicht werden können.

Die statistische Breite (10) und (11) ist für einfache Zweiphasensysteme (binäre Legierung) über Streumessungen experimentell zugänglich /2/. Ferner beeinflußt die Aufrauhung der Domänenwände das kritische Verhalten bei Phasenübergängen kommensurabel-incommensurabel /13/. (12) und (13) sind in Übereinstimmung mit Messungen zum nichtlinearen Ladungsdichtewellentransport in Festkörpern /10/.

#### Literatur

- /1/ "Autowellenprozesse in Systemen mit Diffusion", Grehova (Ed.), Gorki 1981 (in Russian)
- /2/ Gunton, J.D., Droz, M.: "Introduction in the Theory of Metastable and Unstable States", Lecture Notes in Physics 183 (1983) Springer 1983
- /3/ Ebeling, W., Feistel, R.: Physik der Selbstorganisation und Evolution, Akademie-Verlag, Berlin 1982
- /4/ Diehl, H.W., Kroll, D.M., Wagner, H.: Z.Phys. B36 (1980) 329
- /5/ Bausch, R., Dohm, V., Janssen, H.K.; Zia, R.K.P.: Phys. Rev.Lett. 47 (1981) 1837
- /6/ Kawasaki, K., Ohta, T.: Progr.Theor.Phys. 67 (1982) 147, 68 (1982) 129
- /7/ Mikhailov, A.S., Schimansky-Geier, L., Ebeling, W.: Phys. Lett. 96A (1983) 453
- /8/ Efetov, K.B., Larkin, A.J.: ZhEFT 72 (1977) 2350
- /9/ Engel, A.: J.Physique-Lettres 46 (1985) L-409
- /10/ Sneddon, L., Cross, M.C., Fisher, D.S.: Phys.Rev.Lett. 49 (1982) 292
- /11/ Feigelman, M.V.: ZhEFT 85 (1983) 1851
- /12/ Engel, A.: Phys.Lett. A (1985), im Druck
- /13/ Nattermann, T.: J.Physique 43 (1982) 631

#### Verfasser

Dr. Andreas Engel  
Humboldt-Universität zu Berlin  
Sektion Physik

DDR - 1040 Berlin  
Invalidenstraße 42

On the Droplet Formation in Dependence on Thermodynamic Constraints

F. SCHWEITZER

1. Introduction

We consider a closed and finite system with  $N$  free particles being an ideal gas mixture. We fix the thermodynamic constraints

$$N = \text{const}, V = \text{const}, T = \text{const} \quad (1)$$

in such a way that the pressure of the supposed ideal vapor

$$p = \frac{N}{V} k_B T \quad (2)$$

is larger than the equilibrium pressure  $p_\infty(T)$  of the saturated vapor, that means the system is in a supersaturated state. We define the initial supersaturation  $y$  as follows:

$$y = \frac{p}{p_\infty} = \frac{Nk_B T}{p_\infty V} \quad (3)$$

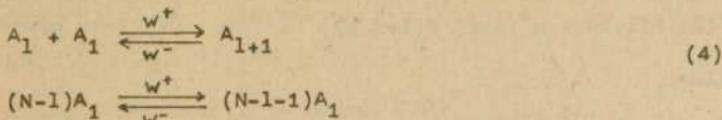
To reach the equilibrium state the system shall be able on principle to undergo a phase transition. If the initial state is a metastable one, that means there exists an energy barrier for the phase transition, the phase separation takes place by a nucleation process, where an overcritical droplet is formed. Undercritical droplets diminish again.

This paper deals with the problem how to choose the thermodynamic parameters respectively the initial supersaturation

- (i) to find an overcritical droplet at all
- (ii) to obtain a droplet being more stable than the initial vapor phase
- (iii) to change the nucleation process into a spinodal decomposition, that means the nucleation barrier is diminishing.

## 2. Kinetic Description of the Droplet Evolution

We suppose that a single droplet has formed in the system and evolves due to the following kinetic mechanism:



$l$  is the number of particles bound in the droplet ( $l \leq N$ ). Both reactions (4) are coupled by the limitation of the overall particle number.

The droplet evolution is assumed to be a Markovian birth and death process. If we define  $P(l,t)$  to be the probability to find the droplet with  $l$  particles at the time  $t$ , then the following master equation describes the time evolution of  $P(l,t)$ :

$$P(l,t) = w^+(l-1) P(l-1,t) + w^-(l+1) P(l+1,t) - \\ - P(l,t) [w^+(l) + w^-(l)] \quad (5)$$

$w^+$  and  $w^-$  are the transition probabilities per unit time as also introduced in (4). We define them as follows:

$$\begin{aligned} w^+(l) &= \alpha l^{2/3} \frac{N-l}{V} \\ w^-(l) &= \alpha l^{2/3} \lambda_1^{-3} \exp\left[\frac{f_l - f_{l-1}}{k_B T}\right] \end{aligned} \quad (6)$$

$\lambda_1$  is the de Broglie wave length of the free particle and  $f_l$  is a potential function:  $f_l = -Al + Bl^{2/3}$  with  $f_1 = 0$  and

$$A = -k_B T \ln \frac{p_\infty}{k_B T} \lambda_1^3 ; B = 4\pi (4\pi c_\alpha/3)^{-2/3} \theta \quad (7)$$

$\alpha$  is a constant with respect to the special properties of the droplet like the liquid density  $c_\alpha$  [particles/m<sup>3</sup>], the surface tension  $\sigma$  and the temperature  $T$ .

Computer simulations with the given transition probabilities demonstrate the several stages of the stochastic evolution of the droplet during the phase transition. But in this paper we are only interested in the equilibrium probability distribution.

### 3. Equilibrium Distribution and Extremum Condition

The equilibrium distribution  $P^0(l)$  we obtain from eq. (5) with the condition of detailed balance:

$$w^+(l) P(l,t) = w^-(l+1) P(l+1,t) \quad (8)$$

It yields:

$$P^0(l) = P_N^0 \prod_{j=2}^l \frac{w^+(j-1)}{w^-(j)} \quad (9)$$

with the normalization

$$P_N^0 = \left[ 1 + \sum_{n=2}^N \prod_{j=2}^N \frac{w^+(j-1)}{w^-(j)} \right]^{-1}$$

If we introduce a stationary potential

$$\phi_s(l) = -k_B T \ln \sum_{j=2}^l \frac{w^+(j-1)}{w^-(j)} \quad (10)$$

eq. (9) results in:

$$P^0(l) = P_N^0 \exp \left[ -\frac{\phi_s(l)}{k_B T} \right] \quad (11)$$

Note, that in the considered case  $\phi_s(l)$  corresponds to the change of the free energy by the formation of the droplet with size  $l$  in the system.

Due to the thermodynamic parameters  $P^0(l)$  can be a bimodal or an unimodal distribution. The existence of two maxima represents the coexistence of the vapor phase ( $l=1$ ) and the droplet phase ( $l=l_{st}$ ) where the stable droplet size is defined by the right maximum of  $P^0(l)$  (see fig. 1). The minimum of  $P^0(l)$  is relative to the critical droplet size  $l_{cr}$  caused by the nucleation barrier, where  $\phi_s(l)$  has got its maximum.

To obtain an equation which gives a relation between the extremum droplet states and the thermodynamic parameters respectively the supersaturation we use the extremum condition of  $P^0(l)$  in the form

$$P^0(l^E) = P^0(l^{E+1})$$

and get with the condition of detailed balance (8) the extremum condition:

$$\ln\left(\frac{1^E}{1^E+1}\right)^{2/3} + \ln \frac{N-1^E}{V} \lambda_1^3 = \frac{1}{k_B T} (f_{1^E+1} - f_{1^E}) \quad (12)$$

By introduction of the droplet radius  $r$  instead of the bound particle number 1

$$r^3 = (4\pi c_\alpha/3)^{-1} 1$$

it yields approximately from eq. (12)

$$\ln \frac{(N-4\pi c_\alpha/3 r_E^3) k_B T}{p_\infty V} = d_o \frac{1}{r_E} \quad (13)$$

where  $d_o = 2G(c_\alpha k_B T)^{-1}$  is the capillary length (for liquids normally about 10 Å).

Eq. (13) possesses two or one or no solution for  $r_E$  in dependence on the thermodynamic parameters. It shall be discussed now to determine the conditions for the existence of a droplet in the system.

#### 4. Discussion

(i) First we investigate the conditions where an overcritical droplet has to be expected on principle in the system. That is the case when the bimodality of  $P^0(l)$  is observed. This bimodality is just diminishing if  $l_{cr} = l_{st}$ , that means eq. (13) has only one solution. Thus we find the critical supersaturation  $y_{cp}$  for the initial system

$$y_{cp} = \exp \left[ \left( \frac{4\pi c_\alpha/3}{N/4} \right)^{1/4} \left( \frac{4}{3} d_o \right)^{3/4} \right] \quad (14)$$

For  $y < y_{cp}$  the system possesses only one (meta)stable state due to the vapor phase, where no overcritical droplet is able to be formed, while for  $y > y_{cp}$  a stable droplet is possible to exist. That means  $y_{cp}$  has to be reached at least initially to insert the nucleation process. That's why  $y_{cp}$  gives the so called cloud point for the phase transition by condensation in the finite system.

(ii) The existence of an overcritical droplet does not imply sufficiently that the droplet is more stable than the initial vapor phase. This means in terms of the equilibrium probability

that in dependence on the initial supersaturation the vapor becomes more probable than the droplet or vice versa. Only for a certain supersaturation  $y_{coex}$  the vapor and the droplet have the same probability. For this case the stable droplet radius has to validate eq. (13) and the additional condition:  $P^0(1) = P^0(1)$ . It leads to the condition for the stationary potential

$$\phi_s(1) = 0 \quad (15)$$

because  $\phi_s(1)$  is also equal to zero.

Thus we can calculate  $y_{coex}$  from the system of equations (13), (15). For  $y > y_{coex}$  the droplet becomes more stable and thus more probable than the initial vapor phase, for  $y < y_{coex}$  the vapor possesses the larger equilibrium probability.

(iii) The nucleation barrier becomes smaller and smaller with an increasing supersaturation and the critical droplet size  $l_{cr}$  changes to smaller values too. At a certain value of the supersaturation  $l_{cr}$  comes into the molecular region (only 1 or 2 particles). In this case the nucleation barrier ceases to exist and the nucleation process is converting into a spinodal decomposition. That means the initial stable state becomes unstable instead of metastable and the equilibrium probability of the vapor phase tends to zero.

We can estimate this critical supersaturation by means of eq. (13) if we assume, that in this case the relation  $N-l_{cr} \approx N$  is held. The supersaturation for the conversion into spinodal decomposition then is given by

$$y_{sd} = \exp(d_0/r_0) \quad (16)$$

where  $r_0$  is the radius of the molecular size (a few Å).

### 5. Conclusions

First we give a schematic review of the discussed results by plotting the shapes of  $P^0(l)$  for various values of the initial supersaturation (see fig. 2). It shows clearly the close relation between the thermodynamic parameters and the existence of a stable droplet. In fig. 3 the bistable behaviour of the considered system is demonstrated.  $y$  gives a measure for the distance from the equilibrium state. In analogy to nonequili-

brium chemical systems a new stable state is obtained far from equilibrium. The transition takes place by a nucleation process for  $\gamma < \gamma_{sd}$ .

#### References

- H. Ulbricht, F. Schweitzer, R. Mahnke: Nucleation Theory and Dynamics of First-Order Phase Transitions in Finite Systems, in: Selforganization by Nonlinear Irreversible Processes, p. 27-42, Springer, Berlin 1986
- F. Schweitzer, L. Schimansky-Geier: Critical Parameters for Nucleation in Finite Systems, J. Colloid Interface Sci., submitted for publication

#### Author

Dipl.-Phys. F. Schweitzer  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik

DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

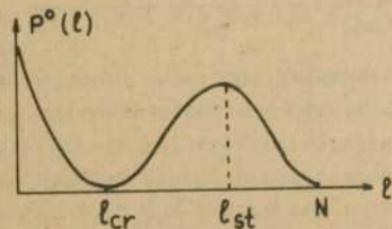


Fig. 1 Equilibrium probability distribution versus cluster size.  $l_{st}$  is the stable droplet size,  $l_{cr}$  the critical droplet size

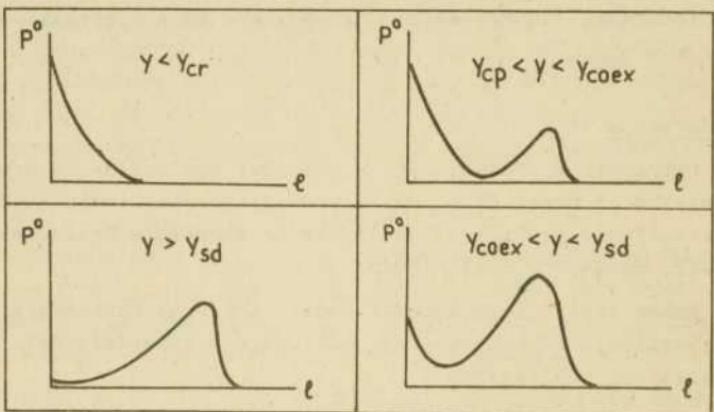


Fig. 2 Schematic plot of the equilibrium distribution in dependence on the initial supersaturation

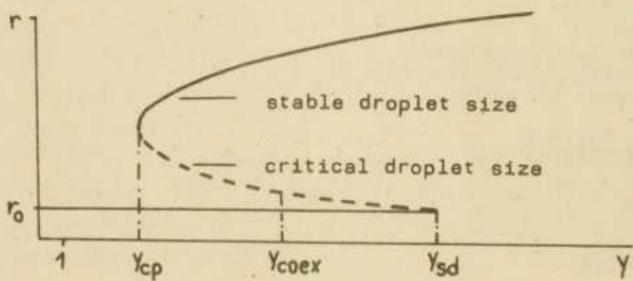


Fig. 3 Stable and critical droplet size as a function of the distance from equilibrium (supersaturation)

Nichtgleichgewichts-Greensche Funktionen und kinetische  
Gleichungen

K. HENNEBERGER

Anliegen der vorliegenden Arbeit ist die Bereitstellung eines Formalismus zur Nichtgleichgewichts-Beschreibung von Vielteilchensystemen, der die Ableitung von kinetischen Gleichungen auf dem Niveau von Näherungen gestattet, wie sie aus der Behandlung dieser Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht bzw. bei  $T = 0$  gut bekannt sind. Das Vorgehen wird am Modell des Elektronengases demonstriert, ist aber für beliebige Systeme durchführbar. Der Hamiltonoperator lautet

$$H = H_0 + H_{\text{int}} + H_{\text{ext}}(t), \quad (1)$$

$$H_0 = \int d^3 k' \Psi^*(k') \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\right) \Psi(k'), \quad (2)$$

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int d^3 k' d^3 k'' \Psi^*(k') \Psi^*(k'') v(k-k'') \Psi(k'') \Psi(k'), \quad (3)$$

$$H_{\text{ext}}(t) = \int d^3 k' g_{\text{ext}}(k', t) \int d^3 k'' v(k-k'') e \Psi^*(k') \Psi(k'') \quad (4)$$

$\Psi, \Psi^*$  sind Feldoperatoren der Elektronen, von deren Spinabhängigkeit wir hier zur Vereinfachung absehen. Desgleichen soll der spezielle Charakter der Coulomb-Wechselwirkung, also  $v(k) = e^2/|k-k'|$ , und damit das Problem der Abschirmung nicht betrachtet werden.

Nichtgleichgewicht wird durch extern kontrollierte Ladungen gemäß (4)- und nicht durch Anfangsbedingungen - produziert, und wir interessieren uns für die zeitliche Entwicklung des Systems unter dem Einfluß dieser mechanischen Störung. Da in diesem Sinne der Einfluß von bestimmten Anfangsbedingungen, speziell von -korrelationen, ebenfalls nicht interessiert, wird der Anfangszeitpunkt bei  $t_0 \rightarrow -\infty$  gewählt und der statistische Operator  $g(-\infty) = g_0$  als unkorreliert angesetzt.  
Wie üblich könnte man jetzt kausale Greensche Funktionen (GF) über die Feldoperatoren im Heisenbergbild definieren und nach

Obergang in die Wechselwirkungsdarstellung die Störungstheorie bzw. Diagrammtechnik aufbauen. Dabei ergeben sich aber prinzipielle Schwierigkeiten: Erstens kann wegen der expliziten Zeitabhängigkeit von  $H$  die Zeitentwicklung  $s(\infty, -\infty)$  nicht als Phasenfaktor  $\langle s(-\infty, \infty) \rangle$  in den Nenner gebracht werden (siehe z.B. /1/) und zweitens reicht die Bestimmung der kausalen GF allein nicht aus, die antikausale GF muß davon unabhängig mitbestimmt werden - im Unterschied zum Gleichgewicht, wo sich z.B.  $G^>$  und  $G^<$  (s.u.) auf eine einzige Funktion, die Spektralfunktion, zurückführen lassen /2/.

Einen formal sehr eleganten Ausweg bietet die Einführung einer doppelten Zeitkontur  $\mathcal{L}$  von  $-\infty$  nach  $+\infty$  (oberer Zweig) und zurück (unterer Zweig) sowie der Zeitordnung  $T_{\zeta}$  auf derselben. Führt man auch noch den Zeitentwicklungsoperator auf der Doppelkontur durch  $s_{\zeta} = s(-\infty, \infty) \cdot s(\infty, -\infty)$  formal ein, so kann man eine "kausale" GF auf  $\mathcal{L}$  im Wechselwirkungsbild gemäß

$$G(\underline{1}, \underline{1}') = \langle T_{\zeta} [ s_{\zeta} \Psi(\underline{1}) \Psi^*(\underline{1}') ] \rangle \frac{1}{i\hbar} \quad (5)$$

definieren.  $\underline{1}$  steht für  $(\underline{\omega}_1, \underline{t}_1)$ , wobei das unterstrichene Argument den doppelten Wertevorrat der Zeit auf  $\mathcal{L}$  anzeigt. Für  $G(\underline{1}, \underline{1}')$  kann man Störungstheorie bzw. Diagrammtechnik wie im Gleichgewichtsfall bzw.  $T = 0$  aufbauen /3-6/, wenn man beachtet, daß erstens die Funktionen  $G_o(\underline{1}, \underline{1}')$  bzw.  $\underline{t}_1$  und  $\underline{t}_1'$  ebenfalls über  $\mathcal{L}$  definiert sind, also die inneren Punkten eines Diagramms entsprechenden Zeitintegrationen auch über  $\mathcal{L}$  zu erstrecken sind und zweitens aufgrund der Definition von  $s_{\zeta}$  die Wechselwirkung auf dem unteren Zweig von  $\mathcal{L}$  mit umgekehrtem Vorzeichen zu nehmen ist. Die Diagramm-Regeln sollen daher hier nicht wiederholt werden. Nicht ganz offensichtlich gilt auch jetzt folgendes: (1) Unverbundene Diagramme treten nicht auf, da sich die Störungsreihe von  $\langle s_{\zeta} \rangle = 1$  gerade als 1 plus Summe über alle unverbundenen Diagramme ergibt. (2) Wie früher läßt sich eine Selbstenergie  $\sum(\underline{1}, \underline{1}')$  als Summe der irreduziblen Selbstenergie-Diagramme definieren, welche mit  $G(\underline{1}, \underline{1}')$  durch eine Dysongleichung

$$G(\underline{1}, \underline{1}') = G_o(\underline{1}, \underline{1}') + \int d2d3 G_o(\underline{1}, \underline{2}) \sum(\underline{2}, \underline{3}) G(\underline{3}, \underline{1}') \quad (6)$$

verknüpft ist. In (6) sind natürlich auch die Zeitargumente  $t_2$ ,  $t_3$  von  $\Sigma$  und dementsprechend die Zeitintegrierten über  $\mathcal{L}$  laufend.

Ohne darauf im einzelnen einzugehen, sei vermerkt, daß man die Untersuchung von  $G$  nach (5) auch ohne Benutzung der Diagrammtechnik durch Variationstechnik aufbauen kann /8/. Dieser Zugang ist insofern von Bedeutung, als er auch auf Systeme anwendbar ist (anomale Propagatoren, Makrobesetzung oder kohärente Feldamplituden), für die das Wicksche Theorem nicht gültig ist und folglich die Diagramm-Technik versagt. Im vorliegenden einfachen Modellfall liefern beide Zugänge dasselbe.

Gleichung (6) enthält naturgemäß viel mehr Informationen als die Dyson-Gleichung im Gleichgewichtsfall. Anschaulich ausgedrückt muß sie neben den spektralen Eigenschaften (Spektralfunktion!) des Systems auch die kinetischen (Verteilungsfunktion!) festlegen. Das wird explizit sichtbar, wenn man die Zeitargumente  $t$  auf  $\mathcal{L}$  durch  $t_\alpha$  auf der einfachen Zeitachse ersetzt, wobei  $\alpha = +(-)$  den oberen (unteren) Zweig der Kontur indiziert. Aus der GF (5) entsteht dadurch ein Matrix-Objekt ( $1 \rightarrow 1_\alpha = (\epsilon_\alpha, t_{\alpha})$ )

$$G_{\alpha\beta}(1,1') = \langle T_{\mathcal{L}} [S_{\mathcal{L}} \Psi(1_\alpha) \Psi^+(1'_\beta)] \rangle \frac{\beta}{i\hbar} \quad (7)$$

und entsprechend auch aus  $G_0$  und  $\Sigma$ . Man verifiziert leicht, daß  $G_{++}(G_{--})$  der "gewöhnlichen" kausalen (antikausalen) GF entspricht, während  $G_{+-}$  und  $G_{-+}$  die Propagatoren  $G^> = \frac{1}{\hbar} \langle \Psi(1) \Psi^+(1') \rangle$  und  $G^< = (-i/\hbar) \langle \Psi^+(1') \Psi(1) \rangle$  sind. Gleichung (6) erhält damit die Struktur einer Matrizengleichung

$$G_{\alpha\beta}(1,1') = G_{\alpha\beta}^{(0)}(1,1') + \sum_{\gamma,\delta} \int d2d3 G_{\alpha\gamma}^{(0)}(1,2) \sum_{\gamma\delta} (2,3) G_{\delta\beta}(3,1') \quad (8)$$

oder, nach Definition der Inversen gemäß

$$\int d2 \sum_{\gamma} F_{\alpha\gamma}(1,2) F_{\gamma\beta}^{-1}(2,1') = \delta_{\alpha\beta} \delta(1-1') \quad (9)$$

die "differentielle" Form

$$\sum_{\gamma} \int d2 [G_{\alpha\gamma}^{(0)-1}(1,2) - \sum_{\gamma\delta} (1,2)] G_{\gamma\beta}(2,1') = \delta_{\alpha\beta} \delta(1-1'). \quad (10)$$

In (7) - (10) sind entsprechend  $\int_{\mathcal{L}} dt = \int_{\infty}^{\infty} dt_\alpha$  nur noch gewöhnliche Zeitintegrierten enthalten, die Vorzeichen werden durch den Faktor  $\beta$  in Def. (7) richtig geregelt. Schreibt man nun (10) komponentenweise auf, wobei noch  $G_{++} = G^z + G^<$  und

$G_{\perp\perp} = G^{\frac{1}{2}} - G^{\frac{1}{2}}$  durch retardierte ( $G^+$ ) und avancierte ( $G^-$ ) GF's ersetzt werden (entsprechend für  $G_0$  und  $\Sigma$ ), so ergibt sich schließlich

$$\int d2 \left[ G_0^{-1}(1,2) - \sum^z(1,2) \right] G^+(2,1') = \delta(1-1') \quad (11)$$

$$\int d2 \left\{ \left[ G_0^{-1}(1,2) - \sum^z(1,2) \right] G^z(2,1') - \sum^z(1,2) G^-(2,1') \right\} = 0 \quad (12)$$

Betrachtet man die Selbstenergie im Sinne einer selbstkonsistenten Argumentation als gegeben - tatsächlich ist sie ein beliebig kompliziertes Funktional von  $G$ , so entkoppeln (11) und (12) formal. (11) beschreibt die spektralen Eigenschaften (Spektralfunktion  $A = G^+ - G^-$ ) des Systems, während (12) z.B. über  $G^<(1,1')$  für  $t_1=t_1'$  die Einteilchen-Dichtematrix bzw. die Wignerverteilung festlegt und folglich als quantenkinetische Gleichung zu interpretieren ist.

Im folgenden soll der Fall betrachtet werden, wenn die raumzeitlichen Änderungen im System klein sind auf einer durch mikroskopische Parameter definierten Skala. Dazu wird ein neuer Variablensatz  $\xi = (\vec{k}, \omega; w, t)$  anstelle der Variablen  $(1,1')$  in  $G, G_0, \Sigma$  usw. eingeführt. Die "spektralen" Variablen  $\vec{k}, \omega$  entsprechen nach Fouriertransformation den Differenzen  $\vec{w}_1 - \vec{w}_1'$ ,  $t_1 - t_1'$ , während die Abhängigkeit von den "lokalen" Variablen  $w = (w_1 + w_1')/2$ ,  $t = (t_1 + t_1')/2$  die Inhomogenität bzw. Nichtstationarität des Systems ausdrückt. Wir nehmen also jetzt an, daß die  $(w, t)$ -Abhängigkeit aller Funktionen schwach ist und vernachlässigen höhere als 1. Ableitungen nach den lokalen Variablen. Ein systematisches Vorgehen dazu besteht z.B. darin, jede in (11), (12) auftretende integrale Verknüpfung vom Typ

$$h(1,1') = \int g(1,2)f(2,1')d2 \quad (13)$$

in den  $\xi$ -Variablen darzustellen durch /7/

$$h(\xi) = \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \hat{D}(\xi, \xi')} g(\xi) f(\xi') \right\}_{\xi=\xi'} \quad (14)$$

$$\hat{D}(\xi, \xi') = \frac{\partial}{\partial k} \frac{\partial}{\partial w'} - \frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial}{\partial k'} - \frac{\partial}{\partial \omega} \frac{\partial}{\partial t'} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \omega'} \quad (15)$$

und die Exponentielle Reihe in (14) nach der 1. Ordnung des "Drift-Operators"  $\hat{D}$  abzubrechen.

Das Verfahren liefert für  $G^{\frac{1}{2}}$  aus (11) den rein lokalen Zusammenhang

$$G^{\pm}(\xi) = \frac{1}{G_0^{-1}(\xi) - \Sigma^{\pm}(\xi)}, \quad (16)$$

der, obwohl von  $\hat{D}$  unabhängig (!) bis einschließlich der 1. Ordnung in  $D$  exakt ist /5,6/.

Aus (12) erhält man entsprechend

$$\begin{aligned} \left\{ \hat{D}(f, f') \right\} & \left[ \left\{ G_0^{-1}(\xi) - \text{Re} \Sigma'(\xi) \right\} G^<(\xi') - \Sigma'(\xi) \text{Re} G^>(\xi') \right] = \\ & 1 \left[ \Sigma'(\xi) G^<(\xi) - G^>(\xi) \Sigma'(\xi) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

(16) stellt eine lokal homogene Spektralfunktion  $A(\xi) = G^>(\xi) - G^<(\xi)$  bereit, während (17) als kinetische Gleichung für die verallgemeinerte (wegen der zusätzlichen Frequenzabhängigkeit) Wignerverteilung  $G^<(\xi)$  fungiert (beachte:  $G^> = G^< + G^+ - G^-$ ).

In einigen Fällen besitzt die Spektralfunktion Pole bzw. (16) ist in der Umgebung von  $G_0^{-1}(\xi) - \text{Re} \Sigma^{\pm}(\xi) = 0$  (Quasiteilchenenergie!) gut lokalisiert. Dann kann (17) noch über  $\omega$  integriert werden und liefert eine Boltzmanngleichung für die Wignerverteilung

$$f(k, \omega, t) = \frac{1}{2\pi i} \int G^<(\xi) d\omega \quad (18)$$

in Quasiteilchen-Näherung. Entwickelt man dann noch nach der Wechselwirkung, und zwar die linke Seite von (17) – da sie bereits linear in  $D$  ist – in nullter und die rechte Seite in erster Ordnung, so ergibt sich die gewöhnliche Boltzmanngleichung mit störungstheoretischen Übergangsralten.

#### Literatur

- /1/ Landau, L.D., Lifschitz, E.M.: Lehrbuch der Theoretischen Physik, Bd. IX, S. 47 und Bd. X, S. 419 ff.
- /2/ Stoltz, H.: Vielelektronentheorie der Kristalle, Akademie-Verlag, Berlin 1974
- /3/ Keldysh, L.V.: IETF 4 (10) (1964) 1415
- /4/ Daniellewicz, P.: Ann.Phys. 152 (2) (1984) 239
- /5/ Henneberger, K.: wird veröffentlicht in ZIE-Preprint 1986
- /6/ Henneberger, K.; May, V.: wird veröffentlicht in Physica
- /7/ de Groot, S.R., Suttorp, L.G.: Foundations of Electrodynamics, North-Holland Publ.Comp., Amsterdam 1972

/8/ Du Bois, D.F.: in: "Lectures in Theoretical Physics",  
vol IXC, p. 469, New York 1967

Verfasser

Prof.Dr.sc. K. Henneberger  
Pädagogische Hochschule "L. Herrmann"  
Güstrow  
Sektion Mathematik/Physik

DDR - 2600 Güstrow  
Goldberger Straße

Nichtgleichgewichts-Greenfunktionstechnik

Teilweise Kohärenz von Exzitonen

V. MAY

Die vor über 20 Jahren in /1,2,3/ entwickelte Methode der Nichtgleichgewichts-Greenfunktionen (NGF) hat in der letzten Zeit breite Anwendung gefunden /4-9/, wobei ein Schwerpunkt auf Fragestellungen der Physik hochangeregter Halbleiter lag. Im Falle direkter Halbleiter spielt dabei die Ankopplung an das Strahlungsfeld eine wichtige Rolle. Für eine monochromatische, kohärente optische Anregung lautet der zugehörige Wechselwirkungsausdruck im Hamiltonian  $b^+ \hat{E} e^{-i\omega t}$ , wobei  $b$  der Übergangsoperator für den Interbandübergang ist und  $\hat{E}$  die Amplitude der elektrischen Feldstärke. Erfolgt die Wechselwirkung im exzitonischen Spektralbereich, so beschreibt  $b^+$  die Bildung eines Exzitons.

Exzitonen als ausgedehnte Anregungen des Halbleiters können bei nicht zu hohen Dichten von angeregten Elektronen (oder Excitonen) als Bose-Teilchen betrachtet werden. Insbesondere hat dann der Besetzungszahloperator die Form  $b^+ b$  (im Gegensatz etwa zu einem atomaren 2-Niveausystem). Für die Beschreibung der Reaktion des exzitonischen Systems auf ein kohärentes Strahlungsfeld ist somit die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes von  $b^+ b$  als auch von  $b$  selbst zu untersuchen. (Die kohärente Anregung des Systems findet gerade ihren Ausdruck im Nichtverschwinden des anomalen Erwartungswertes  $\langle b \rangle$ .)

Durch Ankopplung der Teilchen an ein Bad kann die ursprüngliche Kohärenz beseitigt werden, ohne dass sich die Teilchenzahl  $\langle b^+ b \rangle$  selbst ändert. Zur Erfassung dieses Sachverhaltes ist es sinnvoll,  $\langle b^+ b \rangle$  in einen zusammenhängenden (inkohärenten-Index 1) Anteil und einen faktorisierten zu zerlegen

$$\langle b^+ b \rangle = \langle b^+ b \rangle_1 + \langle b^+ \rangle \langle b \rangle \quad (1)$$

$\langle b^+ b \rangle_1$  gibt dann die Zahl der inkohärenten, durch Relaxation

der kohärenten Amplitude  $\langle b \rangle$  gebildeten Teilchen an. /10/ folgend, bezeichnen wir die gleichzeitige Existenz von  $\langle b^+ b \rangle$ , und  $\langle b \rangle$  als teilweise Kohärenz.

Im weiteren wird für ein System von Bose-Teilchen angekoppelt an ein Bad und unter Wirkung einer äußeren Störung der oben angegebenen Form gezeigt, wie man mit Hilfe der NGF-Methode eine Bilanzgleichung für die Dichte inkohärenter Teilchen und eine "Schrödinger"-artige Gleichung für die kohärente Amplitude erhält. (Der Konkretheit halber denken wir dabei immer an ein System von Exzitonen in Wechselwirkung mit Phononen und angekoppelt an das Strahlungsfeld.) Wir gehen aus von folgendem Hamiltonian (in  $\vec{k}$ -Darstellung) für unsere Bose-Teilchen  $b$  angekoppelt an die Bad-Variablen  $c$

$$H = \sum_{\vec{k}} (E(\vec{k}) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + \hbar \omega(\vec{k}) C_{\vec{k}}^+ C_{\vec{k}} + m(\vec{k}) (C_{\vec{k}} + C_{-\vec{k}}^+) \sum_q b_{\vec{k}+q}^+ b_{\vec{q}})$$
(2)

und leiten Bewegungsgleichungen für die NGF  $G = \langle b(\vec{k}_1 \tau_1) * b^+(\vec{k}_1, \tau_1) \rangle$  und die Amplitude  $B = \langle b(\vec{k}_1 \tau_1) \rangle_{ab}$ .  $\tau_1$  läuft dabei über die Keldysh-Zeitkontur C /2,5,7,9/ und  $\langle \dots \rangle$  bedeutet  $\text{Sp}(g_0 T_c S_c \dots) / \text{Sp}(g_0 S_c)$  mit dem statistischen Operator  $g_0$  für  $t = -\infty$ , dem Zeitordnungsoperator  $T_c$  und dem S-Operator  $S_c$  (beide definiert über C).  $S_c$  enthält den (über C abintegrierten) zeitabhängigen externen Hamiltonian, den wir in folgender Form ansetzen

$$H_{\text{ext}}(\tau) = \sum_{\vec{k}} (v(\vec{k}\tau) C(\vec{k}\tau) - \vec{E}(\vec{k}\tau) \vec{p} b(\vec{k}\tau) / Q + h.c. (\vec{k} \rightarrow -\vec{k}))$$
(3)

Der erste Teil wurde für die Verwendung der Funktionalableitungstechnik eingeführt, der zweite enthält das elektrische Feld  $\vec{E}$  und die Polarisation  $\vec{p}$ . (Er wird der Übersichtlichkeit halber zunächst weggelassen.)

Die in den Bewegungsgleichungen für  $G$  und  $B$  auftretenden höheren NGF können durch  $\delta G / \delta v$  bzw.  $\delta B / \delta v$  ersetzt werden. In Analogie zum Vorgehen in /11/ führen wir in der Gleichung für  $G$  die Selbstenergie  $\Sigma$  ein.

Berechnet man die dabei auftretende Größe  $\delta G^{-1} / \delta v$  in niedrigster Ordnung, so folgt  $\Sigma = i \hbar m G D m$  mit  $D$  als NGF für die Bad-

variablen. Ein gleiches Vorgehen ergibt für  $B$  die Gleichung  $G^{-1}B = i\hbar G^{-1}B/\delta \mathcal{D}$ , von der wir nur die triviale Lösung  $G^{-1}B = 0$  betrachten wollen.

Ausgehend von der Dyson-Gleichung für die NGF  $G$  erhält man eine Gleichung für die zweizeitige Dichtematrix  $\langle b^*(\vec{k}_1, t_1) b(\vec{k}_1, t_1) \rangle = i\hbar G^<$  und die retardierte NGF  $G^{(ret)}$  (die die spektralen Eigenschaften des Systems beschreibt).  $t_{1/1}$  läuft jetzt über die physikalische Zeitkontur von  $-\infty$  bis  $+\infty$ . Für  $B$  verbleibt nur eine Gleichung. Das gesamte System lautet  $G^{(ret)-1}G^< - \Sigma G^{(ret)*} = 0$ ,  $G^{(ret)-1}G^{(ret)} = \delta$  und  $G^{(ret)-1}B = 0$ , wobei  $G^{(ret)-1} = (i\hbar \partial/\partial t_1 - E(\vec{k}_1))\delta - \Sigma^{(ret)}$ . Mit einer zu (1) analogen Zerlegung  $G^< = G_i^< + BB^*$  und bei Benutzung von  $G^{(ret)-1}B = 0$  geht die Gleichung für  $G^<$  in  $G^{(ret)-1}G_i^< - \Sigma G^{(ret)*} = 0$  über, und die Selbstenergie zerfällt in den Teil I, welcher  $G_i^<$  (bzw.  $G_i^>$ ) enthält, und den Teil II, der  $BB^*$  beinhaltet.

Das weitere Vorgehen zur Ableitung einer Bilanzgleichung für die inkohärente Teilchendichte  $n_i$  entspricht dem Standard der NGF-Technik (z.B. /9/). Wir geben hier nur das Ergebnis (unter Einschluß der Ankopplung an das Strahlungsfeld) an. Details findet man in /12, 13/.

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{\tau} - D \Delta_{\vec{r}} \right) n_i(\vec{r}, t) = \frac{I}{\hbar} |\hat{B}(\vec{r}, t)|^2 \quad (4)$$

Dabei wurde für die inkohärenten Teilchen lokales Gleichgewicht vorausgesetzt, die Diffusionsnäherung benutzt ( $D$  - Diffusionskoeffizient) und eine Lebensdauer  $\tau$  eingeführt.  $I$  ist die aus dem Selbstenergieteil I entstehende Dämpfung. Die bzgl.  $\vec{k}$  Fourier-transformierte kohärente Amplitude wurde als  $\hat{B}(\vec{r}) \propto \exp i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \omega_0 t)$  mit schwach variablen  $\hat{B}$  angesetzt, was bei monochromatischer Anregung gerechtfertigt ist.

(4) beinhaltet das Strahlungsfeld als Teilchenpumpe nicht. Vielmehr stellt die durch das Bad vermittelte Relaxation der kohärenten Amplitude die Teilchenpumpe dar. Das Strahlungsfeld tritt nur in der Gleichung für  $B$  explizit in Erscheinung

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E(-i\nabla_{\vec{r}}) - \Sigma_i^{(ret)} + |m(0) \vec{B}(\vec{r}, t)|^2 2\Omega / \hbar \omega(0) \right\} \vec{B}(\vec{r}, t) = - \vec{p}^* \vec{E}(\vec{r}, t) / \sqrt{D} \quad (5)$$

Hier wurde der Selbstenergieteil II, der auf eine Selbstwechsel-

selwirkung der kohärenten Amplitude führt, ausgeschrieben.  
Gleichung (4) und (5) sind noch durch die Wellengleichung für  
 $\vec{E}$  abzuschließen.

Die Anwendung des hier vorgestellten Konzepts der teilweisen Kohärenz auf ein dichtes Exziton-Gas findet man in /13/. Die Untersuchung von teilweiser Kohärenz im Exziton-Biexziton-System findet sich in /12/.

#### Literatur

- /1/ Kadanoff, L.P., Baym, G.: Quantum Statistical Mechanics, W.A. Benjamin Inc., New York 1962
- /2/ Keldysh, L.V.: JETP 20 (1965) 1018
- /3/ du Bois, D.F.: Lec.Theor.Phys. vol. IXC p. 469, New York 1967
- /4/ Ivanov, A.L., Keldysh, L.V.: JETP 57 (1983) 234
- /5/ Daniellewicz, A.: Ann.Phys. 152 (1984) 239
- /6/ Haug, H.: J.Lum. 30 (1985) 171
- /7/ Henneberger, K., May, V.: to be published in Physica A
- /8/ Henneberger, K., Zimmermann, R., Manzke, G., May, V.: to be published in Physica A
- /9/ Proc.Autumn School on Nonequil.Phenom. 1985, ZIE, AdW der DDR, to be published
- /10/ Korenman, V.: Ann.Phys. 39 (1966) 72
- /11/ Stoltz, H.: Einführung in die Vielelektronentheorie der Kristalle, Akademie-Verlag, Berlin 1974
- /12/ May, V.: to be published in Physica A
- /13/ May, V.: see /9/

#### Verfasser

Dr. V. May  
Pädagogische Hochschule "L. Herrmann"  
Güstrow  
Sektion Mathematik/Physik

DDR - 2600 Güstrow  
Goldberger Straße

## The Method of Green's Functions in Non-Equilibrium Statistical Mechanics

T. BORNATH; M. SCHLANGE

The Green's function approach to many-body problems is a very powerful one. This has proved not only in equilibrium but also in non-equilibrium statistical mechanics. In the latter case a correct formulation is given by the real-time Green's function technique. Basic work in this field was already done in the Sixties /1,2/ but in recent years there is an increasing interest in this approach (see for example /3/). In this paper we are going to give some general relations and then to introduce a new approach to non-equilibrium problems within the real-time Green's function (GF) technique /4/. For detailed considerations we refer to /5/ and /6/.

The properties of a many-particle system can be described by the one-particle GF

$$g_1(11') = \frac{1}{i} \text{Tr} \left\{ \mathcal{G} T(\Psi(1)\Psi^*(1')) \right\} \\ = \Theta(t_1 - t'_1) g_1^>(1,1') + \Theta(t'_1 - t_1) g_1^<(11') \quad (1)$$

with  $g_1^>$  being the correlation functions

$$g_1^>(11') = \frac{1}{i} \langle \Psi(1)\Psi^*(1') \rangle \quad (2a)$$

$$g_1(11') = \pm \frac{1}{i} \langle \Psi^*(1')\Psi(1) \rangle \quad \begin{array}{l} (+ \text{ Bose}) \\ (- \text{ Fermi}) \end{array} \quad (2b)$$

( $\mathcal{G}$  is the unknown non-equilibrium density operator,  $T$  represents the Wick's time ordering operator and "1" is the abbreviation for  $r_1, t_1$ ; for simplicity we do not consider internal degrees of freedom)

A first important feature of non-equilibrium GF is that they depend not only on the time difference  $t_1 - t'_1$  (like in equilibrium) but on both times  $t_1$  and  $t'_1$ . Therefore it is useful to introduce new variables

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} (t_1 + t'_1) & R &= \frac{1}{2} (r_1 + r'_1) \\ t &= t_1 - t'_1 & r &= r_1 - r'_1 \end{aligned} \quad (3)$$

and to define Fourier-transformed quantities with respect to the relative coordinates.

$$g_1^{\pm}(p\omega; RT) = \int_{-\infty}^{+\infty} dr \int dt e^{-ipr+i\omega t} g_1^{\pm}(rt, RT)$$

The function  $g_1^{\pm}(p\omega; RT)$  is connected in a simple manner with the Wigner distribution function

$$f(p; RT) = \int \frac{d\omega}{2\pi} (\pm i) g_1^{\pm}(p\omega; RT)$$

Complete information about the system is given if we know the two correlation functions (compare (1)). Instead of these two functions we may also define two new functions. One is the spectral function a

$$a(p\omega; RT) = i [g_1^>(p\omega; RT) - g_1^<(p\omega; RT)] \quad (4)$$

A second function is defined by

$$\pm i g_1^{\pm}(p\omega; RT) = F(p\omega; RT) a(p\omega; RT) \quad (5a)$$

Then results

$$i g_1^>(p\omega; RT) = [1 \pm F(p\omega; RT)] a(p\omega; RT) \quad (5b)$$

With the introduction of  $a(p\omega; RT)$  and  $F(p\omega; RT)$  we have split up our problem: with  $a(p\omega; RT)$  we have to determine the spectral properties whereas  $F(p\omega; RT)$  contains the statistical information. For comparison, in equilibrium the correlation functions are not independent quantities because of the KMS-condition /7/, and that's why the function F is explicitly known

$$F(p\omega; RT) = f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta(\omega - \mu)} + 1} \quad (6)$$

So in equilibrium only the spectral function has to be determined.

To be complete we want to introduce still two quantities:

$$g_1^{R/A}(11') = \pm \Theta[\pm(t_1 - t'_1)] (g_1^>(11') - g_1^<(11')) \quad (7)$$

The retarded and advanced Green's function a well suited for the description of the one-particle spectral properties. For example holds

$$a(p\omega; RT) = i \left[ g_1^R(p\omega; RT) - g_1^A(p\omega; RT) \right] \quad (8)$$

Now we would like to come to the second point of our paper. In order to determine the GF we start from the Martin-Schwinger hierarchy of equations of motion /8/. The first equations are

$$(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla^2}{2m}) g_1(11') = \delta(1-1') \pm i \int d^2 V(1-2) g_2(121'2^+) \quad (9)$$

$$(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla^2}{2m}) g_2(121'2^+) = \delta(1-1') g_1(22') \pm \delta(1-2') g_1(21') \quad (10)$$

$$\pm i \int d^3 V(1-3) g_3(1231'2'3^+)$$

These equations are very general, i.e. they do not depend on the kind of averaging. Therefore boundary conditions are necessary to obtain solutions for a special kind of averaging (in equilibrium the well-known KMS-condition is such a boundary condition). Up to now there exist two methods in order to determine non-equilibrium GF:

- i) Kadanoff and Baym /7/ have performed an analytic continuation of the imaginary-time GF to their real-time counterparts assuming the system being in equilibrium at an initial stage
- ii) In order to deal directly with real-time GF Keldysh /1/ introduced a diagrammatic perturbation scheme in the interaction picture assuming an uncorrelated initial state.

We have proposed another way /4,5/ which avoids perturbation theory and works with the equations of motion. Looking for an appropriate boundary condition we used the condition of "weakening of initial correlation" which was introduced in non-equilibrium statistical mechanics by Bogoliubov /9/. We assume that the system is dilute enough so that the correlation time is much smaller than the time between two collisions. Then a pair of particles will enter the collision process statistically independent. In terms of Green's functions this condition reads

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} g_2(121'2') \Big|_{\substack{t_1 = t_2 = t \\ t'_1 = t'_2 = t \mp \epsilon}} = g_1^>(11')g_1^<(22') + g_1^>(12')g_1^<(21') \quad (11)$$

here  $|t| \rightarrow \infty$  refers to times greater than characteristic correlation times.

It is evident that this condition is violated in the following cases:

- (i) high densities of the system
- (ii) occurrence of long-living bound states
- (iii) long-range fluctuations.

In such cases the Bogoliubov-condition must be replaced by a condition of partial weakening of initial correlations /10,11/. With the help of the boundary condition it is possible to decouple formally the hierarchy (9) by introduction of a self-energy in the first equation. The Bogoliubov-condition (11) implies

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \frac{\pm i}{2} \int d^2 r_2 V(1-2) g_2(121'2') \Big|_{t'_1 = t^1} = \int d\bar{1} \sum^{HF}(1\bar{1}) g_1(\bar{1}1') \quad (12)$$

An equation fulfilling this condition is given by /5/

$$(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m}) g_1(11') = \delta(1-1') + \int_{-\infty}^{t_1} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} d\bar{1} \left[ \sum(1\bar{1}) g(\bar{1}1') - \sum(1\bar{1}) g^>(\bar{1}1') \right] \quad (13)$$

The corresponding equations for the correlation functions ("Kadanoff-Baym equations") are

$$\begin{aligned} (i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m}) g_1^>(11') &= \int d\bar{1} \sum^{HF}(1\bar{1}) g_1^>(\bar{1}1') + \\ &+ \int_{-\infty}^{t_1} d\bar{1} \left[ \sum^>(1\bar{1}) - \sum^<(1\bar{1}) \right] g_1^>(\bar{1}1') \quad (14) \\ &- \int_{-\infty}^{t_1} d\bar{1} \sum^>(1\bar{1}) \left[ g_1^>(\bar{1}1') - g_1^<(\bar{1}1') \right] \\ &= \int_{-\infty}^{t_1} d\bar{1} \sum^R(1\bar{1}) g_1^>(\bar{1}1') + \int_{-\infty}^{t_1} d\bar{1} \sum^>(1\bar{1}) g_1^A(\bar{1}1') \end{aligned}$$

It should be emphasized that (13) is equivalent to a Dyson-equation on the Keldysh-contour /1/

$$(i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m}) g_1(11') = \delta(1-1') + \int d\bar{1} \sum(1\bar{1}) g(\bar{1}1')$$

Also a matrix notation is possible. So our approach leads to the same results as Keldysh's.

#### References

- /1/ Keldysh, L.V.: Zh.exper.teor.Fiz. 47 (1964) 1515
- /2/ DuBois, D.F.: in: Lectures in Theoretical Physics, Vol. IXC, New York 1967
- /3/ Danielewicz, P.: Ann.Phys. (London) 152 (1984) 239
- /4/ Kremp, D., Schlanges, M., Bornath, T.: J.Stat.Phys. vol 41 (3/4) (1985) 661
- /5/ Kremp, D., Schlanges, M., Bornath, T.: to be published in a ZIE-Preprint, AdW der DDR, 1986
- /6/ Schlanges, M.: Dissertation B, Rostock 1985
- /7/ Kadanoff, L.P., Baym, G.: Quantum Statistical Mechanics, Benjamin, New York 1962
- /8/ Martin, P.C., Schwinger, J.: Phys.Rev. 115 (1959) 1342
- /9/ Bogoljubov, N.N.: Problems of a Dynamical Theory in Statistical Mechanics, Gosstechisid. Moscow 1946
- /10/ Klimontovich, Yu.L., Kremp, D.: Physica 109A (1981) 517
- /11/ Schlanges, M., Bornath, T.: V. Schule für statistische Physik, Proceedings, the following paper

#### Authors

Dipl.-Phys. T. Bornath  
Dr. sc. M. Schlanges  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik  
  
DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

## Approximations of Multi-Particle Green's Functions

M. SCHLANGES; T. BORNATH

With the equations (13-14) of the foregoing paper /1/ very general kinetic equations are given. As the decoupling of the hierarchy by introduction of the self energy is only formal we need in practice always approximative expressions for the self energy or the two-particle Green's function (GF), respectively. To find such approximations for the two-particle GF we start from the Martin-Schwinger hierarchy /1/. One can find the following equation which is still correct (for details we refer to /2/ and /3/)

$$\begin{aligned}
 & \left( i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} \right) \left( i \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\nabla_2^2}{2m} \right) g_2(12,1'2') = \delta(1-1')\delta(2-2') \Big|_{1' \leftrightarrow 2'} \\
 & + i V(1-2)g_2(121'2') + \delta(1-1')(\pm i) \int d3V(2-3)g_2(232'3') \Big|_{1' \leftrightarrow 2'} \\
 & + \delta(2-2')(\pm i) \int d3V(1-3)g_2(131'3') \Big|_{1' \leftrightarrow 2'} \\
 & + (\pm i)^2 \int d3d4 V(1-3)V(2-4)g_4(12341'2'3'4')
 \end{aligned} \tag{1}$$

If the system is dilute enough that a restriction to pure binary collisions is possible we can neglect in eq. (1) all contributions which correspond to higher than two-particle collisions. Such an approximation leads to

$$\begin{aligned}
 & \left( i \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\nabla_1^2}{2m} \right) \left( i \frac{\partial}{\partial t_2} + \frac{\nabla_2^2}{2m} \right) g_2(121'2') = \delta(1-1')\delta(2-2') \Big|_{1' \leftrightarrow 2'} \\
 & + i V(1-2)g_2(121'2')
 \end{aligned} \tag{2}$$

The boundary condition /2-4/ to this differential equation is

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} g_2(121'2') \Big|_{\substack{t_1=t_2=t \\ t'_1=t'_2=t}} = g_1^0(11')g_1^0(22')\pm(g_1^0(12')g_1^0(21')) \tag{3}$$

(the superscript zero denotes here the free one-particle GF)

A solution for the two-particle Green's function in the particle-particle channel (i.e.  $t_1 = t_2$ ,  $t'_1 = t'_2$ ) is given by (for simplicity we suppress all variables except of the time labels)/2/

$$g_{12}(t, t') = g_1^0(t, t')g_2^0(t, t')|_{\text{exch.}} \quad (4)$$

$$+ i \int_{-\infty}^{\infty} dt \left\{ g_1^0(t, \bar{t})g_2^0(t, \bar{t})V_{12}g_{12}(\bar{t}, t') - g_1^0(t, \bar{t})g_2^0(t, \bar{t})V_{12}g_{12}(\bar{t}, t') \right\}$$

For the correlation functions one gets the corresponding equation:

$$\begin{aligned} g_{12}^{\geq}(t, t') &= g_{12}^{\geq}(t, t') + i \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[ g_{12}^{R/A}(t, \bar{t})V_{12}g_{12}^{\geq}(\bar{t}, t') \right. \\ &\quad \left. + i \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{t} g_{12}^{\geq}(t, \bar{t})V_{12}g_{12}^{A/R}(\bar{t}, t') \right] \end{aligned} \quad (5)$$

where we defined  $\frac{g_{12}^{\geq}}{g_{12}^{\leq}}(t, t') = g_1^{\geq}(11')g_2^{\geq}(22')|_{t'_1 = t'_2}$

and  $\frac{g_{12}^{R/A}}{g_{12}^{L/S}} = g_{12}^R - g_{12}^S : g_{12}^R = g_{12}^{\geq} - g_{12}^{\leq}$

The retarded (advanced) two-particle GF is determined by

$$g_{12}^{R/A}(t, t') = g_{12}^{R/A}(t, t') + i \int_{-\infty}^{\infty} dt g_{12}^{R/A}(t, \bar{t})V_{12}g_{12}^{R/A}(\bar{t}, t') \quad (7)$$

It is of advantage to introduce some auxiliary quantities (operator notation)

$$\Omega_{12}^R = 1 + i g_{12}^R V_{12} \Omega_{12}^R = 1 + i g_{12}^R V_{12} \quad (8a)$$

$$\Omega_{12}^A = 1 + i V_{12} g_{12}^A \quad (8b)$$

Then eq. (5) reads

$$g_{12}^{\geq}(t, t') = \int d\bar{t} d\bar{t} \Omega_{12}^R(t, \bar{t}) g_{12}^{\geq}(\bar{t}, \bar{t}) \Omega_{12}^A(\bar{t}, t') \quad (5a)$$

Together with (7) it can be regarded as the solution of the non-equilibrium two-particle problem in binary collision approximation. A generalization can be achieved if we replace the free one-particle GF in (4) and (5) by full GF. This is possible with respect to higher orders. The functions  $\Omega_{12}^{R/A}$  can be interpreted as generalized Moeller-operators /5/. They describe the two-particle scattering in a non-equilibrium medium

and contain medium effects like one-particle self energies and Pauli-blocking /2/.

So far we considered the binary collision approximation. If the system is not dilute enough we must take into account higher collisions. Starting from the Martin-Schwinger equations it is possible to derive a non-equilibrium cluster expansion for the two-particle GF. We have restricted ourselves to three-particle collisions and have arrived at /2-4/

$$g_2(121'2') = g_2^L(121'2') \int d\bar{s} d\bar{3} g^{-1}(3,\bar{3}) \left\{ g_3^L(12\bar{3},1'2'3') - g_2^R(121'2') g_1(\bar{3}3') \Big|_{\text{exch}} \right\} - g_2^{\text{ren}}(121'2') \quad (9)$$

Here  $g_2^L$  and  $g_3^L$  ("L" - ladder) are the solutions of the two- and three-particle problem, and  $g_2^{\text{ren}}$  contains the self-energy contributions to the two-particle term which are of the order of three-particle events.  $g_2^L$  is given by eq. (4) (but with full one-particle GF instead of free ones). Before we are going to deal with the three-particle contribution to the cluster expansion we want to consider a more general situation in which the formation of bound states is possible in the system. In this case a generalization of the boundary condition is necessary /2,3,6/. Obviously is

$$\lim_{t' \rightarrow t+\infty} \overset{\geq}{g}_{12}(t,t') = \overset{\geq b}{g}_{12} + \overset{\geq sc}{g}_{12}; \lim_{t' \rightarrow t-\infty} \overset{\geq sc}{g}_{12} = \overset{\geq}{g}_1 \overset{\geq}{g}_2 \Big|_{\text{exch.}} \quad (10)$$

where  $\overset{\geq b}{g}_{12}$  is the bound-state part and  $\overset{\geq sc}{g}_{12}$  the scattering part. The corresponding condition for  $\overset{\geq}{g}_{123}$  which takes into account the existence of two-particle subclusters is

$$\lim_{t' \rightarrow t+\infty} \overset{\geq}{g}_{123}(t,t') = \overset{\geq}{g}_1 \overset{\geq}{g}_2 \overset{\geq}{g}_3 + \overset{\geq b}{g}_{23} \overset{\geq}{g}_1 + \overset{\geq b}{g}_{13} \overset{\geq}{g}_2 + \overset{\geq b}{g}_{12} \overset{\geq}{g}_3 \\ = \sum_{k=0}^{\infty} \overset{\geq k}{g}_{123} \quad (11)$$

with  $\overset{\geq 0}{g}_{123} = \overset{\geq}{g}_1 \overset{\geq}{g}_2 \overset{\geq}{g}_3$ ,  $\overset{\geq 1}{g}_{123} = \overset{\geq b}{g}_{23} \overset{\geq}{g}_1$  etc.

Then the solution of the three-particle ladder equation may be written down in the following way

$$\overset{\geq}{g}_{123}(t,t') = \sum_{k=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{t} d\bar{t'} \Omega_k^R(t,\bar{t}) \overset{\geq k}{g}_{123}(\bar{t},\bar{t'}) \Omega_k^A(\bar{t},t') \quad (12)$$

with  $\Omega_k^R = 1 + i^2 g_{123}^R V_{123}^R$  being the generalized Moeller-operator of multi-channel scattering theory /5/.

Introducing the cluster expansion into the first hierarchy equation we obtain a kinetic equation for the one-particle distribution function. Because of (11) this equation is not closed, there is needed a second equation for the distribution of bound particles. If we assume a homogeneous system the generalized Boltzmann equation reads

$$\frac{\partial}{\partial T} f(p_1, T) = I_2 + I_3 - I_{\text{ren}} \quad (13a)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} f_{n_{12}}(p_{12}, T) = I_{n_{12}}(p_{12}, T) \quad (13b)$$

with  $I_2$  and  $I_3$  being the two- and three-particle collision integral, respectively. The term  $I_{\text{ren}}$  compensates for the successive binary collisions in the three-particle integral and ensures the conservation of the energy in binary collision approximation /7/.

For example,  $I_3$  is given by

$$I_3(p_1, T) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \int \frac{dp_2}{(2\pi)^3} \frac{dp_3}{(2\pi)^3} |\langle p_1 p_2 p_3 | T_{123}^{0\bar{k}}(\epsilon_{123}^0 + i\varepsilon) | \bar{k}\bar{p} \rangle|^2 \\ * 2\pi \delta(\epsilon_{123}^0 - \epsilon_{123}^{\bar{k}}) \{ \bar{f}_{\bar{k}} - f_1 f_2 f_3 \} \\ + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \int \frac{dp_{23}}{(2\pi)^3} |\langle p_1 p_{23} n_{23} | T_{123}^{1\bar{k}}(\epsilon_{123}^1 + i\varepsilon) | \bar{k}\bar{p} \rangle|^2 \\ * 2\pi \delta(\epsilon_{123}^1 - \epsilon_{123}^{\bar{k}}) \{ \bar{f}_{\bar{k}} - f_{n_{23}} f_1 \} \quad (14)$$

where  $k$  denotes the different channels ( $f_{k=0} = f_1(p_1)f_2(p_2)f_3(p_3)$ ,  $f_{k=1} = f_1(p_1)f_{n_{23}}(p_{23})$  etc.). The  $T$ -matrices describe the relevant transitions (scattering, ionization, recombination, rearrangement).

With (13) kinetic equations are given suited for the description of nonideal dense gases.

References

- /1/ Bornath, T., Schlanges, M.: V. Schule für statistische Physik, Proceedings, the foregoing paper
- /2/ Kremp, D., Schlanges, M., Bornath, T.: to be published in a ZIE-preprint, AdW d. DDR, 1986
- /3/ Schlanges, M.: Dissertation B, Rostock 1985
- /4/ Kremp, D., Schlanges, M., Bornath, T.: J.Stat.Phys. vol. 41 (3/4) (1985) 661
- /5/ Taylor, J.R.: Scattering Theory (in russ.), Mir, Moskau 1975
- /6/ Klimontovich, Yu.L., Kremp, D.: Physica 109A (1981) 517
- /7/ Kraeft, W.D., Schlanges, M., Kremp, D.: submitted to J.Phys. A

Authors

Dr.sc. M. Schlanges  
Dipl.-Phys. T. Bornath  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik

DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

Quantenkinetische Theorie der Fluktuationen

I. HARTMANN

In dieser Arbeit sollen die Fluktuationen in einem quantenmechanischen Vielteilchensystem betrachtet werden. Ein solches System beschreibt man zweckmäßig in der Sprache der 2. Quantisierung, d.h. mit den Feldoperatoren  $\Psi^+, \Psi$ , die den bekannten Vertauschungsregeln genügen. Die Observablen des Systems lassen sich dann in Termen der Feldoperatoren schreiben. So ist z.B. die Dichte durch den Operator

$$\frac{1}{V} \varrho(11') = \Psi^+(1) \Psi(1') \quad (1)$$

( $V$  - Volumen,  $1 = r_1 t$ ,  $1' = r'_1 t$ ) bestimmt und der das System charakterisierende Hamiltonoperator hat in wechselwirkenden Vielteilchensystemen die folgende Form

$$H_a = - \sum_a \frac{\hbar^2}{2m_a} \int dr_a \Psi_a^+(1) \nabla^2 \Psi_a(1) + \frac{1}{2} \sum_{ab} \int dr_a dr_b \Psi_a^+(1) \Psi_b^+(2) V_{ab}(r_1 - r_2) \Psi_b(2) \Psi_a(1) \quad (2)$$

Der Operator der Dichte charakterisiert die Teilchendichte des Systems im reinen (Mikro)-Zustand. Für ein kompliziertes Vielteilchensystem im thermodynamischen limes ( $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ ,  $n$  - endlich) haben wir an Stelle des Operators den Mittelwert des Operators zu betrachten:

$$\frac{1}{V} \langle \varrho(11') \rangle = \langle \Psi^+(1) \Psi(1') \rangle = \text{Tr } P \Psi^+(1) \Psi(1') \quad (3)$$

Dann sind die Fluktuationen in einem solchen System bestimmt durch die Abweichung des Mikrozustandes vom Makrozustand, d.h. durch den Operator

$$\delta \varrho(11') = \varrho(11') - \langle \varrho(11') \rangle \quad (4)$$

Dieser Operator hat die Eigenschaft, daß sein Mittelwert verschwindet

$$\langle \delta \varrho(11') \rangle = 0 \quad (5)$$

Eine weitere wichtige Größe zur Charakterisierung von Fluktuationen ist die Korrelationsfunktion

$$\langle \delta g(11') \delta g(22') \rangle \quad (6)$$

Bei der Herleitung der Boltzmann-Gleichung wird neben der Bedingung der totalen Abschwächung der Anfangskorrelation die Annahme gemacht, daß die großmaßstäblichen Fluktuationen vernachlässigbar klein sind.

Um großmaßstäbliche Fluktuationen mit einzubeziehen, führen wir eine Mittelung des Dichteoperators über ein kleines Volumen ein (analog wie bei Klimontovich /1/ für den klassischen Fall). Der geglättete Dichteoperator wird mit  $\tilde{g}$  bezeichnet. Das kleine Volumen ist so gewählt, daß es viel kleiner als das Gesamtvolumen ist, aber wiederum groß genug ist, um die kleinen Fluktuationen bei der Glättung herauszumitteln.

Ausgehend von der Beziehung (4) sieht die geglättete Größe für die Fluktuationen folgendermaßen aus

$$\delta \tilde{g} = \tilde{g} - \langle \tilde{g} \rangle \quad (7)$$

Die Gesamtfluktuationen können wir in zwei Anteile aufspalten

$$\delta g = \delta \tilde{g} + \Delta g \quad (8)$$

einen Anteil  $\delta \tilde{g}$ , der von den großen Fluktuationen stammt und einen Anteil  $\Delta g$ , der durch die kleinen Fluktuationen verursacht ist. Für  $\Delta g$  folgt aus den Gleichungen (4), (7) und (8)

$$\Delta g = g - \tilde{g} ; \quad \tilde{\Delta g} = 0 \quad (9)$$

Damit ergibt sich eine Zerlegung des Korrelators in einen Anteil durch große Fluktuationen  $\langle \delta g_1 \delta g_2 \rangle$ , einen Anteil durch kleine Fluktuationen  $\langle \Delta g_1 \Delta g_2 \rangle$  und zwei Anteile von gemischten Fluktuationen, die wir im folgenden vernachlässigen wollen

$$\langle \delta g(11') \delta g(22') \rangle = \langle \delta g_1 \delta g_2 \rangle = \langle \delta \tilde{g}_1 \delta \tilde{g}_2 \rangle + \langle \Delta g_1 \Delta g_2 \rangle + \langle \Delta g_1 \delta \tilde{g}_2 \rangle + \langle \delta \tilde{g}_1 \Delta g_2 \rangle^{(10)}$$

Mit Hilfe der Bewegungsgleichungen für die Feldoperatoren, dem Hamiltonoperator (1) und der Beziehung (2) läßt sich eine Bewegungsgleichung für den Dichteoperator schreiben

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 - \Delta_2) \right\} g(r_1 r_1' t) - n \int dr_2 [V(r_1 - r_2) - V(r_1' - r_2)] g(r_2 r_2' t) g(r_1 r_1' t) = 0 \quad (11)$$

wobei Selbstwechselwirkungssterme vernachlässigt wurden.

Im folgenden wird die Annahme der teilweisen Abschwächung (ana-

log zu Klimontovich /1/) gemacht, d.h. daß für die kleinen Fluktuationen die Bedingung der totalen Abschwächung gilt, aber die großen Fluktuationen nicht abgeschwächt sind.  
In binärer Stoßapproximation gilt nun die für kleinen Fluktuationen

$$\langle \widetilde{\Delta \varrho_1} \widetilde{\Delta \varrho_2} \rangle = \langle \Delta \varrho_1 \Delta \varrho_2 \rangle :$$

$$\langle \Delta \varrho_1 \Delta \varrho_2 \rangle + \langle \widetilde{\varrho_1} \rangle \langle \widetilde{\varrho_2} \rangle = \Omega_{12} \langle \widetilde{\varrho_1} \rangle \langle \widetilde{\varrho_2} \rangle \Omega_{12}^+ = \langle \widetilde{\varrho_{1\infty}} \widetilde{\varrho_{2\infty}} \rangle \quad (12)$$

( $\Omega_{12}$  - Mölleroperator)

Mit dem Ansatz (9) für den Dichteoperator  $\varrho = \Delta \varrho + \widetilde{\varrho}$  gehen wir in Gleichung (11) ein und glätten anschließend. Unter Verwendung der Beziehung (7)  $\widetilde{\varrho} = \delta \widetilde{\varrho} + \langle \widetilde{\varrho} \rangle$  erhalten wir

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 - \Delta_2) - n \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] \langle \widetilde{\varrho}_2 \rangle \right\} \widetilde{\varrho}_1 = \\ n I_8 (\widetilde{\varrho}) + n \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] \delta \widetilde{\varrho}_2 \widetilde{\varrho}_1 \quad (13)$$

kurz

$$L_1 \widetilde{\varrho}_1 = n I_8 (\widetilde{\varrho}) + \bar{Y} \quad (13a)$$

Hier ist

$$I_8 (\widetilde{\varrho}) = \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] [\Omega_{12} \widetilde{\varrho}_1 \widetilde{\varrho}_2 \Omega_{12}^+ - \widetilde{\varrho}_1 \widetilde{\varrho}_2]$$

der Boltzmannsche Stoßoperator und  $\bar{Y}$  eine stochastische Quelle, so daß wir mit (13a) eine Langevin-Gleichung für den geglätteten Anteil  $\widetilde{\varrho}$  erhalten haben. Bei nochmaliger Ausnutzung der Beziehung (7) und Mittelung der Gleichung (13) über das Gesamtvolume erhalten wir

$$L_1 \langle \widetilde{\varrho}_1 \rangle = n \bar{I} + n I_8 \quad (14)$$

eine Boltzmann-Gleichung mit Berücksichtigung des Beitrages der großen Fluktuationen durch

$$\bar{Y} = \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] \langle \delta \widetilde{\varrho}_1 \delta \widetilde{\varrho}_2 \rangle \quad (15)$$

( $I_8 = \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] [\langle \widetilde{\varrho}_{1\infty} \widetilde{\varrho}_{2\infty} \rangle - \langle \widetilde{\varrho}_1 \rangle \langle \widetilde{\varrho}_2 \rangle]$ )  
Unter Verwendung der Gleichungen für  $\widetilde{\varrho}$  (13) und  $\langle \widetilde{\varrho} \rangle$  (14) erhalten wir eine Bewegungsgleichung für  $\delta \widetilde{\varrho}$ :

$$(L_1 + \delta I_1) \delta \widetilde{\varrho}_1 - \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] \delta \widetilde{\varrho}_2 \langle \widetilde{\varrho}_1 \rangle = Y \quad (16)$$

$$\text{mit } Y = n \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] [\delta \widetilde{\varrho}_1 \delta \widetilde{\varrho}_2 - \langle \delta \widetilde{\varrho}_1 \delta \widetilde{\varrho}_2 \rangle] \\ + n \int dr_2 [v_{12} - v_{1 \cdot 2}] \delta \widetilde{\varrho}_{1\infty} \delta \widetilde{\varrho}_{2\infty}$$

$$\text{und } \delta I_1, \delta \tilde{g}_1 = -n \int dr_2 [V_{12} - V_{1'2}] [\delta \tilde{g}_{1\infty} \langle \tilde{g}_{2\infty} \rangle + \delta \tilde{g}_{2\infty} \langle \tilde{g}_{1\infty} \rangle]$$

Sie hat ebenfalls die Form einer Langevingleichung mit der stochastischen Quelle  $\tilde{Y}$ .

Da die Boltzmanngleichung (14) bei Einbeziehung von großen Fluktuationen durch  $\tilde{I} \sim \langle \delta g_i \delta g_k \rangle$  keine abgeschlossene Gleichung mehr ist, muß eine weitere Gleichung für den Korrelator  $\langle \delta g_1 \delta g_2 \rangle$  betrachtet werden, die aus (16) hergeleitet werden kann

$$(L_{12} + \delta I_1 + \delta I_2) \langle \delta \tilde{g}_1 \delta \tilde{g}_2 \rangle - n \int dr_3 [V_{13} - V_{1'3}] \langle \delta \tilde{g}_3 \delta \tilde{g}_2 \rangle \langle \tilde{g}_1 \rangle - n \int dr_3 [V_{23} - V_{2'3}] \langle \delta \tilde{g}_3 \delta \tilde{g}_1 \rangle \langle \tilde{g}_2 \rangle = A \quad (17)$$

$$\text{mit } \delta I_1 \langle \delta \tilde{g}_1 \delta \tilde{g}_2 \rangle$$

$$= -n \int dr_3 [V_{13} - V_{1'3}] \{ \langle \delta \tilde{g}_{1\infty} \delta \tilde{g}_{2\infty} \rangle \langle \tilde{g}_{3\infty} \rangle + \langle \delta \tilde{g}_{3\infty} \delta \tilde{g}_{2\infty} \rangle \langle \tilde{g}_{1\infty} \rangle \}$$

und A, dem Quellterm

$$A = n \int dr_3 \{ [V_{13} - V_{1'3}] + [V_{23} - V_{2'3}] \langle \delta \tilde{g}_1 \delta \tilde{g}_2 \delta \tilde{g}_3 \rangle \} + n \int dr_3 \{ [V_{13} - V_{1'3}] \langle \delta \tilde{g}_{1\infty} \delta \tilde{g}_{3\infty} \delta \tilde{g}_2 \rangle + [V_{23} - V_{2'3}] \langle \delta \tilde{g}_{2\infty} \delta \tilde{g}_{3\infty} \delta \tilde{g}_1 \rangle \}$$

Mit Hilfe der Polarisationsnäherung kann der Quellterm A in zwei Anteile aufgespalten werden

$$A = A_B + \tilde{A} \quad (18)$$

einen Boltzmannanteil  $A_B$  und einen Anteil, der durch die großen Fluktuationen verursacht wurde.

In der Ordnung  $O(\frac{1}{V})$  ist

$$\tilde{A} = n \delta(x_1 - x_2) \tilde{I}(x_1 x_3 t) \quad (19)$$

$$A_B = I_g n \delta(x_1 - x_2) + n I_{12}$$

mit

$$\int I_{12} dr_2 = I_g : x_1 = r_1 r'_1 : x_2 = r_2 r'_2$$

Mit den Gleichungen (14) und (17) erhalten wir ein geschlossenes System von Gleichungen.

Für den Spezialfall  $\tilde{I} = 0$  ergibt sich folgende Langevingleichung

$$(L_1 + \delta I_1) \delta \tilde{g}_1 = Y \quad (20)$$

mit  $\langle Y \rangle = 0$

$$\langle Y(r_1 r_2' t_i) Y(r_1 r_2' t_i) \rangle = A_g \delta(t_i - t_i)$$

#### Literatur

/1/ Klimontovich, Yu.L.: "Kinetische Theorie des nichtidealen Gases und des nichtidealen Plasmas", Nauka, Moskau 1975

#### Verfasser

Dr. I. Hartmann  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik

DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

Quasiteilchenenergien in relativistischer Kernmaterie

F. REINHOLZ

1. Einführung

Wird Kernmaterie extremen Bedingungen ( $T > 10^0 \text{K}$ ,  $n > 10^{30} \text{cm}^{-3}$ ) unterworfen, wie es etwa bei astrophysikalischen Objekten (weiße Zwerge) oder bei Schwerionenstößen der Fall ist, so lassen sich relativistische Effekte wie die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Masse, das Auftreten von Antiteilchen oder Retardierung der Wechselwirkung beobachten. Um ein solches Nukleonensystem zu beschreiben, ist eine relativistische Vielteilchentheorie notwendig. Im nichtrelativistischen Fall erweist sich die Greenfunktionstechnik als gut handhabbar und erfolgreich. Wir wollen deshalb eine relativistische Verallgemeinerung dieser Methode zur Beschreibung eines Nukleonensystems verwenden.

Wir interessieren uns insbesondere für thermodynamische Eigenschaften eines relativistischen Nukleonensystems, das über Mesonenaustausch wechselwirkt, wie Phasendiagramme, Instabilitäten u.ä. Einen Schlüssel zur Berechnung thermodynamischer Größen stellt das Quasiteilchenkonzept dar /1,2/. Quasiteilchen sind Elementaranregungen von Vielteilchensystemen. Sie können, im Gegensatz zu Elementarteilchen, nicht als freie Teilchen auftreten, weil die Wechselwirkung in ihre Definition eingeht. Der Vorteil besteht darin, daß man mittels wechselwirkungsfreier Quasiteilchen reale Systeme in der Theorie des idealen Fermi- oder Bose-Gases beschreiben kann. In Formeln drückt sich das wie folgt aus:

$$\frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} \pm 1} \quad \xrightarrow{\hspace{1cm}} \quad \frac{1}{e^{\beta(E_q-\mu)} \pm 1}$$

mit  $E = \sqrt{p^2 + m_0^2}$        $\hbar = c = k_B = 1$        $E_q = \sqrt{p^2 + m_0^2} - \text{Korrekturen}$

Dieses Quasiteilchenkonzept hat sich im nichtrelativistischen Fall vielfach bewährt, so sind Plasmonen, Cooper-Paare oder Exitonen bekannte Quasiteilchen. Wir wollen nun die wechsel-

wirkenden Nukleonen als Quasiteilchen ansehen.

## 2. Die Greenfunktionstechnik

Wir betrachten ein aus Nukleonen und Mesonen bestehendes Vielteilchensystem. Die Nukleonen werden durch die Feldoperatoren  $\Psi$ , die Mesonen durch die Feldoperatoren  $\mathcal{G}$  beschrieben. Ihre Bewegungsgleichungen, die Dirac-Gleichung und die Klein-Gordon-Gleichung sind über einen Zusatzterm, der aus der Wechselwirkung herröhrt, miteinander verkoppelt. Mit Hilfe der Feldoperatoren lassen sich Greenfunktionen definieren:

$$G(x, x') = -i \langle T(\Psi(x) \bar{\Psi}(x')) \rangle \quad \text{mit } \bar{\Psi}(x) = \Psi^+(x) \gamma^0$$

für Fermionen

$$D(x, x') = -i \langle T(\mathcal{G}(x) \mathcal{G}^*(x')) \rangle$$

für Bosonen

Solche Größen sind schon aus der QED bekannt. Der angegebene Erwartungswert ergibt sich in der QED durch die Mittelung über Vakuumzustände. Im Falle eines Nukleonensystems von endlicher Dichte und Temperatur ist die Mittelung jetzt im Sinne der Quantenstatistik zu verstehen:  $\langle \hat{A} \rangle = \text{Sp} \hat{g} \hat{A}$ , wobei  $\hat{g}$  ein relativistischer, quantenmechanischer, großkanonischer Dichteoperator ist. Dieser ist gegeben zu

$$\hat{g} = \frac{1}{Z} e^{-\beta_v P^v + \alpha N_B}$$

Dabei bedeuten  $Z$  die großkanonische Zustandssumme,  $\beta_v$  der zeitartige Vierervektor, der den Temperaturspekt beinhaltet,  $P^v$  der Viererimpuls der Teilchen, gebildet aus dem Energie-Impuls-Tensor des Systems,  $\alpha$  das relativistische chemische Potential dividiert durch die Temperatur und  $N_B$  die Baryonenanzahl [3,4].

Die so definierten thermodynamischen Greenfunktionen beinhalten Informationen zu allen wichtigen Größen des Systems. So ergeben sich die Quasiteilchenenergien als Pole der Greenfunktionen. Zur Bestimmung der Greenfunktionen muß man deren Bewegungsgleichungen lösen, die sich aus den Bewegungsgleichungen der Feldoperatoren ergeben und miteinander verkoppelt sind. Das entstehende Gleichungssystem läßt sich jedoch formal entkoppeln, so daß die bekannte Dyson-Gleichung entsteht:

$$G(P_v, T, \mu) = G_o(P_v, T, \mu) + G_o(P_v, T, \mu) \Sigma(R_v, T, \mu) G(R_v, T, \mu) \quad (1a)$$

mit

$$\Sigma(P_v, T, \mu) = i g_0^2 \int \frac{d^4 K}{(2\pi)^4} \gamma^5 G(P_v - K_v, T, \mu) \Gamma^5(P_v, K_v) D(K_v) \quad (1b)$$

Die Wechselwirkung wird durch den Selbstenergieoperator beschrieben, streicht man diesen Term, so werden freie Felder behandelt. Eine exakte Lösung der Gleichungen (1) ist nicht möglich, es kommt darauf an, geeignete Approximationen zu finden. Als formale Lösung ergibt sich zunächst die inverse Dyson-Gleichung

$$G(P_v, T, \mu) = \frac{1}{g^2 P_v - m_0^2 - \sum^R(P_v, T, \mu)} \quad (2)$$

die man in verschiedenen Näherungen angeben kann.

### 3. Selbstenergieapproximation in zweiter Ordnung der Kopplungskonstanten

Um einen auswertbaren Zusammenhang für die Selbstenergie zu finden, müssen nun die exakten Faktoren in der Bestimmungsgleichung (1b) durch bekannte, einfachere Ausdrücke ersetzt werden. Diese Ersetzungen werden so gewählt, daß eine Approximation in zweiter Ordnung der Kopplungskonstanten entsteht. Die vollständige Ein-Teilchen-Greenfunktion für Fermionen wird durch die Greenfunktion freier Teilchen ersetzt:

$$G(P_v, T, \mu) \rightarrow G_o(P_v, T, \mu) = \frac{\gamma^5 P_v + m_0}{2 E_p} \left\{ \frac{1 - f(E_p)}{P_0 - E_p + i\epsilon} + \frac{f(E_p)}{P_0 - E_p - i\epsilon} - \frac{1 - \bar{f}(E_p)}{P_0 + E_p - i\epsilon} - \frac{\bar{f}(E_p)}{P_0 + E_p + i\epsilon} \right\} \quad (3)$$

$$\text{mit } E_p = \sqrt{P^2 + m_0^2} \quad f(E_p) = \frac{1}{e^{\beta(E_p/\mu)} + 1} \quad \bar{f}(E_p) = \frac{1}{e^{\beta(E_p/\mu)} + 1}$$

Der Bosonenpropagator wird durch das Yukawa-Potential genähert:

$$D(K_v) \rightarrow \frac{1}{K^2 - \mu_0^2 + i\epsilon} \quad (4)$$

Die Vertexfunktion  $\Gamma^5$  wird aufgrund ihrer Struktur durch eine Dirac-Matrix approximiert:

$$\Gamma^5(P_v, K_v) \rightarrow \gamma^5 \quad (5)$$

Werden die Ausdrücke (3), (4) und (5) in die Formel (1b) eingesetzt und ausmultipliziert, so entsteht eine Anzahl Summanden,

die die Fermifunktion enthalten, ebenso wie Summanden, die die Fermifunktion nicht enthalten. Dieses legt eine Aufspaltung der Selbstenergie in einen Materieanteil und in einen Vakuumanteil nahe, die jetzt untersucht werden sollen /5/:

$$\Sigma(P_v, T, \mu) = \Sigma_M(P_v, T, \mu) + \Sigma_V(P_v) \quad (6)$$

### 3.1. Materieanteil der Selbstenergie

Der erste Summand in (6) ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} \Sigma_M = i g_0^2 \int \frac{d^4 K}{(2\pi)^4} \gamma^5 \frac{\gamma^\nu (P_v - K_\nu) + m_e}{K^2 - \mu_0^2 + i\eta} \gamma^5 & \left[ \frac{f(E_{p-K})}{2E_{pK}} 2\pi i \delta(P_v - K_0 - E_{pK}) \right. \\ & \left. + \frac{\bar{f}(E_{p-K})}{2E_{pK}} 2\pi i \delta(P_v - K_0 + E_{pK}) \right] \end{aligned}$$

Aufgrund der Abhängigkeit von den verschiedenen Dirac-Matrizen ist eine weitere Aufspaltung sinnvoll:

$$\Sigma_M(P_v, T, \mu)_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}^V \Sigma_V(P_v, T, \mu) + \delta_{\alpha\beta}^I \Sigma_I(P_v, T, \mu) \quad \nu = 0, 1, 2, 3 ; \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$$

Nach Einführung von Kugelkoordinaten und Ausführung der Winkelintegration ergeben sich die einzelnen Anteile zu:

$$\Sigma_0(P, T, \mu) = \frac{g_0^2}{8\pi^2} \int_0^\infty d\ell \frac{\ell}{P} [f(E_\ell) - \bar{f}(E_\ell)] \ln \frac{(P+\ell)^2 + \mu_0^2}{(P-\ell)^2 + \mu_0^2} \quad (7a)$$

$$\Sigma_1 = \Sigma_2 = 0 \quad (7b)$$

$$\Sigma_3(P, T, \mu) = \frac{g_0^2}{8\pi^2} \int_0^\infty d\ell \frac{\ell}{\ell^2 + \mu_0^2} [f(E_\ell) - \bar{f}(E_\ell)] \left[ \frac{\ell}{P} - \frac{P^2 + \ell^2 + \mu_0^2}{4P^2} \ln \frac{(P+\ell)^2 + \mu_0^2}{(P-\ell)^2 + \mu_0^2} \right] \quad (7c)$$

$$\Sigma_I(P, T, \mu) = -\frac{g_0^2}{8\pi^2} \int_0^\infty d\ell \frac{m_e}{\ell^2 + \mu_0^2} \frac{\ell}{2P} [f(E_\ell) - \bar{f}(E_\ell)] \ln \frac{(P+\ell)^2 + \mu_0^2}{(P-\ell)^2 + \mu_0^2} \quad (7d)$$

### 3.2. Vakuumanteil der Selbstenergie

Der zweite Summand in (6) ergibt sich zu:

$$\Sigma_V(P_v) = i g_0^2 \int \frac{d^4 K}{(2\pi)^4} \gamma^5 \frac{\gamma^\nu (P_v - K_\nu) + m_e}{K^2 - \mu_0^2 + i\eta} \gamma^5 \frac{1}{K^2 - \mu_0^2 + i\eta}$$

Ein solcher Ausdruck ist bereits aus der QED bekannt. Er ist divergent und muß deshalb einer Renormierungsprozedur unter-

worfen werden. Diese wird z.B. von Archiezer und Berestezkij dargestellt [6]. Wie beim Materieanteil ist eine Aufteilung nach den Dirac-Matrizen möglich:

$$\sum_v^k (p_v) = \gamma^v p_v S_1(P) + m_0 S_2(P)$$

wobei sich die Anteile errechnen zu:

$$S_1(P) = -\frac{3g_o^2}{16\pi^2} \int dx \left[ (x-1) \ln \left| \frac{m_o^2 x + \mu_o^2(1-x) - P^2(1-x)x}{m_o^2 x^2 + \mu_o^2(1-x)} \right| + \frac{2m_o^2 x^2(1-x)}{m_o^2 x^2 + \mu_o^2(1-x)} \right] \quad (8a)$$

$$S_2(P) = -\frac{3g_o^2}{16\pi^2} \int dx \left[ \ln \left| \frac{m_o^2 x + \mu_o^2(1-x) - P^2(1-x)x}{m_o^2 x^2 + \mu_o^2(1-x)} \right| - \frac{2m_o^2 x^2(1-x)}{m_o^2 x^2 + \mu_o^2(1-x)} \right] \quad (8b)$$

Die Integrale (7) und (8) sind nun numerisch auszuwerten.

#### 4. Quasiteilchenenergie von Nukleonen

Die Bestimmung der Quasiteilchenenergie ist identisch mit der Aufgabe der Bestimmung der Polstellen der Greenfunktion. Dazu werden die Ausdrücke (7) und (8) in die Gleichung (2) eingesetzt:

$$G(p_v, T, \mu) = \frac{1}{\gamma^v [p_v(1-S_1) - \Sigma_\omega] - [m_0(1-S_2) + \Sigma_I]} \quad (9)$$

und die Nullstellen des Nenners berechnet. Dieses lässt sich einfacher realisieren, wenn der Bruch (9) erweitert wird mit  $\gamma^v [p_v(1-S_1) - \Sigma_\omega] + [m_0(1-S_2) + \Sigma_I]$ . Zur Vereinfachung der Auswertung wird in ein spezielles Koordinatensystem übergegangen,  $p_v = (p_o, 0, 0, P)$ , so daß sich eine quadratische Gleichung für die Bestimmung von  $p_o$  ergibt

$$[p_o(1-S_1)]^2 - 2p_o(1-S_1)\Sigma_o + \Sigma_o^2 - [p_o(1-S_1) - \Sigma_3]^2 - [m_0(1-S_2) + \Sigma_I]^2 = 0 \quad (10)$$

Die Lösungen von (10) sind die Quasiteilchenenergien, die sich ergeben zu:

$$E^\pm(p, T, \mu) = p_{o_{\pm 1}} = \frac{\Sigma_o}{1-S_1} \pm \sqrt{\left( p_o - \frac{\Sigma_3}{1-S_1} \right)^2 + \left( \frac{m_0(1-S_1) + \Sigma_I}{1-S_1} \right)^2} \quad (11)$$

Während das positive Vorzeichen die Teilchen beschreibt, steht das negative Zeichen für die Antiteilchen. Der Zusammenhang

(11) wurde mit den Konstanten  $m_0 = 937$  MeV,  $\mu_0 = 137$  MeV und  $g_e^2/4\pi = 1$  in der Abbildung 1 graphisch dargestellt.

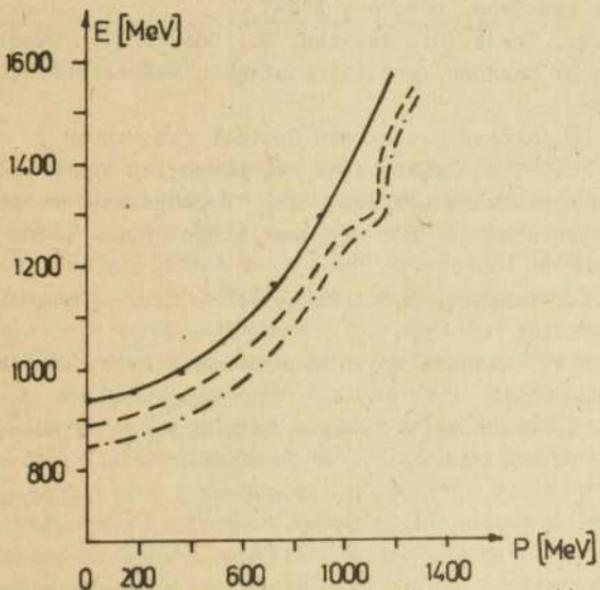


Abb. 1 Quasiteilchenenergie von Nukleonen in Abhängigkeit vom Impuls

$$\begin{aligned} \text{--- } & T = 1000 \text{ MeV}, \mu = 100 \text{ MeV} \\ \text{---... } & T = 100 \text{ MeV}, \mu = 1000 \text{ MeV} \\ \text{— } & \text{zum Vergleich, ideale Nukleonen } E = \sqrt{P^2 + m_0^2} \end{aligned}$$

Die so ermittelte Quasiteilchenenergie ist die Grundlage für die Berechnung thermodynamischer Größen. So lautet z.B. der Zusammenhang zwischen Baryondichte und Quasiteilchenenergie:

$$n_B(\mu, T) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty dP P^2 \left[ \frac{1}{e^{\beta(E^+/\mu)} + 1} - \frac{1}{e^{\beta(E^-/\mu)} + 1} \right]$$

Ahnliche Überlegungen lassen sich auch für andere Systeme, die ein relativistisches Verhalten zeigen, anstellen. Vom Standpunkt der Kernphysik ist ein Quark-Gluon-Plasma von besonderem Interesse /7/.

Literatur

- /1/ Kadanoff, L.P., Baym, G.: "Quantum Statistical Mechanics", John Wiley and Sons, New York 1969
- /2/ Kraeft, W.D., Kremp, D., Ebeling, W., Röpke, G.: "Quantum Statistics of Charged Particle Systems", Akademie-Verlag, Berlin 1984
- /3/ Reinholtz, F., Kremp, D.: WZ WPU Rostock (im Druck)
- /4/ Reinholtz, F.: "Thermodynamische Eigenschaften stark wechselwirkender Nukleonensysteme", in: "Ergebnisse der Schule junger Wissenschaftler zur mathematischen Physik", Bad Saarow 1984
- /5/ Bowers, R.L., Campell, J.A., Zimmermann, R.L.: Phys. Rev. D7 n.8 (1973)
- /6/ Achiezer, A.I., Beresteskij: "Kvantovaja Elektrodinamika", Nauka, Moskva 1982
- /7/ Blaschke, D., Reinholtz, F., Röpke, G., Kremp, D.: Phys. Lett. 151B (1985) 439

Verfasser

Dipl.-Phys. F. Reinholtz  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik  
  
DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

Pauli-Blocking-Effekte in dichter Kernmaterie

D. BLASCHKE; G. RÜPKE

In den beiden letzten Dekaden wurden neue Erkenntnisse gewonnen, die zu einem tieferen Verständnis der Struktur der Materie führten. Das Konzept, komplizierte Strukturen als Bindungszustände aus einfachen Bausteinen unter Einfluß einer möglichst elementaren Wechselwirkung aufzubauen, wurde auf den subatomaren Bereich ausgedehnt. Die Vielzahl der sogenannten Elementarteilchen wird auf wenige elementare Bausteine, die Leptonen, die Quarks und die Eichbosonen, zurückgeführt. Da für das Standardmodell, welches aus der Quantenchromodynamik und der Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung besteht, bisher keine geschlossene Lösung möglich war (für die starke Wechselwirkung kann die Störungsrechnung nicht angewandt werden), werden phänomenologische Modelle wie das Quark-Potential-Modell erfolgreich benutzt, um die Eigenschaften isolierter Hadronen wie innere Quantenzahlen, Massenspektrum, magnetische Momente usw. in guter Näherung zu beschreiben (siehe die zusammenfassende Darstellung von Hendry und Lichtenberg /1/). Als Beispiel seien die schweren Quark-Antiquark-Bindungszustände wie Charmonium und Bottomonium genannt, die mit Hilfe eines Potentialmodells berechnet und zum Teil vorhergesagt werden sowie experimentell verifiziert werden konnten.

Oblicherweise wird unter Berücksichtigung der Aussagen der Quantenchromodynamik das sogenannte Confinement-Quark-Potential  $v^{\text{conf}}(r)$  als Summe eines kurzreichweiten Anteils und eines langreichweiten Anteils angesetzt (für eine genauere Darstellung siehe /1,2/):

$$v^{\text{conf}}(r) = v^{\text{short}}(r) + v^{\text{long}}(r) ; \quad (1)$$

$$v^{\text{short}} = -\frac{2}{3} \alpha_s \frac{1}{r} + \frac{4\pi}{6m} 4\pi \delta(r) \left(1 + \frac{8}{3} (\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2)\right) \quad (2)$$

besteht aus einem Coulomb-artigen Potentialanteil (Ein-Gluon-Austausch) und dem entsprechenden Fermi-Breit-Hamiltonoperator

(hier nur für s-Zustände):

$$V^{\text{long}}(r) = \lambda r + c \quad (3)$$

beschreibt das durch Gitterrechnungen der Quantenchromodynamik motivierte confinement-Verhalten des Potentials, welches infolge des unendlichen Anwachsens der Energie das Auftreten isolierter Quarks verhindert. Anstelle des realistischen Quark-Potentials (1) können auch andere Formen wie das quadratische Confinement

$$V^{\text{conf}}(r) = \frac{m}{2} \omega^2 r^2 \quad (4)$$

für Modellrechnungen benutzt werden.

Außer den Eigenschaften isolierter Hadronen ( $\bar{q}\bar{q}$  bzw.  $qqq$ ) lassen sich auch Eigenschaften von Zwei-Hadronen-Systemen wie der Deuteronformfaktor oder die Nukleon-Nukleon-Streuphasen beschreiben. Es erhebt sich die Frage, wie eine statistische Beschreibung eines Vielteilchensystems für eine Wechselwirkung (1) bzw. (4), die für große Abstände divergiert, formuliert werden kann.

Gemäß /2/, /3/ kann das Quark-Potential-Modell für ein Viel-Quark-System in der Weise formuliert werden, daß die Wechselwirkung (string) auf farbneutrale Cluster beschränkt bleibt. Diese Absättigung der Wechselwirkung bewirkt, daß sie nicht additiv ist, und aus energetischen Gründen tragen die Zerlegungen des Quark-Systems im Cluster aus nächsten Nachbarn das größte statistische Gewicht, siehe Abb. 1.

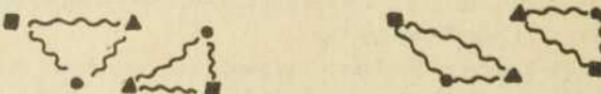


Abb. 1 Stringkonfigurationen für gleiche Quarkpositionen

Somit erhalten wir ein effektives Potential  $V(r) = V^{\text{conf}}(r)c(r)$ , welches die Wahrscheinlichkeit  $c(r)$  enthält, daß zwei Quarks im Abstand  $r$  nächste Nachbarn sind. Es wird näherungsweise angesetzt, daß für einen Bindungszustand  $c(r)$  gleich 1 ist, während für freie Quarks die Hartree-Näherung unabhängiger Teilchen benutzt werden kann. Auf dieser Basis lassen sich die Vielteilcheneffekte in dichten Systemen, wie sie beispielsweise

von einem System aus Nukleonen bekannt sind, untersuchen.

Von Interesse sind folgende Fragen: Wie werden sowohl die Eigenschaften von Clustern (Nuklide wie Deuterium, Tritium, Helium auf der Nukleonenebene und Hadronen auf der Quarkebene) durch eine Umgebung mit gegebener Dichte und Temperatur modifiziert? Wie kommt in den Eigenschaften der Nukleonen und Atomkerne die Quark-Substruktur zum Ausdruck? Gibt es einen neuen Zustand der Materie, das Quark-Plasma?

Umgebungseffekte lassen sich in systematischer Weise mit Hilfe der Methode der thermodynamischen Green-Funktionen behandeln. Ein wichtiger Effekt ist das Pauli-Blocking, infolge des Pauli-Prinzips wirkt sich die Besetzung des Phasenraumes durch die Fermionen der Umgebung so aus, daß Bindungszustände geschwächt bzw. zerstört werden. Dies kommt im Falle der Kernmaterie in einer Verringerung der Häufigkeit von Clustern /4/ sowie in einer Vergrößerung der effektiven Radien von Clustern aus Nukleonen /5/ zum Ausdruck.

Ahnliche Effekte lassen sich auch für die Bildung von Hadronen aus Quarks erwarten. Das Nukleon als drei-Quark-Bindungszustand folgt aus einer Bethe-Salpeter-Gleichung

$$[T_3] = [K] + [K] [G_3^0] [T_3] \quad (5)$$

wobei  $K = V + \Delta V$  neben der effektiven Wechselwirkung  $V(r) = V^{\text{conf}}(r)c(r)$  den Einfluß der Umgebung enthält, der näherungsweise durch

$$\boxed{\Delta V} \approx \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} T_3 \quad + \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} T_3 \quad + \text{cyd.} \quad (6)$$

gegeben ist. Die störungstheoretische Auswertung ergibt (siehe /2/)

$$\Delta E_{\nu p}^{\text{Pauli}} = \sum_{123456} \sum_{\nu' p'} f_3(E_{\nu' p'}) \Psi_{\nu p}^*(123) \Psi_{\nu' p'}(456) \{ \delta_{36} \Psi_{\nu p}(123) \Psi_{\nu' p'}^*(456) - \Psi_{\nu p}(453) \Psi_{\nu' p'}^*(126) + \text{cycl.} \} (E_{\nu' p'} + E_{\nu p} - E_1 - E_2 - E_3 - E_4 - E_5 - E_6) \quad (7)$$

wobei  $f_3(E) = [\exp \beta(E - 3\mu) + 1]^{-1}$  die Fermiverteilung für die Hadronen bedeutet. Eine Modellrechnung für das quadratische Confinement-Potential (4) ergibt

$$E_{VP} = P^2 / 6m + 3\sqrt{3}\omega + 3m, \quad b^2 = (\sqrt{3}m\omega)^{-1}$$

$$\Psi_{VP} = \delta(P-P_R) \left( \frac{\sqrt{3}b^2}{\pi} \right)^{3/2} \exp(-b^2 p_{P_1}^2) \exp(-3b^2 p_{P_2}^2/4) sfc(123) \quad (8)$$

der Spin-Flavor-Color-Teil  $sfc(123)$  ist symmetrisch in den Spin- und Flavor-Variablen, dagegen antisymmetrisch in den Farben.

Der Pauli-Shift der Bindungszustände infolge des Einflusses der Umgebung lautet hiermit

$$\Delta E_{VP}^{Pauli} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{3\sqrt{3}}{32\sqrt{\pi}} \frac{b}{P} \int_{-\infty}^{\infty} dP' P' f_3(E_{VP},) \quad (9)$$

$$\times \left\{ (204 - 2b^2(P+P')^2) e^{-(P-P')^2 b^2/4} - (51 - 2b^2(P+P')^2) e^{-(P-P')^2 b^2/3} \right\}$$

und ist eine Funktion des Gesamtimpulses  $P$ , der Temperatur  $T$  und der Baryonenzahldichte  $n_B$ . Eine effektive Nukleonenmasse  $M^*$  lässt sich gemäß

$$M^* = \frac{M}{1 + \frac{M}{\hbar^2 P} (\partial E_{VP}^{Pauli} / \partial P)} \quad (10)$$

einführen, sie ist in Abb. 2 als Funktion von  $P$ ,  $T$  und  $n_B$  dargestellt [7].

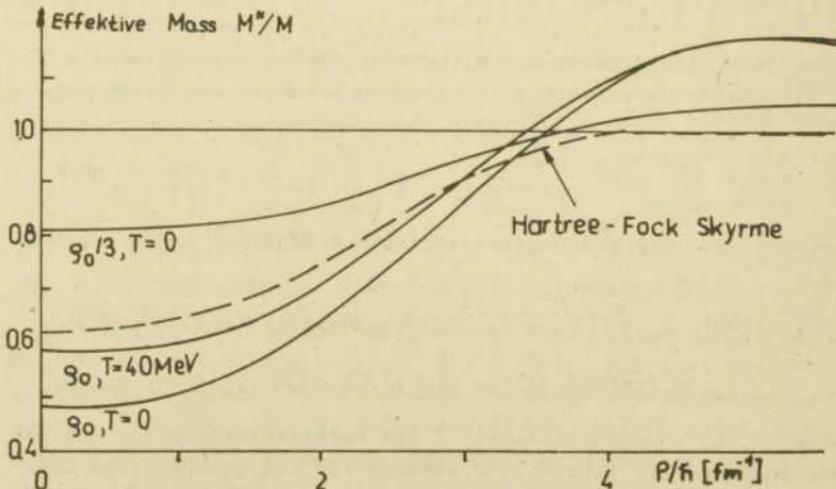


Abb. 2 Effektive Masse für Nukleonen in heißer, dichter Kernmaterie

Es lässt sich zeigen /2/, daß die Dichte der Nukleonen in einer einfachen (Leiter-Hartree-Fock) Näherung durch eine Fermifunktion berechnet werden kann, bei der die Energien geshiftet sind. Somit ergibt sich aus (9) eine Dichte- und Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials in Kernmaterie; für  $T = 0$  berechnet sie sich unmittelbar aus dem Pauli-Shift am Fermi-Impuls  $P_F$ :

$$E_{vP_F}^0 + \Delta E_{vP_F}^{\text{Pauli}} = 3\mu \quad (11)$$

Wie in Abb. 3 gezeigt, werden empirische Ergebnisse, die beispielsweise zur Einführung der Skyrme-Wechselwirkung in der Beschreibung von Kernmaterie führen, in guter Näherung reproduziert, wenn der Bindungsanteil (virtuelle Quark-Antiquark-Anregung weggelassen wird.

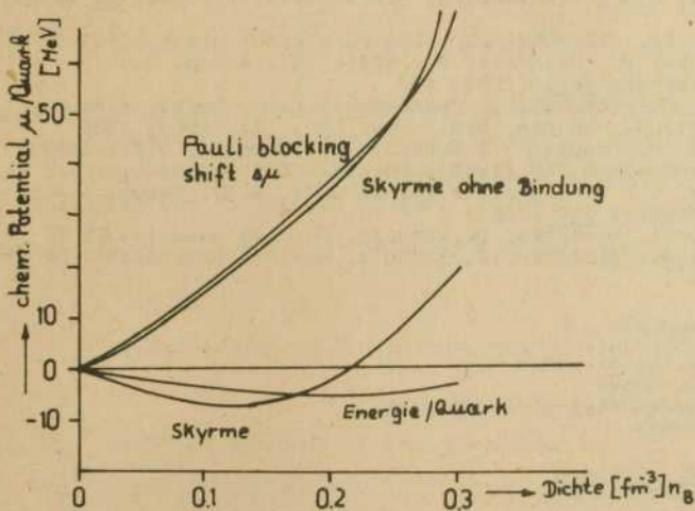


Abb. 3 Dichteabhängigkeit des chemischen Potentials von Kernmaterie für  $T=0$  unter Berücksichtigung des Pauli-blocking-Shifts im Vergleich zu empirischen Ansätzen

Ein weiterer Effekt der Umgebung besteht in dem "Aufblähen" der Nukleonen, die effektiven Radien der Bindungszustände werden dichte- und temperaturabhängig /8/. Dieses Verhalten kann mit gegenwärtig gemessenen Formfaktoren in Atomkernen (EMC-Effekt) in Verbindung gebracht werden.

Eine wichtige Konsequenz des Pauli-blocking-Mechanismus ist die Zerstörung gebundener Zustände und der Übergang in eine Phase freier Teilchen (Quark-Plasma) bei genügend hoher Dichte /2,3/. Rechnungen für realistische Quark-Potentiale ergeben diesen Phasenübergang bei etwa der fünffachen Kerndichte /2/. So mit folgt, daß aus einem Quark-Potential-Modell, wenn es über einen größeren Dichtebereich konsequent untersucht wird, nicht nur Eigenschaften isolierter Hadronen und des Zwei-Hadronen-Systems, sondern auch der Phasenübergang zu einem neuen Zustand der Materie resultieren. Andererseits ergeben sich auch aus der Stabilität der hadronischen Phase Bedingungen für die konsistente Einführung des Quark-Potential-Modells.

#### Literatur

- /1/ Hendry, A.W., Lichtenberg, D.B.: Fortschr.Physik 33 (1985) 139
- /2/ Röpke, G., Blaschke, D., Schulz, H.: NBI preprint 85-38
- /3/ Blaschke, D., Reinholz, F., Röpke, G., Kremp, D.: Phys.Letters B151 (1985) 439
- /4/ Röpke, G., Schulz, H., Andronenko, L.N., Kotov, A.A., Neubert, W., Volnin, E.N.: Phys.Rev. C31 (1985) 1556
- /5/ Schulz, H., Röpke, G., Gudima, K.K., Toneev, V.D.: Dubna preprint E2-85-592 (1985); Phys.Rev.C in press
- /6/ Mahaux, C., Bortignon, P.F., Broglia, R.A., Dasso, C.H.: Phys.Reports 120 (1985) 1
- /7/ Röpke, G., Blaschke, D., Schulz, H.: NBI preprint 85-37
- /8/ Röpke, G., Blaschke, D., Schulz, H.: NBI preprint 85-38

#### Verfasser

Dipl.-Phys. D. Blaschke  
Doz. Dr. G. Röpke  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
Sektion Physik

DDR - 2500 Rostock  
Universitätsplatz 3

Zusammenstellung der in den Seminaren behandelten Aufgaben

G. RÖPKE

Aufgabe 1: Man bestimme die Zustandsgleichung für ein ideales Fermigas!

$$\begin{aligned} \text{Lösung: } n(\beta, \mu) &= N/\Omega = \sum_p \langle a_p^\dagger a_p \rangle / \Omega = \\ &= \sum_p \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) A(p, \omega) / \Omega = \sum_p f(E_p) / \Omega . \\ f(E) &= [\exp \beta(E - \mu) + 1]^{-1}, \quad A(p, \omega) = 2\pi \delta(\omega - E_p) . \end{aligned}$$

Aufgabe 2: Man berechne die dielektrische Funktion in der Näherung RPA!

$$\text{Lösung: } \epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{e^2}{\Omega \epsilon_0 q^2} \sum_p \frac{f(E_p) - f(E_{p+q})}{E_p + (\omega + i\epsilon) - E_{p+q}} .$$

Aufgabe 3: Man löse die Zwei-Teilchen-T-Matrix-Gleichung im s-Kanal  $t_1 = t_2 = t$ ,  $t'_1 = t'_2 = t'$  in Leiternäherung für zwei verschiedene Teilchen im Grenzfall kleiner Dichten, d.h. unter Vernachlässigung des "Pauli-Blockings"!

$$\begin{aligned} \text{Lösung: } T(p_1, p_2; p_1 - q, p_2 + q; z) &= V(q) + \sum_{\bar{q}} V(\bar{q})(z - E_{p_1 - \bar{q}} - E_{p_2 + \bar{q}})^{-1} \\ &\cdot T(p_1 - \bar{q}_1, p_2 + \bar{q}; p_1 - q, p_2 + q; z), \\ T(p_1, p_2; p_1 - q, p_2 + q; z) &= \sum_{n\bar{p}} (z - E_{p_1} - E_{p_2}) \frac{\Psi_{n\bar{p}}(B_B) \Psi_{n\bar{p}}(p_1 - q, p_2 + q)}{z - E_{n\bar{p}}} \\ &\cdot (E_{n\bar{p}} - E_{p_1 - q} - E_{p_2 + q}) \end{aligned}$$

$E_{n\bar{p}}$ ,  $\Psi_{n\bar{p}}$ : Lösungen der Schrödinger-Gleichung

$$(E_{p_1} + E_{p_2} - E_{n\bar{p}}) \Psi_{n\bar{p}}(p_1, p_2) + \sum_q V(q) \Psi_{n\bar{p}}(p_1 - q, p_2 + q) = 0$$

Aufgabe 4: Man berechne die Zwei-Teilchen-Green-Funktion im s-Kanal unter Verwendung der in Aufgabe 3 erhaltenen Ergebnisse!

$$\begin{aligned} \text{Lösung: } G_2(p_1, p_2; p_1 - q, p_2 + q; z) &= \frac{\delta_{q,0}}{z - E_{p_1} - E_{p_2}} + \sum_{n\bar{p}} \frac{\Psi_{n\bar{p}}(p_1, p_2) \Psi_{n\bar{p}}^*(p_1 - q, p_2 + q)}{z - E_{n\bar{p}}} \\ \cdot \frac{E_{n\bar{p}} - E_{p_1 - q} - E_{p_2 + q}}{z - E_{p_1 - q} - E_{p_2 + q}} &= \sum_{n\bar{p}} \Psi_{n\bar{p}}(p_1, p_2) \frac{1}{z - E_{n\bar{p}}} \Psi_{n\bar{p}}^*(p_1 - q, p_2 + q) \end{aligned}$$

Aufgabe 5: Man berechne die Zustandsgleichung unter Berücksichtigung von Bindungszuständen ausgehend von der Ein-Teilchen-Green-Funktion und der Näherung

$$\sum(p_1, z_y) = \frac{1}{z_{y, p_1} - \Omega_A} = \sum_{n \neq A} T(p_1, p_2; p_1, p_2; \Omega_A) \frac{1}{\Omega_A - z_y - E_{p_2}}$$

$$\text{Lösung: } A(p, \omega) = 2\pi \delta(\omega - E_{p_1} - \Delta(p_1)) + \sum_{n \neq A} |\Psi_{np}(p_1, p_2)|^2 \left\{ \delta(\omega - E_{p_1}) - \delta(\omega - E_{np} - E_{p_2}) \right\} [g_{ab}(E_{np}) + f(E_{p_2})]$$

$$\Delta(p_1) = \text{Re} \sum(p_1, z) |_{z=E_{p_1}} = \sum_{n \neq A} |\Psi_{np}(p_1, p_2)|^2 (E_{np} - E_{p_1} - E_{p_2}) g_{ab}(E_{np})$$

$$g_{ab}(E) = [\exp \beta (E - \mu_a - \mu_b) - 1]^{-1}$$

$$n(\beta, \mu) = \frac{1}{\Omega} \sum_{p_1} f(E_{p_1} - \Delta(p_1)) + \frac{1}{\Omega} \sum_{np} g_{ab}(E_{np})$$

Aufgabe 6: Man berechne die dielektrische Funktion  $\epsilon(q, \omega)$ , vgl. Aufgabe 2, unter Berücksichtigung von Bindungszuständen mit Hilfe der Näherung für die Polarisationsfunktion

$$\Pi(q, \omega_A) = \dots - \xrightarrow{\text{---}} + \xleftarrow{\text{---}} \quad , \quad \xrightarrow{\text{---}} = \xrightarrow{\text{---}} + \xrightarrow{\text{---}}$$

mit der T-Matrix aus Aufgabe 3!

$$\text{Lösung: } \epsilon(q, \omega) = 1 - \frac{e^2}{\Omega \epsilon_0 q^2} (\Pi^{RPA}(q, \omega) + \Pi^{atom}(q, \omega))$$

Beitrag der Atome zur Polarisationsfunktion:

$$\Pi^{atom}(q, \omega) = \sum_{n \neq A} \left| \sum_{p_1, p_2} \Psi_{np}(p_1, p_2) (\Psi_{np}^*(p_1 + q, p_2) - \Psi_{np}^*(p_1, p_2 + q)) \right|^2 \cdot \frac{g(E_{np}) - g(E_{np})}{E_{np} + (\omega + i\epsilon) - E_{np}}$$

Aufgabe 7: Man leite die Ziman-Formel für den elektrischen Widerstand eines Metalls infolge der Streuung der Elektronen an den Ionenpotentialen her!

$$\text{Lösung: } R = \frac{1}{G} = \frac{m^2 \Omega}{e^2 \beta} \frac{\langle \vec{P}; \vec{P} \rangle}{\langle P | P \rangle [ \langle P | P \rangle + \langle \vec{P}; \vec{P} \rangle ]}$$

$$\langle \vec{P}; \vec{P} \rangle = \frac{\Omega^2 m^2}{12 \pi^3 \hbar^3} \int_0^\infty dq q^3 |V_q|^2 f(E_{q/2}) ; \langle P | P \rangle = \frac{1}{\beta} m N ; \langle \vec{P}; \vec{P} \rangle \approx 0$$

Kraeft, Wolf-Dietrich; Kremp, Dietrich; Ebeling, Werner and  
Röpke, Gerd:  
Quantum Statistics of Charged Particle Systems, Akademie-  
Verlag, Berlin 1986

Aus dem Klappentext:

In dieser Publikation wird das Hauptinteresse auf nichtideale (stark gekoppelte) Plasmen gerichtet, d.h. auf Ladungsträgersysteme, in denen die Wechselwirkung eine wesentliche Rolle spielt. Neben dem theoretischen Interesse besitzt die Nichtidealität besondere Bedeutung für Gas- und Festkörperplasmen, für astrophysikalische Systeme und für technische Anwendungen wie Fusion.

Der erste Teil des Buches enthält eine Einführung in die Quantenstatistik mit spezieller Betonung der Coulomb-Systeme. Durchgehend wird die leistungsstarke Methode der Greenschen Funktionen benutzt. Beispiele für die Anwendung dieser Technik werden im Zusammenhang mit Ein- und Zwei-Teilchen-Eigenschaften sowie mit kollektiven Erscheinungen gegeben. Die Autoren stellen den Zusammenhang mit klassischen Theorien dar. Im weiteren geben sie die Gleichgewichte-, Transport- und optischen Eigenschaften mit konsequenter Anwendung der gegebenen statistischen Theorie für eine Vielzahl von physikalischen Situationen in Gasplasmen und Elektron-Loch-Plasmen in Halbleitern an. Eine Reihe der dargestellten Resultate ist neu und von Interesse für Physiker, die auf verschiedenen Gebieten tätig sind (Plasmaphysik, Festkörperphysik, Astrophysik).

Rostocker Physikalische Manuskripte bisher erschienen:

Heft 1: Physik und Gesellschaftswissenschaften (dieses Heft  
dieser Reihe ist unnumiert erschienen) 1977

Heft 2: Stochastische Theorie der nichtlinearen irreversiblen  
Prozesse 1977

Heft 3: Physik und Gesellschaftswissenschaften, Teil I 1978

Heft 3: Physik und Gesellschaftswissenschaften, Teil II 1978

Heft 4: Theorie elektrolytischer Flüssigkeiten 1979

Heft 5:  $\text{SiO}_2$  - Herstellung, Struktur, Eigenschaften, Teil I  
1979

Heft 5:  $\text{SiO}_2$  - Herstellung, Struktur, Eigenschaften, Teil II  
1979

Heft 5:  $\text{SiO}_2$  - Herstellung, Struktur, Eigenschaften, Teil III  
1979

Heft 6: Die Rostocker Elektrolyt-Datenbank SAFE 1983

Heft 7: Strukturuntersuchungen an nichtkristallinen und  
partiellkristallinen Stoffen 1985

Heft 8: Nonlinear Irreversible Processes and Phase Transitions  
1985

#### Bezugsmöglichkeiten

Die Hefte der Schriftenreihe sind im Rahmen des Schriften-  
tauschs über die Universitätsbibliothek der Wilhelm-Pieck-  
Universität Rostock, Tauschstelle, Universitätsplatz 5,  
Rostock, DDR - 2500, zu beziehen.

Es bestehen beschränkte Bezugsmöglichkeiten für

- Bestellungen aus der DDR über die Abt. Wissenschafts-  
publizistik der Wilhelm-Pieck-Universität Rostock, Vogel-  
sang 13/14, Rostock, DDR - 2500,
- Bestellungen aus dem Ausland über die Firma Buchexport,  
Volkseigener Außenhandelsbetrieb der DDR, Leninstr. 16,  
Leipzig, DDR - 7010.



C1 B1 A1 C2 B2 A2 B5 A5 20 18 17 16 11

Print Reference numbers on UUT  
Image Engineering San Reference: TES3 Serial No.

the scale towards document

sche Manuskripte, Heft 9 (1986)

-Greensche Funktionen und kinetische

genden Arbeit ist die Bereitstellung eines  
ntgleichgewichts-Beschreibung von Vielteil-  
le Ableitung von kinetischen Gleichungen auf  
ungen gestattet, wie sie aus der Behandlung  
hermodynamischen Gleichgewicht bzw. bei  
Ind. Das Vorgehen wird am Modell des Elek-  
riert, ist aber für beliebige Systeme durch-  
onoperator lautet

$$\Psi_{\text{ext}}(t), \quad (1)$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta) \Psi(t), \quad (2)$$

$$i \Psi^+(t) \Psi^+(t') v(t-t') \Psi(t') \Psi(t) \quad (3)$$

$$\Psi_{\text{ext}}(t, t') \int d^3 k' v(t-t') e \Psi^+(t') \Psi(t') \quad (4)$$

räten der Elektronen, von deren Spinabhän-  
Vereinfachung absehen. Desgleichen soll  
kter der Coulomb-Wechselwirkung, also  $v(t) =$   
das Problem der Abschirmung nicht betrach-

wird durch extern kontrollierte Ladungen ge-  
durch Anfangsbedingungen - produziert, und  
ns für die zeitliche Entwicklung des Systems  
ieser mechanischen Störung. Da in diesem  
on bestimmten Anfangsbedingungen, speziell  
ebenfalls nicht interessiert, wird der An-  
 $t_0 \rightarrow -\infty$  gewählt und der statistische Ope-  
als unkorreliert angesetzt.

en jetzt kausale Greensche Funktionen (GF)  
oren im Heisenbergbild definieren und nach