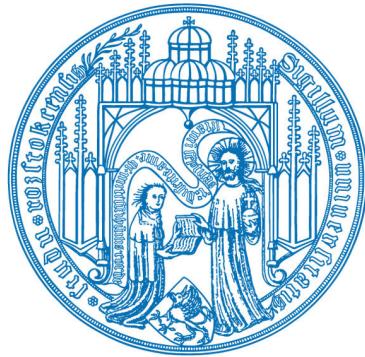

Quantenstatistische Analyse der Korrelationen dichter Plasmasysteme

Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Rostock



vorgelegt von
Sebastian Rosmej, geb. am 22.05.1991 in Güstrow
aus Rostock
Rostock, 22.02.2018

1. Gutachter: Priv.-Doz. Dr. Heidi Reinholz, Universität Rostock
 2. Gutachter: Prof. Dr. August Wierling, Western Norway University of Applied Sciences
- Tag der Verteidigung: 25.04.2018

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	1
1.1 Einführung in das Thema der Arbeit	1
1.2 Gliederung der Arbeit	4
2. Quantenstatistische Beschreibung von Transportphänomenen	5
2.1 Beschreibung des Nichtgleichgewichts durch den Zubarev-Formalismus	7
2.2 Thermoelektrische Störungen und Berechnung der Onsager-Koeffizienten	10
2.2.1 Berechnung der Onsager-Koeffizienten in der Kubo-Theorie	11
2.2.2 Berechnung der Onsager-Koeffizienten aus Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen	12
3. Auswertung der Korrelationsfunktionen	13
3.1 Strom-Strom Korrelationsfunktionen	14
3.2 Strom-Kraft Korrelationsfunktionen	16
3.3 Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen	17
3.4 Analyse der Elektron-Ion Korrelationsfunktionen	22
3.4.1 Born'sche Näherung	22
3.4.2 Dynamische Abschirmeffekte in Random-Phase-Approximation	29
3.4.3 Einfluss starker Stöße in der T-Matrix Näherung	33
3.4.4 T-Matrix Effekte für beliebige Entartung des Elektronensystems	35
3.5 Analyse der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen	36
3.5.1 Born'sche Näherung	36
3.5.2 Dynamische Abschirmeffekte in Random-Phase-Approximation	40
3.5.3 Einfluss starker Stöße in der T-Matrix Näherung	43
4. Transporteigenschaften vollständig ionisierter Plasmen	49
4.1 Streuquerschnitte der Elektron-Ion und Elektron-Elektron Stöße	50
4.1.1 Born'sche Näherung	50
4.1.2 Klassische Streutheorie	51
4.1.3 Wentzel-Kramers-Brillouin Methode (WKB Näherung)	53
4.1.4 Fitformeln und Vergleich mit numerischen Daten	56
4.2 Einfluss der Elektron-Elektron-Stöße auf Transporteigenschaften vollständig ionisierter Plasmen	60
4.2.1 Der Einfluss höherer Momente	61
4.2.2 Das Konzept der Renormierungsfunktion und der Korrekturfaktor für die elektrische Leitfähigkeit	65
4.2.3 Modellrechnungen für die Leitfähigkeit vollständig ionisierten Wasserstoffs	70

4.3 Leitfähigkeit realer Systeme I: Warmes dichtes Aluminium	72
4.3.1 Berücksichtigung des Strukturfaktors	73
4.3.2 Verwendung von Pseudopotentialen	75
4.3.3 Ergebnisse für die elektrische Leitfähigkeit	76
5. Transporteigenschaften partiell ionisierter Plasmen	79
5.1 Das optische Potential im Plasmasystem	80
5.1.1 Das optische Potential für das isolierte System	80
5.1.2 Das Austauschpotential in Lokalfeldnäherung	81
5.1.3 Elektron-Atom Transportquerschnitt im isolierten System	84
5.1.4 Berücksichtigung von Plasmaeffekten	86
5.2 Analyse der Elektron-Atom Korrelationsfunktionen	90
5.3 Leitfähigkeit realer Systeme II: Edelgasplasmen	93
5.3.1 Vergleich mit experimentellen Daten	93
5.3.2 Fitformeln für die Leitfähigkeit von Helium und Neon	95
5.3.3 Zusammensetzung dichten Kryptons	97
6. Zusammenfassung und Ausblick	99

Anhang	103
---------------	------------

1. EINLEITUNG

1.1 Einführung in das Thema der Arbeit

Die Vielteilchentheorie stellt ein eigenständiges und zentrales Gebiet der Physik dar. Vor über 30 Jahren wurde in Rostock ein wesentlicher Beitrag zur Entwicklung eines neuen quantenstatistischen Zugangs, der Linearen-Response Theorie (LRT), zur Beschreibung von Vielteilchensystemen geleistet. Seither findet sie bei der Bestimmung von optischen sowie Transporteigenschaften dichter Plasmen Anwendung [Gü96, Red97, Rei05]. Diese Arbeit führt dieses Projekt fort. Neue Erkenntnisse und Ergebnisse zu Transporteigenschaften nichtidealener Plasmasyteme werden vorgestellt.

Eine zentrale Eigenschaft von Vielteilchensystemen ist die elektrische Leitfähigkeit. Als frequenzabhängige Größe ist sie mit der dielektrischen Funktion verbunden und führt auf optische Eigenschaften wie Reflexionsvermögen und Absorption. Im statischen Grenzfall reiht sie sich zu den thermoelektrischen Transportgrößen Thermokraft und Wärmeleitfähigkeit ein. Die elektrische Leitfähigkeit ist sowohl im alltäglichen Leben, in der Fusionstechnologie als auch für die Beschreibung astrophysikalischer Objekte von großer Bedeutung. Zum Beispiel lässt sich das Magnetfeld des Jupiters durch eine starke elektrische Leitfähigkeit erklären. Und das obwohl sein Hauptbestandteil Wasserstoff unter Standardbedingungen (molekularer Wasserstoff) ein Isolator ist. Im Jupiter ist der Wasserstoff jedoch hohen Drücken ausgesetzt, es kommt zur Druckionisation (Mott-Effekt). Das System besitzt nun eine hohe Dichte freier Elektronen n_e , die den Strom leiten. Es sind also die konkreten Bedingungen (Massendichte ρ und Temperatur T), die die (Transport-)Eigenschaften von Materie beeinflussen.

In der vorliegenden Arbeit werden Plasmasyteme in einem weiten Dichte- und Temperaturbereich untersucht. Charakteristische Größen sind dabei der Kopplungsparameter

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4\pi}{3} n_e \right)^{1/3}, \quad (1.1)$$

der als Verhältnis zwischen der mittleren potentiellen Energie und der thermischen Energie $\beta^{-1} = k_B T$ definiert wird; sowie der Entartungsparameter

$$\Theta = \frac{2m}{\beta\hbar^2} \left(3\pi^2 n_e \right)^{-2/3}, \quad (1.2)$$

der das Verhältnis aus thermischer Energie und Fermienergie angibt. Der Kopplungsparameter ist somit ein Maß für die Stärke der Korrelationen im Plasma (Nichtidealität bei $\Gamma \gtrsim 1$). Der Entartungsparameter weist darauf hin, ob die Elektronenverteilung klassisch behandelt werden kann ($\Theta \gtrsim 1$) oder ob Quanteneffekte berücksichtigt werden müssen ($\Theta \lesssim 1$).

Eine Reihe von natürlich auftretenden und künstlich erzeugten Plasmen ist in Abb. 1.1 dargestellt. Von besonderem Interesse in der Plasmaphysik ist aktuell die Erforschung der warmen dichten Materie (WDM). Warne dichte Materie besitzt Temperaturen von einigen Elektronenvolt bei Festkörperdichte und stellt damit einen Übergangsbereich zwischen kondensierter Materie und Hochtemperaturplasmen dar. Die WDM ist ein nichtideales Plasma,

bei dem Quanteneffekte relevant sind. Zum Beispiel befindet sich der Kern des Jupiters im Zustand der warmen dichten Materie.

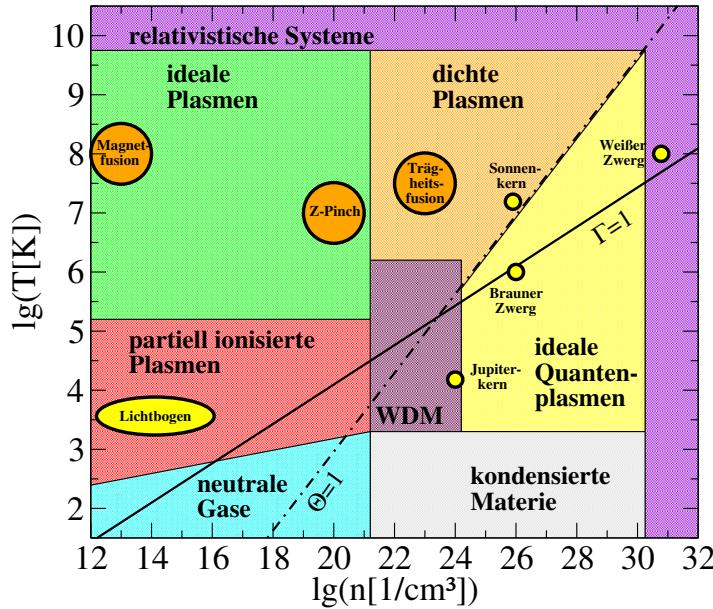


Abb. 1.1: Eine Auswahl verschiedener natürlicher und künstlich erzeugter Plasmen in der Dichte-Temperatur-Ebene.

Die Beschreibung nichtidealier Plasmasysteme ist durch den Zugang der Linearen-Response Theorie in der Formulierung nach Zubarev möglich. Diese Formulierung ist von vornherein für beliebige Dichten und Temperaturen gültig. Analytische Formeln der kinetischen Theorie von Spitzer und Ziman werden reproduziert [MR82]. Diese Formeln sind als Grenzfälle auf das *vollständig ionisierte* Plasma anwendbar. Vollständig ionisiert bedeutet in diesem Zusammenhang, dass es keine Bindungszustände gibt. Es wird ein (neutrales) Elektron-Ion Plasma betrachtet, bei dem es eine Ionensorte i mit der Ladungszahl Z und freie Elektronen e gibt. Es gilt $n_e = Z n_i$. In realen Systemen liegen Bindungszustände zwischen Elektronen und Ionen vor. Im chemischen Bild werden diese Bindungszustände zu neuen Sorten (Ionen niedrigerer Ionisationsstufe oder Atome) gruppiert. Das Plasma ist dann *partiell ionisiert*. Die Teilchendichte einer bestimmten Sorte wird durch $n_{i(z)}$ symbolisiert, wobei z die Ionisationsstufe angibt ($n_{i(0)} = n_a$ ist die Atomdichte, $n_{i(1)}$ ist die Dichte der einfach ionisierten Teilchen, usw.). Die Summe aus den Teilchendichten der Ionen und Atome wird als schwere Teilchendichte $n_{\text{heavy}} = \sum_z n_{i(z)}$ bezeichnet. Das partiell ionisierte Plasma wird dann durch den Ionisationsgrad $\alpha_{\text{ion}} = n_e / n_{\text{heavy}}$ charakterisiert. Die Einbeziehung von Atomen ist im Rahmen der Linearen-Response Theorie problemlos möglich. In vergangenen Arbeiten von Redmer und Kuhlbrodt [Red99, KR00] war es durch Kombination der Linearen-Response Theorie mit dem chemischen Bild (PIP-Modell) möglich, die Leitfähigkeitsmessungen von Metallplasmen aus Drahtverdampfungsexperimenten [DK98] zu beschreiben. Sehr gute Ergebnisse wurden auch durch die Kopplung der Dichtefunktionaltheorie mit klassischen Molekulardynamik (DFT-MD) Simulationen erzielt [DKC02]. Gegenwärtig fordern neue experimentelle Methoden die Theorie heraus, Eigenschaften warmer dichter Materie zu verstehen. So wurde in [SGL⁺15] Aluminium im WDM Bereich durch Laserbeschuss erzeugt, und das Thompson-Streuspektrum gemessen. Aus diesem Spektrum wurde die elektrische Leitfähigkeit extrahiert.

In dieser Arbeit gelingt es Vorhersagen für den Verlauf der Leitfähigkeit im Bereich der WDM zu treffen.

Der Ursprung dieser Arbeit liegt in der noch immer stark diskutierten Frage nach dem Einfluss der Elektron-Elektron-Stöße auf die elektrische Leitfähigkeit. Spitzer und Härm [SH53] gelang es erstmals, den Effekt der Elektron-Elektron Stöße idealer Plasmen quantitativ zu bestimmen. Die sogenannte Spitzer-Formel wird bis heute in Fachkreisen als gültiger Niederdichtegrenzfall akzeptiert. Demgegenüber steht die sogenannte Ziman-Formel [Zim61, Fab72], die aufgrund der Impulserhaltung Elektron-Elektron Stöße vernachlässigt, dennoch die Leitfähigkeit flüssiger Metalle und Elektron-Ion Plasmen in weißen Zwergen hervorragend beschreibt. Über die Lineare-Response Theorie wurde explizit der Beitrag der Elektron-Elektron Stöße von Reinholtz *et al.* [RRRR15] in Form eines Korrekturfaktors in Born'scher Näherung für ein statisch abgeschirmtes Coulomb-Potential (Debye-Potential) herausgearbeitet. Im Bereich nichtidealener Plasmen ist die Gültigkeit der Born'schen Näherung zu hinterfragen. In der vorliegenden Arbeit wird überprüft, wie sich Effekte der dynamischen Abschirmung und der starken Stöße auf den Korrekturfaktor auswirken.

Separat wird die Relevanz der dynamischen Abschirmung beispielsweise von Karakhtanov *et al.* [KRRR13, Kar16] untersucht, wohingegen in anderen Arbeiten die Wichtigkeit der starken Stöße betont werden [MR82, RR89, Red97]. Eine konsistente Verbindung beider Erweiterungen etwa durch eine dynamisch abgeschirmte T-Matrix Rechnung stehen noch aus. Allerdings gibt es Konzepte, die eine bestmögliche Verbindung zwischen T-Matrix und dynamischer Abschirmung versprechen. Zum Einen das Gould-DeWitt Verfahren [Hub61, GD67], bei dem der niedrigste Term der statischen T-Matrix, die Born'sche Näherung, durch ihr dynamisches Pendant ersetzt wird. Streng genommen muss man dabei allerdings mit Coulomb-Potentialen arbeiten. Aufgrund deren Langreichweite divergieren diese Terme. Bei der praktischen Anwendung des Gould-DeWitt Verfahrens werden daher statisch abgeschirmte Potentiale benutzt [Rei05]. Allerdings wirft das wiederum die Frage auf, von welchem statisch abgeschirmten Potential auszugehen ist. Alternativ hierzu ist das Konzept der effektiven Abschirmung. Hierbei wird das dynamisch abgeschirmte Coulomb-Potential durch ein effektives statisches Potential ersetzt. Der Abschirmparameeter wird derart modifiziert, dass er in Born'scher Näherung die Ergebnisse bei dynamischer Abschirmung reproduziert. Mit diesem effektiven statischen Potential wird die T-Matrix Rechnung durchgeführt. Allerdings wird häufig nur der Niederdichtegrenzfall verglichen und der Abschirmparameeter mit diesem konstanten Faktor multipliziert [RR89, Red97]. Demgegenüber wird in dieser Arbeit der Abschirmfaktor dichte- und temperaturabhängig eingeführt, sodass er auch mit dem Gould-DeWitt Schema übereinstimmt. Durch diese Verbindung von dynamischer Abschirmung und T-Matrix werden in dieser Arbeit verbesserte Berechnungen zum Korrekturfaktor durchgeführt, für welchen eine neue Fitformel angegeben wird.

Ein weiteres Ziel dieser Arbeit ist die fundierte Beschreibung der partiell ionisierten Edelgasplasmen. Leitfähigkeitsmessungen aus Schockwellenexperimenten konnten für die Edelgase bislang nicht durch die Theorie vollständig beschrieben werden. Das PIP-Modell von Kuhlbordt *et al.* [KRR⁺05] liefert Abweichungen von bis zu zwei Größenordnungen. Von Adams *et al.* [ARR⁺07] wurde die Ursache der großen Unterschiede herausgearbeitet. Während im nichtentarteten Bereich die Zusammensetzung gut bekannt ist, bestehen wesentliche Schwierigkeiten in der Beschreibung des Elektron-Atom Streuprozesses. Das bis dato verwendete Polarisationspotential ist nicht geeignet. Der für die Transportgrößen wichtige und im Fall der Edelgase experimentell zugängliche Transportquerschnitt lässt sich weder quantitativ noch qualitativ durch das Polarisationspotential beschreiben [ARR⁺07]. In den Experimenten wur-

den allerdings nur isolierte Elektron-Atom Stöße untersucht, eine Übertragung auf Stöße im Plasma ist nicht trivial. Welchen Einfluss die Abschirmung hat und wann sie relevant ist, sind Fragestellungen, die in dieser Arbeit untersucht werden.

Die Berücksichtigung von Plasmaeffekten erfordert die Kenntnis des Elektron-Atom Wechselwirkungspotentials. In der Atomphysik werden Wechselwirkungen zwischen geladenen Teilchen und Atomen durch das sogenannte optische Potential beschrieben. Es vereinigt das über große Distanzen wirkende Polarisationspotential mit dem auf kurzen Distanzen wirkenden Hartree-Fock Potential, welches wiederum eine Superposition des attraktiven Elektron-Kern und des repulsiven Elektron-Hülle Coulombpotentials ist. Austauschterme werden durch lokale Felder approximiert. Das optische Potential wird erfolgreich für die Beschreibung der Elektron-Atom Stöße bei Edelgasen verwendet [AT05], findet darüber hinaus auch bei anderen Elementklassen [PS89] und sogar bei Elektron-Molekül Stößen [SG82] Anwendung. In dieser Arbeit sind die partiell ionisierten Edelgasplasmen von Interesse. Für die Beschreibung der Elektron-Atom Stöße verwenden Adibzahdeh und Theodosiou [AT05] für die Edelgase jeweils unterschiedliche Modelle des Austauschterms. Außerdem wurden für das Polarisationspotential mehrere Fit-Parameter benötigt, um Übereinstimmungen mit experimentell bestimmten Transportquerschnitten zu erzielen. In dieser Arbeit wird ein optisches Potential mit einheitlicher Form des Austauschterms konstruiert, welches mit nur einem Fit-Parameter im Polarisationspotential die Transportquerschnitte ähnlich gut beschreibt. Unter Berücksichtigung von Abschirmeffekten werden neue Leitfähigkeitsberechnungen durchgeführt, die sich für weiterführende Vergleiche mit den Experimenten bei höheren Dichten eignen.

1.2 Gliederung der Arbeit

Eingangs wurden neue Fragestellungen aufgegriffen, die in dieser Arbeit beantwortet werden. In Kapitel 2 werden thermoelektrische Transportphänomene definiert. Fundamentale Zusammenhänge zwischen Transportgrößen und Korrelationen im Vielteilchensystem werden unter Verwendung der Linearen-Response Theorie im Zubarev-Formalismus vorgestellt. Um Transportgrößen letztendlich berechnen zu können, werden die auftretenden Korrelationsfunktionen in Kapitel 3 ausgewertet. Geschlossene Resultate werden in verschiedenen Näherungen angegeben. Die Born'sche Näherung führt zu recht einfachen Resultaten. Erweiterungen durch die dynamische Abschirmung sowie die Einbeziehung von starken Stößen durch die T-Matrix werden eingeführt und neue Ergebnisse vorgestellt.

In Kapitel 4 werden die Ergebnisse auf Fragestellungen des vollständig ionisierten Plasmas angewandt. Zum Einen wird der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf die elektrische Leitfähigkeit explizit analysiert. Zum Anderen wird durch Einbeziehung von Strukturfaktor und Pseudopotential warmes dichtes Aluminium beschrieben.

Die Transporteigenschaften partiell ionisierter Edelgasplasmen werden in Kapitel 5 berechnet. Dabei wird insbesondere der Streuprozess analysiert und die Elektron-Atom Wechselwirkung basierend auf Resultaten der Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung bestimmt. Neben den Vergleichen der elektrischen Leitfähigkeit mit den Messungen aus Schockwellenexperimenten, werden Abschirmeffekte und Betrachtungen zu möglichen Vereinfachungen durchgeführt.

Abschließend werden in Kapitel 6 die Ergebnisse zusammengefasst und ein Ausblick gegeben. Die verwendeten Größen werden stets bei erstmaligem Auftreten erklärt. Zur vereinfachten Handhabung werden sie jedoch im Anhang aufgelistet.

2. QUANTENSTATISTISCHE BESCHREIBUNG VON TRANSPORTPHÄNOMENEN

Ausgehend von einem System im thermodynamischen Gleichgewicht erzwingen Störungen beispielsweise durch äußere Felder Reaktionen des Systems, z.B. Ströme. Abhängig von der Art und der Stärke der Störung fällt die *Antwort* (Response) des Systems aus. Im Fall einer kleinen Störung \mathbf{X} verhält sich die Response \mathbf{j}_X proportional zu ihr (Lineare Response). Der Proportionalitätsfaktor ist dann eine das System charakterisierende Eigenschaft und phänomenologisch gegeben durch die Onsager-Koeffizienten $c(0)$

$$\mathbf{j}_X = c(\mathbf{X})\mathbf{X} = c(0)\mathbf{X} + \mathcal{O}(\mathbf{X}^2). \quad (2.1)$$

Darüberhinaus werden auch Kreuzeffekte beschrieben. Betrachtet man beispielsweise ein konstantes elektrisches Feld und einen konstanten Temperaturgradienten als äußere Störungen, verursacht das elektrische Feld einen elektrischen Strom, dessen Ladungsträger aber auch Wärme transportieren, und ebenso der Temperaturgradient einen Wärmestrom, der durch bewegte Ladungen zum elektrischen Strom beiträgt. In dieser Arbeit wird der themoelektrische Transport untersucht. Für den Fall (schwacher) äußerer Störungen durch ein elektrisches Feld \mathbf{E} und einen Temperaturgradienten ∇T lauten die Onsager-Relationen [Ons31]

$$\mathbf{j}_e = e^2 L_{11} \mathbf{E} + e L_{12} \frac{(-\nabla T)}{T}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{j}_q = e L_{21} \mathbf{E} + L_{22} \frac{(-\nabla T)}{T}, \quad (2.3)$$

wobei die nebendiagonalen Onsager-Koeffizienten gleich sind, $L_{12} = L_{21}$.

Die elektrische Leitfähigkeit σ ist definiert als der Proportionalitätsfaktor zwischen der elektrischen Stromdichte \mathbf{j} und dem elektrischen Feld \mathbf{E} . Es gilt

$$\sigma = e^2 L_{11}. \quad (2.4)$$

Sie beschreibt die lineare Response des elektrischen Stromes auf die Störung eines äußeren angelegten elektrischen Feld.

Analog wird die Wärmeleitfähigkeit κ eingeführt, als lineare Response des Wärmestroms auf die Störung eines Temperaturgradienten

$$\kappa = \frac{L_{22}}{T}. \quad (2.5)$$

Ein elektrisches Feld ist in dieser Definition nicht vorhanden $\mathbf{E} = \mathbf{0}$. Allerdings führt ein Temperaturgradient auch zu einem elektrischen Strom $\mathbf{j}_e \neq \mathbf{0}$. Ein typisches Experiment wird

hingegen bei $\mathbf{j}_e = \mathbf{0}$ durchgeführt. Gemessen wird also nicht die originale Wärmeleitfähigkeit κ sondern eine modifizierte Wärmeleitfähigkeit λ

$$\lambda = \frac{1}{T} \left(L_{22} - \frac{L_{12}^2}{L_{11}} \right). \quad (2.6)$$

Wie bereits erwähnt, enthalten die Onsager-Relationen auch Kreuzeffekte, wie beispielsweise den Seebeck-Effekt. Betrachtet man ein offenen Stromkreis $\mathbf{j}_e = \mathbf{0}$ führt ein Temperaturgradient (Störung), entsprechend Gl. (2.2), zu einem elektrischen Feld \mathbf{E} (Response). Der Proportionalitätsfaktor wird als Thermokraft definiert

$$\alpha = \frac{1}{eT} \frac{L_{12}}{L_{11}}. \quad (2.7)$$

Der Seebeck-Effekt wird bei der Temperaturmessung durch Thermoelemente ausgenutzt.

Ein weiterer Kreuzeffekt ist der Peltier-Effekt. Liegt kein Temperaturgradient an $\nabla T = \mathbf{0}$ führt dennoch ein elektrischer Strom zu einem Wärmestrom. Aus den Onsager-Relationen Gln. (2.2), (2.3) wird die lineare Reponse durch den Peltier-Koeffizient Π beschrieben

$$\Pi = \frac{1}{e} \frac{L_{12}}{L_{11}}. \quad (2.8)$$

Bringt man beispielsweise zwei Halbleiter mit verschiedenen Peltier-Koeffizienten zusammen (Peltier-Element) führt ein konstanter Strom zu unterschiedlich starken Wärmeströme. Das Peltier-Element kann somit zum Erwärmen oder Abkühlen genutzt werden.

Betrachtet man zeitabhängige Störungen, beispielsweise ein elektrisches Wechselfeld als äußere Störung, ist die Leitfähigkeit frequenzabhängig.

Die dynamische Leitfähigkeit ist mit der dielektrischen Funktion verknüpft [KKER86]

$$\epsilon(\omega) = 1 + \frac{i}{\epsilon_0 \omega} \sigma(\omega), \quad (2.9)$$

und führt als Quadrat des komplexen Brechungsindex $\epsilon(\omega) = [n_1(\omega) + i n_2(\omega)]^2$ auf eine Reihe optischer Eigenschaften des Vielteilchensystems wie beispielsweise das Reflexionsvermögen [Bor72]

$$R = \frac{[1 - n_1(\omega)]^2 + n_2^2(\omega)}{[1 + n_1(\omega)]^2 + n_2^2(\omega)}, \quad (2.10)$$

und den Absorptionskoeffizienten

$$\alpha(\omega) = \frac{2\omega n_2(\omega)}{c}. \quad (2.11)$$

In diesem Kapitel wird der quantenstatistische Zugang zur Bestimmung der Onsager-Koeffizienten vorgestellt. Es wird ein durch schwache Störungen entstehendes System im Nichtgleichgewicht nahe dem thermodynamischen Gleichgewicht betrachtet. Die quantenstatistische Beschreibung des Nichtgleichgewichts wird in Abs. 2.1 vorgenommen. Dabei wird im Zubarev-Formalismus die Lineare-Response Theorie vorgestellt. Sie ist für beliebige Dichten und Temperaturen gültig und enthält sowohl klassisch bekannte Grenzfälle der kinetischen Theorie wie auch Entartungseffekte. Eine verallgemeinerte linearisierte Boltzmann-Gleichung wird abgeleitet. Anschließend werden in Abs. 2.2 die Onsager-Koeffizienten durch Korrelationsfunktionen im thermodynamischen Gleichgewicht ausgedrückt.

2.1 Beschreibung des Nichtgleichgewichts durch den Zubarev-Formalismus

In der statistischen Physik von Vielteilchensystemen werden anstelle von mikroskopischen Eigenschaften vieler Teilchen makroskopische Eigenschaften des Ensembles untersucht. Diese makroskopischen Eigenschaften werden aus Mittelwertbildungen der Observablen gewonnen. Betrachtet man beispielsweise ein einatomiges ideales Gas, so ist die (makroskopische) Temperatur T , als Maß für die mittlere (ungerichtete oder *zufällige*) kinetischen Energie $\frac{3}{2}k_B T = \frac{m}{2}\langle v^2 \rangle$, anstelle der zahlreichen mikroskopischen Einzelgeschwindigkeiten v_i von Interesse. Um makroskopische Größen ausrechnen zu können, muss nicht zwangsläufig jedes Einzelereignis beobachtet werden. Es genügt, wenn die Wahrscheinlichkeitsverteilung dieser Einzelereignisse bekannt ist.

In der Quantenstatistik wird die Verteilung durch den statistischen Operator

$$\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| . \quad (2.12)$$

beschrieben. Er enthält alle für das System relevanten Informationen, indem er die Mikrozustände $|\Psi_i\rangle$ mit Wahrscheinlichkeiten p_i gewichtet, wobei die Normierung $\text{Sp}\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i = 1$ zu jeder Zeit stets erfüllt sein muss.

Der Mittelwert einer Observablen $A(t)$ zum zugehörigen Operator \hat{A} wird durch Spurbildung mit dem statistischen Operator $\hat{\rho}(t)$ erhalten:

$$\langle A(t) \rangle = \text{Sp} \{ \hat{A} \hat{\rho}(t) \} = \text{Sp} \{ \hat{\rho}(t) \hat{A} \} . \quad (2.13)$$

Ein bedeutendes Beispiel in der Thermodynamik ist die Entropie $S = -k_B \text{Sp} \{ \hat{\rho}(t) \ln \hat{\rho}(t) \}$, welche im Gleichgewicht maximal ist (maximale Unbestimmtheit).

Für ein offenes System sind Energie- und Teilchenaustausch möglich. Die innere Energie $U = \text{Sp} \{ \hat{H}_S \hat{\rho}(t) \}$ und die Teilchenzahl $N = \text{Sp} \{ \hat{N} \hat{\rho}(t) \}$ beschreiben die makroskopischen Nebenbedingungen. Über eine Variationsrechnung folgt der statistische Operator des großkanonischen Ensembles (Gleichgewicht, eine Sorte)

$$\hat{\rho}_{\text{GK}} = \frac{1}{Z_{\text{GK}}} e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N})} , \quad Z_{\text{GK}} = \text{Sp} \{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \} , \quad (2.14)$$

mit der großkanonischen Zustandssumme Z_{GK} , dem Hamiltonian des Systems \hat{H}_S und der Teilchenzahl \hat{N} . Bei einer Übertragung auf mehrere Sorten $\mu \hat{N} \rightarrow \sum_c \mu_c \hat{N}_c$ sind Hamiltonian und Teilchenzahlen gegeben durch

$$\hat{H}_S = \sum_{c,k} E_k^c \hat{a}_{k,c}^+ \hat{a}_{k,c} + \frac{1}{2} \sum_{c,c',k,k',q} V^{cc'}(\mathbf{q}) \hat{a}_{k+q,c}^+ \hat{a}_{k'-q,c'}^+ \hat{a}_{k',c'} \hat{a}_{k,c} , \quad E_k^c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} , \quad (2.15)$$

$$\mu \hat{N} \rightarrow \sum_c \mu_c \hat{N}_c = \sum_{c,k} \mu_c \hat{a}_{k,c}^+ \hat{a}_{k,c} , \quad (2.16)$$

wobei die Summation über $k = \{\mathbf{k}, \varsigma\}$ entsprechend die Impuls- und Spinsummation enthält. Im Folgenden wird der statistische Operator des großkanonischen Ensembles als statistischer Operator des Gleichgewichts $\hat{\rho}_0 \equiv \hat{\rho}_{\text{GK}}$ bezeichnet. Er löst die Bewegungsgleichung der Quantenstatistik, die von-Neumann Gleichung,

$$\frac{d\hat{\rho}_0}{dt} = \frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_0] = 0 , \quad (2.17)$$

wobei im Gleichgewicht der Gesamt-Hamiltonian dem des Systems entspricht $\hat{H} = \hat{H}_S$.

Um Systeme im Nichtgleichgewicht beschreiben zu können, wird der statistischen Operator für das Nichtgleichgewicht konstruiert. Dabei wird zunächst ein sogenannter relevanter statistischer Operator $\hat{\rho}_{\text{rel}}$ eingeführt. Dieser enthält alle Informationen über die das System charakterisierenden relevanten Observablen B . Daher gilt:

$$\langle B(t) \rangle = \text{Sp} \left\{ \hat{B} \hat{\rho}(t) \right\} = \text{Sp} \left\{ \hat{B} \hat{\rho}_{\text{rel}}(t) \right\}. \quad (2.18)$$

Über eine Variationsrechnung analog zur Gleichgewichtsstatistik besitzt der relevante statistische Operator ebenfalls die Form einer verallgemeinerten Gibbs-Verteilung:

$$\hat{\rho}_{\text{rel}} = \frac{1}{Z_{\text{rel}}} e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N} - \sum_n F_n(t) \hat{B}_n)}. \quad (2.19)$$

$Z_{\text{rel}} = \text{Sp} \left\{ e^{-\beta(\hat{H}_S - \mu \hat{N} - \sum_n F_n(t) \hat{B}_n)} \right\}$ ist die entsprechende Zustandssumme und $\{B_n\}$ ist ein Satz von relevanten Observablen. Die zeitabhängigen Lagrange-Multiplikatoren $F_n(t)$ sind aus Nebenbedingungen zu berechnen. Bei Kenntnis von $\rho(t)$ folgen sie aus der Lösung eines inhomogenen Gleichungssystems des irrelevanten statistischen Operators $\hat{\rho}_{\text{irrel}}(t) = \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}_{\text{rel}}(t)$ mit $\text{Sp} \left\{ \hat{B}_n \hat{\rho}_{\text{irrel}}(t) \right\} = 0$.

Der statistische Operator des Nichtgleichgewichts lässt sich als formale Lösung der von-Neumann Gleichung Gl. (2.17) schreiben:

$$\hat{\rho}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{\rho}(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}. \quad (2.20)$$

Hierbei setzt sich der Hamiltonian aus dem System und den Störungen äußerer Felder zusammen $\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_F$. Derartige Störungen, beispielsweise durch ein extern angelegtes elektrisches Feld \mathbf{E} , werden als *mechanische Störungen* bezeichnet, siehe auch [Rö13]. Sie sind von den *thermischen Störungen*, basierend auf den Kontakt mit Bädern, z.B. dem Temperaturgradienten zu unterscheiden. Nach Bogoliubov [Bog46] erhält man $\hat{\rho}(t)$ durch das Prinzip der Abschwächung der Anfangskorrelation:

$$\hat{\rho}(t) = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{\rho}_{\text{rel}}(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}. \quad (2.21)$$

Die dynamische Entwicklung erzeugt Korrelationen (irrelevanter Anteil von $\hat{\rho}(t)$). Die Mittlung über alle Anfangszeiten $t_0 < t$ führt auf

$$\hat{\rho}(t) = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t dt_1 e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_1)} \hat{\rho}_{\text{rel}}(t_1) e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_1)}, \quad (2.22)$$

und ist nach dem Abel'schen Theorem [ZMR96] äquivalent zu

$$\hat{\rho}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t')} \hat{\rho}_{\text{rel}}(t') e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t')} \quad (2.23)$$

$$= \hat{\rho}_{\text{rel}}(t) - \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t')} \left\{ \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}_{\text{rel}}(t')] + \frac{\partial \hat{\rho}_{\text{rel}}(t')}{\partial t'} \right\} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t')}. \quad (2.24)$$

Eine anschließende partielle Zeitableitung liefert die modifizierte von-Neumann Gleichung für das Nichtgleichgewicht:

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] = - \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon (\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}_{\text{rel}}(t)) . \quad (2.25)$$

Der Unterschied zu Gl. (2.17) besteht in der infinitesimalen Quelle, dem Dissipator, auf der rechten Seite. Dieser Dissipator bricht die Zeitumkehr und ermöglicht die Beschreibung irreversibler Prozesse.

Kann man das Nichtgleichgewicht als eine Folge kleiner Störungen des Gleichgewichts betrachten, etwa durch ein schwaches äußereres Feld $\hat{H}_F = -h\hat{A} + \mathcal{O}(h^2)$ hervorgerufen, ist eine Linearisierung des relevanten statistischen Operators sowie $\rho(t)$ möglich. Es gilt

$$\hat{\rho}_{\text{rel}}(t) \simeq \hat{\rho}_0 + \beta \int_0^1 d\lambda \sum_n F_n(t) \delta \hat{B}_n(i\hbar\beta\lambda) \hat{\rho}_0 , \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \hat{\rho}(t) \simeq & \hat{\rho}_{\text{rel}}(t) - \beta \int_{-\infty}^t dt' e^{\varepsilon(t'-t)} \int_0^1 d\lambda \left\{ \sum_n \left[F_n(t') \delta \dot{\hat{B}}_n(i\hbar\beta\lambda + t') \right. \right. \\ & \left. \left. + \dot{F}_n(t') \delta \hat{B}_n(i\hbar\beta\lambda + t') \right] - h\dot{\hat{A}}(i\hbar\beta\lambda + t') \right\} \hat{\rho}_0 , \end{aligned} \quad (2.27)$$

wobei $\hat{C}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} \hat{C}(t_0) e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$ Operatoren im Heisenberg-Bild sind. $\delta \hat{B}_n = \hat{B}_n - \langle \hat{B}_n \rangle_0$ repräsentieren die Gleichgewichts-Fluktuationen der relevanten Observablen.

Im Folgenden wird eine periodische Störung angenommen, sodass $h(t) = \tilde{h}(\omega)e^{-i\omega t}$. Das System reagiert analog auf die Störung, somit $F_n(t) = \tilde{F}_n(\omega)e^{-i\omega t}$. In linearer Response lassen sich die Lagrange-Parameter über $\text{Sp} \{ \hat{B}_m \hat{\rho}_{\text{irrel}}(t) \} = 0$ kompakt durch das lineare inhomogene Gleichungssystem

$$\sum_n \left\{ \langle \hat{B}_m; \dot{\hat{B}}_n \rangle_{\omega+i\varepsilon} - i\omega \langle \hat{B}_m; \delta \hat{B}_n \rangle_{\omega+i\varepsilon} \right\} \tilde{F}_n(\omega) = \langle \hat{B}_m; \dot{\hat{A}} \rangle_{\omega+i\varepsilon} \tilde{h}(\omega) , \quad (2.28)$$

lösen. Dazu werden das Kubo-Skalarprodukt und seine Laplace-transformierte Korrelationsfunktion

$$\left(\hat{A} \middle| \hat{B}(t) \right) = \int_0^1 d\lambda \text{Sp} \{ \hat{A} \hat{B}(t) \hat{\rho}_0 \} , \quad (2.29)$$

$$\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle_z = \int_{-\infty}^0 dt e^{-izt} \left(\hat{A} \middle| \hat{B}(t) \right) = \int_0^\infty dt e^{izt} \left(\hat{A}(t) \middle| \hat{B} \right) , \quad (2.30)$$

eingeführt. Nach partieller Integration: $-iz \langle \hat{A}; \hat{B} \rangle_z = - \int_0^\infty dt \left(\frac{d}{dt} e^{izt} \right) \left(\hat{A}(t) \middle| \hat{B} \right) = \left(\hat{A} \middle| \hat{B} \right) + \langle \dot{\hat{A}}; \hat{B} \rangle_z$ erhält man die bekannten Response-Gleichungen ($z = \omega + i\varepsilon$) [Rö87]:

$$\begin{aligned} & \sum_n \left\{ \left(\hat{B}_m \middle| \dot{\hat{B}}_n \right) + \langle \dot{\hat{B}}_m; \dot{\hat{B}}_n \rangle_z - i\omega \left[\left(\hat{B}_m \middle| \delta \hat{B}_n \right) + \langle \dot{\hat{B}}_m; \delta \hat{B}_n \rangle_z \right] \right\} \tilde{F}_n(\omega) \\ & = \left\{ \left(\hat{B}_m \middle| \dot{\hat{A}} \right) + \langle \dot{\hat{B}}_m; \dot{\hat{A}} \rangle_z \right\} \tilde{h}(\omega) . \end{aligned} \quad (2.31)$$

Der Ausdruck lässt sich mit Hilfe der Kubo-Identität $\left(\hat{A} \middle| \dot{\hat{B}} \right) = -\frac{i}{\hbar\beta} \text{Sp} \{ \hat{\rho}_0 [\hat{A}, \hat{B}] \}$ vereinfachen. Kommutieren die relevanten Operatoren $[\hat{B}_m, \hat{B}_n] = 0$, folgt $\left(\hat{B}_m \middle| \dot{\hat{B}}_n \right) = 0$.

2.2 Thermoelektrische Störungen und Berechnung der Onsager-Koeffizienten

Neben den *mechanischen Störungen* durch Anlegen äußerer Felder kann der Gleichgewichtszustand des betrachteten Systems durch den Kontakt mit Wärmebadern (i.A. mit verschiedenen Temperaturen) gestört werden. Ein Beispiel solcher *thermischen Störungen* ist der Temperaturgradient, welcher zu einem Wärmestrom führt. Zwar können diese Störungen nicht durch Beiträge im Hamiltonian dargestellt werden, eine Erweiterung des Zugangs ist jedoch möglich [HRRW84, Rei89, Rö13]. Betrachtet werden Verteilungen der Energie $\hat{h}_S(\mathbf{r})$ und der Teilchenzahl $\hat{n}(\mathbf{r})$, sowie lokale Felder der Temperatur $\beta(\mathbf{r})$ und des chemischen Potentials $\mu(\mathbf{r})$

$$\hat{H}_S = \int d^3\mathbf{r} \hat{h}_S(\mathbf{r}), \quad \hat{N} = \int d^3\mathbf{r} \hat{n}(\mathbf{r}), \quad \beta(\mathbf{r}) \approx \beta - \beta(\nabla T)/T\mathbf{r}, \quad \mu(\mathbf{r}) \approx \mu + (\nabla\mu)\mathbf{r}. \quad (2.32)$$

Für den relevanten statistischen Operator gilt somit [HRRW84, Rö13]

$$\hat{\rho}_{\text{rel}} = \frac{1}{Z_{\text{rel}}} e^{-\int d^3\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}) [\hat{h}_S(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r})] + \beta \sum_n F_n(t) \hat{B}_n}. \quad (2.33)$$

Entsprechend Abs. 2.1 werden nur Störungen in niedrigster Ordnung behandelt. Mit dem externen Feld $\hat{H}_F = -e \int d^3\mathbf{r} V^{\text{ext}}(\mathbf{r}) \hat{n}(\mathbf{r})$ gilt für den statistischen Operator analog zu Gl. (2.27)

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = \hat{\rho}_{\text{rel}} - \beta \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \int_0^1 d\lambda & \left\{ \int d^3\mathbf{r} \frac{\nabla\beta}{\beta} \mathbf{r} \left[\dot{\hat{h}}_S(\mathbf{r}, i\hbar\beta\lambda + t') - \mu \dot{\hat{n}}(\mathbf{r}, i\hbar\beta\lambda + t') \right] \right. \\ & \left. - \int d^3\mathbf{r} \left[\nabla\mu\mathbf{r} + eV^{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \dot{\hat{n}}(\mathbf{r}, i\hbar\beta\lambda + t') - \sum_n F_n \dot{\hat{B}}_n(i\hbar\beta\lambda + t') \right\} \hat{\rho}_0. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Energie und Teilchenzahl sind Erhaltungsgrößen, es gelten die Kontinuitätsgleichungen

$$\dot{\hat{h}}_S(\mathbf{r}) = -\nabla j_H(\mathbf{r}), \quad \dot{\hat{n}}(\mathbf{r}) = -\nabla j(\mathbf{r}), \quad (2.35)$$

mit der totalen Energiestromdichte $\hat{\mathbf{j}}_H$ und der Teilchenstromdichte $\hat{\mathbf{j}}$. Nach partieller Integration über \mathbf{r} werden Terme mit dem elektrischen Stromoperator $\hat{\mathbf{J}}_e = \int d^3\mathbf{r} \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})$ und Wärmestromoperator $\hat{\mathbf{J}}_q = \int d^3\mathbf{r} [\hat{\mathbf{j}}_H(\mathbf{r}) - h\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})]$ erhalten, wobei $h = \mu - T \left(\frac{\partial\mu}{\partial T} \right)_P$ die Enthalpie pro Teilchen ist. Diese lassen sich kompakt durch die Momente des Energietransports $\hat{\mathbf{P}}_n$ darstellen

$$\hat{\mathbf{J}}_e = \frac{e}{m} \hat{\mathbf{P}}_1, \quad \hat{\mathbf{J}}_q = \frac{1}{\beta m} (\hat{\mathbf{P}}_3 - \beta h \hat{\mathbf{P}}_1), \quad \hat{\mathbf{P}}_n = \sum_{\mathbf{k},\varsigma} \hbar \mathbf{k} (\beta E_k^e)^{\frac{n-1}{2}} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k, \quad (2.36)$$

wobei $\hat{a}_k^+ := \hat{a}_{k,e}^+$ den Erzeugungs-, $\hat{a}_k := \hat{a}_{k,e}$ den Vernichtungsoperator der Elektronen und ς den Spin darstellt. Insgesamt ist der statistische Operator des Nichtgleichgewichts [Rö13]

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = \hat{\rho}_{\text{rel}} - \beta \int_{-\infty}^0 dt' e^{\epsilon t'} \int_0^1 d\lambda & \left\{ \frac{\nabla T}{T} \frac{1}{m\beta} \left[\hat{\mathbf{P}}_3(i\hbar\beta\lambda + t') - \beta h \hat{\mathbf{P}}_1(i\hbar\beta\lambda + t') \right] \right. \\ & \left. - \frac{e}{m} \mathbf{E}' \hat{\mathbf{P}}_1(i\hbar\beta\lambda + t') - \sum_n F_n \dot{\hat{B}}_n(i\hbar\beta\lambda + t') \right\} \hat{\rho}_0, \end{aligned} \quad (2.37)$$

wobei sich das elektrische Feld $\mathbf{E}' = \mathbf{E} - (\nabla\mu)_T/e$ aus dem externen elektrischen Feld \mathbf{E} und dem Gradienten des chemischen Potentials bei konstanter Temperatur $(\nabla\mu)_T$ zusammensetzt.

Dies entspricht den Bedingungen eines mechanischen Gleichgewichts wie es beispielsweise bei Plasmasystemen vorliegt. In Metallen liegt hingegen ein chemisches Gleichgewicht vor. In Gl. (2.37) lässt sich eine entsprechende Betrachtung durch die Ersetzung von $h \rightarrow \mu$ und $(\nabla\mu)_T \rightarrow \nabla\mu$ realisieren [HRRW84, RRT89].

Nach der Wahl relevanter Observablen werden die Response-Gleichungen aufgestellt und die Lagrange-Multiplikatoren eliminiert. Anschließend können die Transporteigenschaften durch Koeffizientenvergleich mit den Onsager-Relationen bestimmt werden. Im Beispiel des thermoelektrischen Transports sind die elektrische Stromdichte $\hat{\mathbf{j}}_e = \hat{\mathbf{J}}_e/\Omega_0$ und die Wärmestromdichte $\hat{\mathbf{j}}_q = \hat{\mathbf{J}}_q/\Omega_0$ gemittelt

$$\frac{e}{3m\Omega_0} \text{Sp} \left\{ \hat{\rho} \hat{\mathbf{P}}_1 \right\} = \langle \hat{\mathbf{j}}_e \rangle = e^2 L_{11} \mathbf{E}' - e L_{12} \frac{\nabla T}{T}, \quad (2.38)$$

$$\frac{1}{3\beta m\Omega_0} \text{Sp} \left\{ \hat{\rho} (\hat{\mathbf{P}}_3 - \beta h \hat{\mathbf{P}}_1) \right\} = \langle \hat{\mathbf{j}}_q \rangle = e L_{21} \mathbf{E}' - L_{22} \frac{\nabla T}{T}. \quad (2.39)$$

In den nächsten Unterabschnitten werden verschiedene Sätze relevanter Observablen $\{\hat{B}_n\}$ diskutiert. Im Allgemeinen bieten sich die Momente des Energietransports $\hat{\mathbf{P}}_n$ als relevante Observablen an, da dann die Selbstkonsistenzbedingung, Gl. (2.18), automatisch auch für die elektrische Stromdichte und die Wärmestromdichte erfüllt ist, und die Berechnungen in Gln. (2.38) und (2.39) über den relevanten statistischen Operator erfolgen können.

2.2.1 Berechnung der Onsager-Koeffizienten in der Kubo-Theorie

Die Kubo-Theorie [Kub57] kann als Grenzfall des Zubarev-Formalismus aufgefasst werden, bei dem keine relevanten Observablen betrachtet werden. Der relevante statistische Operator ist dann gleich dem statistischen Operator im Gleichgewicht

$$\hat{\rho}_{\text{rel}}^{\text{Kubo}}(t) = \hat{\rho}_0. \quad (2.40)$$

Mit Gl. (2.37)-(2.39) folgen die Onsager-Koeffizienten aus einem Koeffizientenvergleich

$$L_{rs}^{\text{Kubo}} = \frac{(-\beta h)^{r+s-2}\beta}{3m^2\Omega_0} \langle \hat{\mathbf{P}}_1 - \frac{r-1}{\beta h} \hat{\mathbf{P}}_3; \hat{\mathbf{P}}_1 - \frac{s-1}{\beta h} \hat{\mathbf{P}}_3 \rangle_{ie}. \quad (2.41)$$

Neben den Transportkoeffizienten können auch optische Eigenschaften berechnet werden. Wird die Störung durch ein zeitlich periodisches elektrisches Feld betrachtet, folgt die Kubo-Formel für die elektrische Leitfähigkeit

$$\sigma(\omega) = e^2 L_{11} = \frac{\beta e^2}{3m^2\Omega_0} \langle \hat{\mathbf{P}}_1; \hat{\mathbf{P}}_1 \rangle_{\omega+i\epsilon}. \quad (2.42)$$

Die elektrische Leitfähigkeit ist somit durch die Strom-Strom-Korrelationsfunktion (Lebensdauer einer Stromfluktuation) bestimmt: Je langsamer also eine Fluktuation des Stromes abgebaut wird, desto besser wird der (elektrische) Strom geleitet. Solch ein Zusammenhang zwischen dissipativen Größen und Fluktuationen wird als Fluktuations-Dissipations-Theorem bezeichnet [Rö87].

Die Kubo-Formel, Gl. (2.42) findet häufig bei Simulationstechniken Anwendung. Sowohl in den klassischen MD Simulationen als auch in DFT-MD Simulationen werden die Autokorrelationsfunktionen der Störme ermittelt und Transporteigenschaften abgeleitet. Allerdings wird der statische Fall $\omega = 0$ aufgrund von Divergenzen erst nach Extrapolation zu $\omega \rightarrow 0$ erhalten. Divergenzen treten ebenfalls bei der störungstheoretischen Behandlung der Kubo-Formel auf, siehe Abs. 3.1. Alternativ dazu wird im nächsten Abschnitt ein Satz relevanter Observablen gewählt, die auf auswertbare Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen führen.

2.2.2 Berechnung der Onsager-Koeffizienten aus Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen

In diesem Abschnitt werden die Onsager-Koeffizienten durch Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen dargestellt. Dazu werden die verallgemeinerten Momente des Energietransports der Elektronen als Satz relevanter Observablen $\{\hat{B}_l\}$ gewählt. Mit Hilfe der Kubo-Identität aus Abs. 2.1 ergeben sich die Response-Gleichungen zu ($\delta\hat{\mathbf{P}}_l = \hat{\mathbf{P}}_l$)

$$e\mathbf{E}'Q_{1m} - \frac{\nabla T}{T} \frac{1}{\beta} (N_{3m} - \beta h N_{1m}) = \sum_n \mathbf{F}_n d_{nm}/\beta, \quad (2.43)$$

mit

$$Q_{nm} = N_{nm} + \frac{1}{3} \langle \hat{\mathbf{P}}_n; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_m \rangle_{ie}, \quad N_{nm} = \frac{1}{3} (\hat{\mathbf{P}}_n | \hat{\mathbf{P}}_m), \quad (2.44)$$

$$d_{nm} = \frac{1}{3} \langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}_n, \dot{\hat{\mathbf{P}}}_m \rangle_{ie}, \quad \dot{\hat{\mathbf{P}}}_n = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\mathbf{P}}_n]. \quad (2.45)$$

Die gesuchten Lagrange-Parameter \mathbf{F}_n lassen sich formal mit Hilfe der Cramer'schen Regel berechnen. Über sie ergeben sich die Mittelwerte der elektrischen Stromdichte und der Wärmestromdichte aus Gl. (2.38) zu

$$\langle \hat{\mathbf{j}}_e \rangle = \frac{e}{m\Omega_0} \sum_n \mathbf{F}_n N_{1n}, \quad (2.46)$$

$$\langle \hat{\mathbf{j}}_q \rangle = \frac{1}{\beta m\Omega_0} \sum_n \mathbf{F}_n (N_{3n} - \beta h N_{1n}). \quad (2.47)$$

Die Onsager-Koeffizienten lassen sich als Quotienten zweier Determinanten darstellen und kompakt schreiben zu

$$L_{rs} = -\frac{(-h)^{r+s-2}\beta}{m^2\Omega_0|\mathbb{D}|} \begin{vmatrix} 0 & \frac{r-1}{\beta h} \mathbf{Q}_3^T - \mathbf{Q}_1^T \\ \frac{s-1}{\beta h} \mathbf{N}_3 - \mathbf{N}_1 & \mathbb{D} \end{vmatrix}, \quad (2.48)$$

$$\mathbf{Q}_r = \begin{pmatrix} Q_{r1} \\ \vdots \\ Q_{rL} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{N}_r = \begin{pmatrix} N_{r1} \\ \vdots \\ N_{rL} \end{pmatrix}, \quad \mathbb{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & \cdots & d_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{L1} & \cdots & d_{LL} \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Die Onsager-Koeffizienten werden aus Strom-Kraft und Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen dargestellt. Im Rahmen der Störungstheorie sind beide Korrelationsfunktionen auswertbar. In niedrigster Ordnung der Störungstheorie fallen die Strom-Kraft Korrelationsfunktionen weg, siehe Abs. 3.2. In höherer Ordnung Störungstheorie liefern sie allerdings Beiträge, die beispielsweise für die elektrische Leitfähigkeit als Onsager-Relaxationseffekt bekannt sind.

Betrachtet man hingegen den thermoelektrischen Transport, verletzt $\langle \hat{\mathbf{P}}_n; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_m \rangle_{ie} \neq 0$ in Gl. (2.48) die Symmetrie $L_{rs} \neq L_{sr}$. Bei der Überführung zu stochastischen Kräften kann die Symmetrie wieder hergestellt werden [Rö87]. Von Röpke [Rö88] wurde der Einfluss des Onsager-Relaxationseffekts auf die elektrische Leitfähigkeit untersucht. Verglichen mit Effekten der dynamischen Abschirmung und starker Stöße ist der Onsager-Relaxationseffekt gering und wird im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt.

3. AUSWERTUNG DER KORRELATIONSFUNKTIONEN

In Kapitel 2 konnten entsprechend dem Fluktuations-Dissipation-Theorem optische Eigenschaften sowie Transporteigenschaften von Vielteilchensystemen durch Korrelationsfunktionen im Gleichgewicht dargestellt werden. Die auftretenden Strom-Strom $\langle \hat{\mathbf{P}}_l; \hat{\mathbf{P}}_{l'} \rangle_{\omega+i\epsilon}$, Strom-Kraft $\langle \hat{\mathbf{P}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_{l'} \rangle_{\omega+i\epsilon}$ und Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen $\langle \dot{\mathbf{P}}_l; \dot{\mathbf{P}}_{l'} \rangle_{\omega+i\epsilon}$ werden in diesem Kapitel ausgewertet. Sie sind explizit gegeben durch

$$\langle \hat{\mathbf{P}}_l; \hat{\mathbf{P}}_{l'} \rangle_z = \int_{-\infty}^0 dt e^{-izt} \int_0^1 d\lambda \text{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot \hat{\mathbf{P}}_{l'} (i\hbar\beta\lambda + t) \hat{\rho}_0 \right\}, \quad (3.1)$$

$$\langle \hat{\mathbf{P}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_{l'} \rangle_z = \int_{-\infty}^0 dt e^{-izt} \int_0^1 d\lambda \text{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\mathbf{P}}_{l'} (i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\}, \quad (3.2)$$

$$\langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_{l'} \rangle_z = \int_{-\infty}^0 dt e^{-izt} \int_0^1 d\lambda \text{Sp} \left\{ \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\mathbf{P}}_l] \cdot \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\mathbf{P}}_{l'} (i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\}. \quad (3.3)$$

Wegen $[\hat{a}_k^+ \hat{a}_k, \hat{a}_{\tilde{k}}^+ \hat{a}_{\tilde{k}}] = 0$ verschwindet der kinetische Anteil ($\hat{H}_0 = \sum_{k,c} E_k^c \hat{a}_{k,c}^+ \hat{a}_{k,c}$) im Kommutator. In dieser Arbeit wird sich allein auf den Elektronenimpuls beschränkt, es gilt

$$[\hat{H}_S, \hat{\mathbf{P}}_l] = \sum_c [\hat{V}^{ec}, \hat{\mathbf{P}}_l], \quad (3.4)$$

$$[\hat{V}^{ec \neq e}, \hat{\mathbf{P}}_l] = \left[\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} V_{ec}(q) \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1}, \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\varsigma}} \hbar \tilde{\mathbf{k}} (\beta E_{\tilde{k}}^e)^{\frac{l-1}{2}} \hat{a}_{\tilde{k}}^+ \hat{a}_{\tilde{k}} \right], \quad (3.5)$$

$$[\hat{V}^{ee}, \hat{\mathbf{P}}_l] = \frac{1}{2} \left[\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} V_{ee}(q) \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1}, \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\varsigma}} \hbar \tilde{\mathbf{k}} (\beta E_{\tilde{k}}^e)^{\frac{l-1}{2}} \hat{a}_{\tilde{k}}^+ \hat{a}_{\tilde{k}} \right], \quad (3.6)$$

wobei $\hat{c}_k^+ := \hat{a}_{k,c}^+$ den Erzeugungs- und $\hat{c}_k := \hat{a}_{k,c}$ den Vernichtungsoperator des Teilchen der Sorte c entsprechen, und ς_i den Spin zum Teilchen mit Impuls \mathbf{k}_i . Hierbei wurde die Summation über Impuls \mathbf{k} und Spin ς separiert, vgl. Gl. (2.15) mit $k = \{\mathbf{k}, \varsigma\}$. Nach mehrfacher Anwendung der Antikommatorrelation

$$\{\hat{a}_k^+, \hat{a}_{k'}\} = \hat{a}_k^+ \hat{a}_{k'} + \hat{a}_{k'} \hat{a}_k^+ = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\varsigma_k, \varsigma_{k'}}, \quad (3.7)$$

folgt für die Kommutatoren

$$[\hat{V}^{ec \neq e}, \hat{\mathbf{P}}_l] = \hbar \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} V_{ec}(q) \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}), \quad (3.8)$$

$$[\hat{V}^{ee}, \hat{\mathbf{P}}_l] = \frac{\hbar}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} V_{ee}(q) \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} [\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})], \quad (3.9)$$

wobei

$$\mathbf{K}_l(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \mathbf{k} (\beta E_k^e)^{\frac{l-1}{2}} - (\mathbf{k} + \mathbf{q}) (\beta E_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}^e)^{\frac{l-1}{2}}. \quad (3.10)$$

Das macht eine separate Auswertung der einzelnen Streumechanismen möglich.

Im weiteren Verlauf werden unter Verwendung der Sandwich-Formeln [Rö13]

$$e^{s\hat{H}_0} \hat{c}_k^+ e^{-s\hat{H}_0} = e^{sE_k^e} \hat{c}_k^+, \quad (3.11)$$

$$e^{s\hat{H}_0} \hat{c}_k e^{-s\hat{H}_0} = e^{-sE_k^e} \hat{c}_k, \quad (3.12)$$

und des Wick-Theorems [BdD58, Rö13]

$$\langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \hat{A}_3 \hat{A}_4 \rangle = \langle \hat{A}_1 \hat{A}_2 \rangle \langle \hat{A}_3 \hat{A}_4 \rangle - \langle \hat{A}_1 \hat{A}_3 \rangle \langle \hat{A}_2 \hat{A}_4 \rangle + \langle \hat{A}_1 \hat{A}_4 \rangle \langle \hat{A}_2 \hat{A}_3 \rangle, \quad (3.13)$$

wobei $\langle \hat{A} \rangle := \text{Sp} \{ \hat{A} \hat{\rho}_0 \}$, die Korrelationsfunktionen Gln. (3.1)-(3.3) auf Ein-Teilchen Korrelationsfunktionen zurück geführt. Es gilt für Fermionen und Bosonen entsprechend

$$\langle \hat{c}_k^+ \hat{c}_{k'} \rangle = f_k^c \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\varsigma_k, \varsigma_{k'}}, \quad \langle \hat{c}_k^+ \hat{c}_{k'}^+ \rangle = \langle \hat{c}_k \hat{c}_{k'} \rangle = 0, \quad (3.14)$$

$$\langle \hat{c}_k \hat{c}_{k'}^+ \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\varsigma_k, \varsigma_{k'}} \begin{cases} 1 - f_k^c & \text{Fermionen} \\ 1 + f_k^c & \text{Bosonen} \end{cases}, \quad [f_k^c]^{-1} = \begin{cases} e^{\beta(E_k^e - \mu_c)} + 1 & \text{Fermionen} \\ e^{\beta(E_k^e - \mu_c)} - 1 & \text{Bosonen} \end{cases}. \quad (3.15)$$

Zunächst werden in den Abschnitten 3.1-3.3 entsprechend Strom-Strom, Strom-Kraft und Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen im Rahmen einer Born'schen Näherung ausgewertet. Die Zerlegung der Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen ermöglicht die separate Behandlung der verschiedenen Streuprozesse. Im Falle eines vollständig ionisierten Plasmas werden Elektron-Ion Korrelationen in Abs. 3.4 und Elektron-Elektron Korrelationen in Abs. 3.5 im Detail analysiert. Speziell für die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen werden neue Ergebnisse vorgestellt.

3.1 Strom-Strom Korrelationsfunktionen

Für die Auswertung der Strom-Strom Korrelationsfunktionen ist die Spur in Gl. (3.1) zu berechnen. Explizit lautet sie, siehe Abs. 2.1 und Gl. (2.36),

$$\begin{aligned} \text{Sp} \{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot \hat{\mathbf{P}}_{l'} (i\hbar\beta\lambda + t) \hat{\rho}_0 \} &= \hbar^2 \sum_{\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}, \varsigma_k, \varsigma_{\kappa}} (\beta E_k^e)^{\frac{l-1}{2}} (\beta E_{\kappa}^e)^{\frac{l'-1}{2}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa} \\ &\times \text{Sp} \{ \hat{a}_{\kappa}^+ \hat{a}_{\kappa} e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda + t)\hat{H}_S} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda + t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

In niedrigster Ordnung Störungstheorie werden die Wechselwirkungen im System-Hamiltonian \hat{H}_S vernachlässigt ($V = 0$), sodass $\hat{H}_S = \hat{H}_0$. Nach Einsetzen eines Einheitsoperators

$\hat{1} = e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_0}e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_0}$ zwischen $\hat{a}_k^+\hat{a}_k$, können die Sandwich-Formeln, Gln. (3.11) und (3.12), verwendet werden. Es folgt

$$\text{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot \hat{\mathbf{P}}_{l'} (i\hbar\beta\lambda + t) \hat{\rho}_0 \right\} = \hbar^2 \sum_{\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}, \varsigma_k, \varsigma_{\kappa}} (\beta E_k^e)^{\frac{l-1}{2}} (\beta E_{\kappa}^e)^{\frac{l'-1}{2}} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa} \langle \hat{a}_{\kappa}^+ \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle. \quad (3.17)$$

Nach dem Wick-Theorem Gl. (3.13) gilt

$$\langle \hat{a}_{\kappa}^+ \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = \langle \hat{a}_{\kappa}^+ \hat{a}_{\kappa} \rangle \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle - \langle \hat{a}_{\kappa}^+ \hat{a}_k^+ \rangle \langle \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_k \rangle + \langle \hat{a}_{\kappa}^+ \hat{a}_k \rangle \langle \hat{a}_{\kappa} \hat{a}_k^+ \rangle \quad (3.18)$$

$$= f_{\kappa}^e f_k^e - 0 + f_k^e (1 - f_k^e) \delta_{\mathbf{k}, \boldsymbol{\kappa}} \delta_{\varsigma_k, \varsigma_{\kappa}}. \quad (3.19)$$

Damit folgt für die Strom-Strom Kubo-Skalarprodukte, Gl. (2.29),

$$\left(\hat{\mathbf{P}}_l \middle| \hat{\mathbf{P}}_{l'} \right) = 2\hbar^2 \sum_{\mathbf{k}} k^2 (\beta E_k^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} f_k^e (1 - f_k^e). \quad (3.20)$$

Nach Bildung des Kontinuumsgrenzfall $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}$ und anschließender Substitution $x = \beta E_k$ folgt

$$\left(\hat{\mathbf{P}}_l \middle| \hat{\mathbf{P}}_{l'} \right) = 2\hbar^2 \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{\infty} dk k^4 (\beta E_k^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} f_k^e (1 - f_k^e) \quad (3.21)$$

$$= \frac{m\Omega_0}{\beta\pi^2} \left(\frac{2m}{\beta\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} dx x^{\frac{l+l'+1}{2}} \left[-\frac{d(e^{x-\alpha} + 1)^{-1}}{dx} \right], \quad (3.22)$$

wobei $\alpha = \beta\mu$ der Logarithmus der Fugazität ist, siehe auch die Formelsammlung im Anhang. Damit lassen sich die Strom-Strom Kubo-Skalarprodukte durch Fermi-Integrale $I_{\nu}(y) = \frac{1}{\Gamma(\nu+1)} \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\nu}}{e^x - y + 1}$ darstellen [Rö87, Rö13]

$$\left(\hat{\mathbf{P}}_l \middle| \hat{\mathbf{P}}_{l'} \right) = \frac{3n_e\Omega_0 m}{\beta} \frac{\Gamma\left(\frac{l+l'+3}{2}\right)}{\Gamma(5/2)} \frac{I_{\frac{l+l'-1}{2}}(\alpha)}{I_{1/2}(\alpha)}. \quad (3.23)$$

Im Niederdichtegrenzfall ($\alpha \ll 0$) sowie im hoch-entarteten Grenzfall ($\alpha \gg 0$) gelten einfache Ausdrücke

$$\left(\hat{\mathbf{P}}_l \middle| \hat{\mathbf{P}}_{l'} \right) \stackrel{\alpha \ll 0}{=} \frac{3n_e\Omega_0 m}{\beta} \frac{\Gamma\left(\frac{l+l'+3}{2}\right)}{\Gamma(5/2)}, \quad \left(\hat{\mathbf{P}}_l \middle| \hat{\mathbf{P}}_{l'} \right) \stackrel{\alpha \gg 0}{=} \frac{3n_e\Omega_0 m}{\beta} \alpha^{\frac{l+l'}{2}-1}. \quad (3.24)$$

Diese Grenzfälle werden in den späteren Abschnitten eine wesentliche Rolle bei der Reproduktion bekannter Formeln aus der kinetischen Theorie mit dem Zugang der Linearen-Response Theorie spielen.

Schließlich folgen für die Strom-Strom Korrelationsfunktionen [Rö13]

$$\langle \hat{\mathbf{P}}_l; \hat{\mathbf{P}}_{l'} \rangle_{\omega+i\epsilon}^{(0)} = \frac{3n_e\Omega_0 m}{\beta} \frac{\Gamma\left(\frac{l+l'+3}{2}\right)}{\Gamma(5/2)} \frac{I_{\frac{l+l'-1}{2}}(\alpha)}{I_{1/2}(\alpha)} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\epsilon - i\omega}. \quad (3.25)$$

Das Superskript (0) soll hierbei verdeutlichen, dass Wechselwirkungen vernachlässigt wurden ($V_{ec} = 0$). Im statischen Fall ($\omega = 0$) sind damit die Strom-Strom Korrelationsfunktion und

die elektrische Leitfähigkeit in niedrigster Ordnung Störungstheorie divergent, der elektrische Widerstand verschwindet. Dieses Ergebnis lässt sich physikalisch leicht interpretieren. Durch die Näherung $\hat{H}_S = \hat{H}_0$ wurden in der Strom-Strom Korrelationsfunktion alle Wechselwirkungen vernachlässigt. Um Stoße berücksichtigen zu können, müssen Wechselwirkungen einbezogen werden. Diese können in höherer Ordnung Störungstheorie behandelt werden, siehe [Ros14, RRRR15]. Dabei entstehen weitere divergente Terme, die sich allerdings über eine geometrische Reihe zu einem konvergenten Resultat aufsummieren lassen.

3.2 Strom-Kraft Korrelationsfunktionen

Die Spur in der Strom-Kraft Korrelationsfunktion wird ebenfalls in niedrigster Ordnung Störungstheorie ausgewertet ($\hat{H}_S = \hat{H}_0$). Im Unterschied zur Strom-Strom Korrelationsfunktion sind Wechselwirkungen in den Kräften enthalten. Beschränkt man sich auf das elektronische Untersystem, besteht die Spur der Strom-Kraft Korrelationsfunktion, Gl. (3.2), aus qualitativ zwei Anteilen:

Für den *nichtelektronischen* Anteil der Spur gilt, mit Gl. (3.8),

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot [\hat{V}^{ec \neq e}, \hat{\mathbf{P}}_{l'}(i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= \hbar^2 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2, \boldsymbol{\kappa}, \varsigma_\kappa} (\beta E_\kappa^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} V_{ec}(q) \boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \\ & \quad \times \text{Sp} \left\{ \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Mit $\hat{H}_S = \hat{H}_0$ kann die Korrelationsfunktion über die Sandwich-Formeln und dem Wick-Theorem, Gln. (3.11)-(3.13), analog zu Abs. 3.1, ausgewertet werden

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{ec}} \langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{ec}} \langle \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \rangle \left(\langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa \rangle \langle \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle + \langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \langle \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_1+q}^+ \rangle \right), \end{aligned} \quad (3.27)$$

wobei $\Delta E^{ec} = E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e + E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e - E_{k_2}^c - E_{k_1}^e$. Der Term liefert nur einen Beitrag, wenn kein Stoß stattfindet ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$), siehe Gl. (3.14). Die \mathbf{K} -Terme aus Gl. (3.10) verschwinden in Gl. (3.26) und damit auch der nichtelektronische Anteil der Strom-Kraft Korrelationsfunktion

$$\text{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot [\hat{V}^{ec \neq e}, \hat{\mathbf{P}}_{l'}] \hat{\rho}_0 \right\} = 0. \quad (3.28)$$

Für den *elektronischen* Anteil der Spur gilt, mit Gl. (3.9),

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ \hat{\mathbf{P}}_l \cdot [\hat{V}^{ee \neq e}, \hat{\mathbf{P}}_{l'}(i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2, \boldsymbol{\kappa}, \varsigma_\kappa} (\beta E_\kappa^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} V_{ee}(q) \boldsymbol{\kappa} \cdot [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] \\ & \quad \times \text{Sp} \left\{ \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Mit $\hat{H}_S = \hat{H}_0$ kann die Korrelationsfunktion über die Sandwich-Formeln und dem Wick-Theorem, Gln. (3.11)-(3.13), analog zum *nichtelektronischen* Anteil, ausgewertet werden

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{ee}} \langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{ee}} \left[\langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_\kappa \rangle \left(\langle \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \langle \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \rangle - \langle \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2} \rangle \langle \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \right) \right. \\ &\quad + \langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \left(\langle \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_1+q}^+ \rangle \langle \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \rangle - \langle \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_2-q}^+ \rangle \langle \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2} \rangle \right) \\ &\quad \left. - \langle \hat{a}_\kappa^+ \hat{a}_{k_2} \rangle \left(\langle \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_1+q}^+ \rangle \langle \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle - \langle \hat{a}_\kappa \hat{a}_{k_2-q}^+ \rangle \langle \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Die Ausdrücke liefern entweder Beiträge, wenn kein Stoß stattfindet ($\mathbf{q} = \mathbf{0}$) oder wenn die Elektronen ihre Impulse nach dem Stoßprozess tauschen ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} = \mathbf{k}_2$, $\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} = \mathbf{k}_1$). Der letztere Fall ist von dem stoßfreien Szenario nicht zu unterscheiden, sodass der Transport nicht beeinflusst wird. Da für diesen Fall $\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) = -\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})$, siehe Gl. (3.10), verschwinden alle Beiträge in Gl. (3.29), wie auch die Strom-Kraft Korrelationsfunktionen insgesamt, denn es folgt sofort

$$\langle \dot{\mathbf{P}}_l; \dot{\mathbf{P}}_{l'} \rangle_{\omega+i\epsilon}^{(0)} = 0. \quad (3.31)$$

Ströme und Kräfte verhalten sich demnach in niedrigster Ordnung der Störungstheorie unkorreliert [Rö88]. Beiträge durch Terme höherer Ordnung in der Störungstheorie führen auf den Onsager-Relaxationseffekt und wurden von Röpke [Rö88] mit der Methode der Green-Funktionen behandelt. Der Einfluss auf Transportgrößen etwa der elektrischen Leitfähigkeit ist allerdings verglichen mit Effekten der dynamischen Abschirmung und starker Stöße gering. Die Strom-Kraft Korrelationsfunktionen werden daher in dieser Arbeit vernachlässigt.

3.3 Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen

Die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen, Gl. (3.3), lassen sich wie folgt separieren

$$\langle \dot{\mathbf{P}}_l; \dot{\mathbf{P}}_{l'} \rangle_z = \sum_{b,c} \langle \dot{\mathbf{P}}_l^{eb}; \dot{\mathbf{P}}_{l'}^{ec} \rangle_z, \quad (3.32)$$

wobei

$$\langle \dot{\mathbf{P}}_l^{eb}; \dot{\mathbf{P}}_{l'}^{ec} \rangle_z = -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^0 dt e^{-izt} \int_0^1 d\lambda \text{Sp} \left\{ [\hat{V}^{eb}, \dot{\mathbf{P}}_l] \cdot [\hat{V}^{ec}, \dot{\mathbf{P}}_{l'}(i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\}. \quad (3.33)$$

In niedrigster Ordnung der Störungstheorie (Born'sche Näherung $\hat{H}_S = \hat{H}_0$) führt der Spurterm entsprechend den Gln. (3.8)-(3.12) bei analogen Rechenschritten zu Abs. 3.2 auf Korrelationsfunktionen der Form $\langle \hat{a}_{\kappa_I+\varphi} \hat{b}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{b}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \rangle$.

Für den Fall $b \neq c$ verlaufen die Auswertungen der Korrelationsfunktionen analog zu Abs. 3.2 über das Wick-Theorem Gl. (3.13), ähnlich Gl. (3.26) bei $(b \neq e \neq c)$ und Gl. (3.29) bei $(b = e$ oder $c = e)$. Diese Beiträge schließen allerdings wenigstens teilweise einen Impulsübertrag aus, $\varphi = \mathbf{0}$ und/oder $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Dabei verschwinden die \mathbf{K} -Terme, Gl. (3.10), und demzufolge auch die Korrelationsfunktionen. Unterschiedliche Kräfte sind daher unkorreliert,

es folgt $\langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{eb}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec} \neq \text{eb}}_{l'} \rangle_z = 0$. Das führt auf eine vereinfachte Separation der Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen [MR82, HRRW84]

$$\langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_{l'} \rangle_z = \sum_c \langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_{l'} \rangle_z^{\text{ec}} , \quad (3.34)$$

mit $\langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_{l'} \rangle_z^{\text{ec}} := \langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_{l'} \rangle_z$. Es bietet sich an, die einzelnen Beiträge getrennt voneinander zu behandeln:

Im *nichtelektronischen* Anteil ($c \neq e$) aus Gl. (3.34) gilt für die entsprechende Spur in Gl. (3.33) mit Gl. (3.8)

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ [\hat{V}^{\text{ec}}, \hat{\mathbf{P}}_l] \cdot [\hat{V}^{\text{ec}}, \hat{\mathbf{P}}_{l'}(i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= \hbar^2 \sum_{\kappa_I, \kappa_{II}, \varphi, \varsigma_I, \varsigma_{II}} V_{\text{ec}}(\varphi) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} V_{\text{ec}}(q) \mathbf{K}_l(\kappa_I, \varphi) \cdot \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \\ & \quad \times \text{Sp} \left\{ \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\} . \end{aligned} \quad (3.35)$$

Mit $\hat{H}_S = \hat{H}_0$ kann die Korrelationsfunktion über die Sandwich-Formeln und mit dem Wick-Theorem, Gln. (3.11)-(3.15), analog zu Abs. 3.1, ausgewertet werden

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{\text{ec}}} \langle \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{\text{ec}}} \left[\langle \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_I} \rangle \langle \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \left(\langle \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}} \rangle \langle \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \rangle + \langle \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{k_2} \rangle \langle \hat{c}_{\kappa_{II}} \hat{c}_{k_2-q}^+ \rangle \right) \right. \\ & \quad \left. + \langle \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{a}_{k_1} \rangle \langle \hat{a}_{\kappa_I} \hat{a}_{k_1+q}^+ \rangle \left(\langle \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{\kappa_{II}} \rangle \langle \hat{c}_{k_2-q}^+ \hat{c}_{k_2} \rangle + \langle \hat{c}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{c}_{k_2} \rangle \langle \hat{c}_{\kappa_{II}} \hat{c}_{k_2-q}^+ \rangle \right) \right] \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{\text{ec}}} \left\{ f_{\kappa_I}^e f_{k_1}^e f_{k_2}^c \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}} \delta_{\varphi, 0} \left[f_{\kappa_{II}}^c + (1 \pm f_{\kappa_{II}}^c) \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2} \right] \right. \\ & \quad \left. + f_{k_1}^e (1 - f_{\kappa_I}^e) f_{k_2}^c \delta_{\varphi, -q} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_1+q} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \left[f_{\kappa_{II}}^c \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}} + (1 \pm f_{\kappa_{II}}^c) \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2-q} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2} \right] \right\} . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Einzig der letzte Term beschreibt Stöße und liefert einen Beitrag zu den Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen. Alle anderen Terme fordern $\mathbf{q} = \varphi = \mathbf{0}$, entsprechende \mathbf{K} -Terme, Gl. (3.10), entfallen, analog zu den Strom-Kraft Korrelationsfunktionen. Im letzten Term ist die Impulserhaltung durch die Kronecker-Deltas dargestellt. Durch sie können die Summationen über $\kappa_I, \kappa_{II}, \varphi, \varsigma_I, \varsigma_{II}$ in den *nichtelektronischen* Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen, siehe Gln. (3.33), (3.35), ausgeführt werden. Ebenso ist die Auswertung der Integrale trivial, es folgt ($V_{\text{ec}}(q) = V_{\text{ec}}(-q)$, $\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, -\mathbf{q}) = -\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q})$)

$$\begin{aligned} \langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_{l'} \rangle_z^{\text{ec}} &= \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Delta E^{\text{ec}} - \hbar\omega - i\hbar\epsilon} \frac{1 - e^{-\beta\Delta E^{\text{ec}}}}{\beta\Delta E^{\text{ec}}} V_{\text{ec}}^2(q) \\ & \quad \times f_{k_1}^e (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e) f_{k_2}^c (1 \pm f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^c) \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \cdot \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) . \end{aligned} \quad (3.37)$$

Im statischen Grenzfall $\omega = 0$ sind also die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen in niedrigster Ordnung Störungstheorie gegeben durch

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ec}} &= \frac{1}{3} \langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}^{\text{ec}}_{l'} \rangle_{i\epsilon}^{\text{ec}} = \frac{\pi\hbar}{3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} \delta(\Delta E^{\text{ec}}) V_{\text{ec}}^2(q) f_{k_1}^e (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e) f_{k_2}^c (1 \pm f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^c) \\ & \quad \times \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \cdot \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) . \end{aligned} \quad (3.38)$$

Hierbei wurde die Dirac-Identität: $\lim_{\nu \rightarrow +0} 1/(x \pm i\nu) = \mathcal{P}(1/x) \mp i\pi\delta(x)$ benutzt. Die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen sind von der Stärke der Wechselwirkung $V_{ee}(q)$ abhängig. Weiterhin wird die Energieerhaltung durch die Delta-Distribution $\delta(\Delta E^{ee})$ dargestellt und das Pauli-blocking der Elektronen wird durch den Term $(1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e)$ realisiert. Quanteneffekte des Stoßpartners der Sorte c werden ebenfalls berücksichtigt.

Im *elektronischen* Anteil ($c \neq e$) aus Gl. (3.34) gilt für die entsprechende Spur in Gl. (3.33) mit Gl. (3.9)

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ [\hat{V}^{ee}, \hat{\mathbf{P}}_l] \cdot [\hat{V}^{ee}, \hat{\mathbf{P}}_{l'}(i\hbar\beta\lambda + t)] \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \sum_{\kappa_I, \kappa_{II}, \varphi, \varsigma_I, \varsigma_{II}} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} [\mathbf{K}_l(\kappa_I, \varphi) + \mathbf{K}_l(\kappa_{II}, -\varphi)] \cdot [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] \times \quad (3.39) \\ & V_{ee}(\varphi) V_{ee}(q) \text{Sp} \left\{ \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \right\}. \end{aligned}$$

Mit $\hat{H}_S = \hat{H}_0$ kann die Korrelationsfunktion über die Sandwich-Formeln und mit dem Wick-Theorem, Gln. (3.11)-(3.15), analog zu Abs. 3.1, ausgewertet werden

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \{ \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} e^{-\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\hat{H}_S} \hat{\rho}_0 \} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{ee}} \langle \hat{a}_{\kappa_I+\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_{II}-\varphi}^+ \hat{a}_{\kappa_{II}} \hat{a}_{\kappa_I} \hat{a}_{k_1+q}^+ \hat{a}_{k_2-q}^+ \hat{a}_{k_2} \hat{a}_{k_1} \rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(i\hbar\beta\lambda+t)\Delta E^{ee}} \left[f_{\kappa_I}^e f_{\kappa_{II}}^e f_{k_1}^e f_{k_2}^e (\delta_{\varphi,0} - \delta_{\kappa_I+\varphi, \kappa_{II}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_{II}}) (\delta_{\mathbf{q},0} - \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2}) \right. \\ & \quad + f_{\kappa_{II}}^e f_{k_2}^e f_{k_1}^e (1 - f_{\kappa_I}^e) (\delta_{\kappa_I+\varphi, \kappa_{II}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_{II}} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2} - \delta_{\varphi,0} \delta_{\kappa_I+\varphi, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2}) \\ & \quad \quad \times (\delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \delta_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2} - \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_2, \varsigma_1} \delta_{\mathbf{q},0}) \\ & \quad + f_{k_1}^e f_{\kappa_{II}}^e (1 - f_{\kappa_I}^e) f_{k_2}^e (\delta_{\kappa_I+\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \delta_{\varphi,0} - \delta_{\kappa_I+\varphi, \kappa_{II}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_{II}} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1}) \\ & \quad \quad \times (\delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \delta_{\mathbf{q},0} - \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_2} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2}) \\ & \quad + f_{k_2}^e f_{\kappa_I}^e (1 - f_{\kappa_{II}}^e) f_{k_1}^e (\delta_{\kappa_I+\varphi, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_2} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1} - \delta_{\varphi,0} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2}) \\ & \quad \quad \times (\delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1} \delta_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_2, \varsigma_1} - \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_2, \varsigma_1} \delta_{\mathbf{q},0}) \\ & \quad + f_{\kappa_I}^e f_{k_1}^e (1 - f_{\kappa_{II}}^e) f_{k_2}^e (\delta_{\varphi,0} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1} - \delta_{\kappa_I+\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1}) \\ & \quad \quad \times (\delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1} \delta_{\mathbf{q},0} - \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2}) \\ & \quad + f_{k_1}^e f_{k_2}^e (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e) (1 - f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e) (\delta_{\kappa_I+\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2} - \delta_{\kappa_I+\varphi, \mathbf{k}_2} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} \\ & \quad \quad \times \delta_{\kappa_{II}-\varphi, \mathbf{k}_1} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1}) (\delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_2} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_1} - \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_1+\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_{II}, \varsigma_1} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_2-\mathbf{q}} \delta_{\varsigma_I, \varsigma_2}) \]. \quad (3.40) \end{aligned}$$

Für alle Terme, die wenigstens eine dieser Kronecker-Deltas: $\delta_{\mathbf{q},0}$ oder $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}, \mathbf{k}_2}$ bzw. $\delta_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}, \mathbf{k}_1}$ enthalten, verschwinden die \mathbf{K} -Terme, Gl. (3.10), bzw. ihre Summen in dem elektronischen Anteil, Gl. (3.39). Diese Terme tragen daher zu den *elektronischen* Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen, Gl. (3.34), Nichts bei. Eingesetzt in Gl. (3.34) mit Gln. (3.33), (3.39), und nach Auswertung der Integrale sowie der Summen über die Spins ς_I und ς_{II} gilt mit $V_{ee}(q) = V_{ee}(-q)$ und

$$\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}) = -[\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] \quad (3.41)$$

für den *elektronischen* Anteil der Kraft-Kraft Korrelatonsfunktionen

$$\begin{aligned}
\langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_{l'} \rangle_z^{ee} &= -\frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} V(q) f_{k_1}^e f_{k_2}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|}^e\right) \left(1 - f_{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}|}^e\right) \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Delta E^{ee} - \hbar\omega - i\hbar\eta} \\
&\times \frac{1 - e^{-\beta\Delta E^{ee}}}{\beta\Delta E^{ee}} \sum_{\kappa_I, \kappa_{II}, \varphi} V(\varphi) [\mathbf{K}_l(\kappa_I, \varphi) + \mathbf{K}_l(\kappa_{II}, -\varphi)] [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] \\
&\times \left\{ \delta_{\varphi, -\mathbf{q}} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}} - \delta_{\varphi, \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2} \right. \\
&\quad \left. - \delta_{\varphi, -\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}} \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2} + \delta_{\varphi, \mathbf{q}} \delta_{\kappa_{II}, \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}} \delta_{\kappa_I, \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{\Delta E^{ee} - \hbar\omega - i\hbar\eta} \frac{1 - e^{-\beta\Delta E^{ee}}}{\beta\Delta E^{ee}} V_{ee}^2(q) \\
&\times f_{k_1}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|}^e\right) f_{k_2}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}|}^e\right) \left\{ 1 - \delta_{\varsigma_1, \varsigma_2} \frac{V_{ee}(|\mathbf{q} + \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|)}{V_{ee}(q)} \right\} \\
&\times [\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})], \tag{3.42}
\end{aligned}$$

Im statischen Fall ($\omega = 0$) folgt für die Kraft-Kraft Korrelatonsfunktionen:

$$\begin{aligned}
d_{ll'}^{ee} &= \frac{1}{3} \langle \dot{\hat{\mathbf{P}}}_l; \dot{\hat{\mathbf{P}}}_{l'} \rangle_{ie}^{ee} = \frac{\pi\hbar}{6} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}, \varsigma_1, \varsigma_2} \delta(\Delta E^{ee}) V_{ee}^2(q) f_{k_1}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}|}^e\right) f_{k_2}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}|}^e\right) \\
&\times [\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})], \tag{3.43}
\end{aligned}$$

wobei der Austauschterm zunächst vernachlässigt wird. Der Grenzfall $\epsilon \rightarrow 0$ kann durchgeführt werden, ohne Divergenzen zu erzeugen. Auch hier hängt die Korrelation von der Stärke der Wechselwirkung ab. Energieerhaltung und Pauli-blocking werden analog zu den nichtelektronischen Korrelatonsfunktionen realisiert. Ein wesentlicher Unterschied besteht jedoch in der Ununterscheidbarkeit der Elektronen. Dies führt beispielsweise dazu, dass die Kraft-Kraft Korrelatonsfunktionen $d_{ll'}^{ee} = 0$ aufgrund der Impulserhaltung verschwinden.

Die Kraft-Kraft Korrelatonsfunktionen Gln. (3.38), (3.43) sind vom Wechselwirkungspotential abhängig. Für den Fall des Coulomb-Potentials

$$V_{ec}(q) \rightarrow V_{ec,C}(q) = \frac{e_e e_c}{\Omega_0 \epsilon_0 q^2}, \tag{3.44}$$

wobei e_c die Ladung des Teilchens der Sorte c ist ($e_e = -e$), sind diese Beiträge allerdings divergent. Die Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen im Plasma wird jedoch durch das Vielteilchensystem beeinflusst. In diesem Zusammenhang ist von Abschirmung die Rede. Über die Methode der Green-Funktionen können Abschirmeffekte störungstheoretisch berücksichtigt werden, siehe [KKER86]. Im semiklassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ wird die Wechselwirkung geladener Teilchen im Vielteilchensystem durch das Debye-Potential [KSK05]

$$V_{ec,D}(q) = \frac{V_{ec,C}(q)}{1 + \frac{\kappa^2}{q^2}}, \tag{3.45}$$

mit dem Abschirmparameter κ beschrieben. Er ist gegeben durch [KKER86, KSK05]

$$\kappa^2 = \kappa_e^2 + \sum_{c \neq e} \kappa_c^2, \quad \kappa_e^2 = \frac{\beta e^2 n_e}{\epsilon_0} \frac{I_{-1/2}(\alpha)}{I_{1/2}(\alpha)}, \quad \kappa_c^2 = \frac{\beta e_c^2 n_c}{\epsilon_0}. \tag{3.46}$$

Für den Fall eines vollständig ionisierten Plasmas mit $e_i = Ze$ folgt

$$\kappa^2 = \frac{\beta e^2 n_e}{\epsilon_0} \left[\frac{I_{-1/2}(\alpha)}{I_{1/2}(\alpha)} + Z \right]. \quad (3.47)$$

Auch wenn Abschirmeffekte streng genommen jenseits der Näherung $\hat{H}_S = \hat{H}_0$ entstehen, wird die Verwendung des Debye-Potentials in den Korrelationsfunktionen Gln. (3.38), (3.43) im Folgenden als *Born'sche Näherung* bezeichnet. Für die Beschreibung höherer Ordnungen im Rahmen einer Störungstheorie ist mit Hilfe der Diagrammtechnik eine systematische und übersichtliche Herangehensweise möglich. Die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen lassen sich allgemein durch 4-Teilchen Green-Funktionen darstellen. Für ihre Auswertung werden unterschiedliche Näherungen gemacht. Zwei verschiedene Erweiterungen der Born'schen Näherung (B) werden hier betrachtet.

Die sogenannte Lenard-Balescu Näherung (LB) behandelt im Gegensatz zur Born'schen Näherung (B) die Abschirmung dynamisch. Wie bereits erwähnt, wird die Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen durch das Vielteilchensystem abgeschirmt. Die Abschirmung erfolgt im Allgemeinen über die dielektrische Funktion $\epsilon(q, \omega)$, es gilt [KKER86]

$$V_{ec,C}^s(q, \omega) = \frac{V_{ec,C}(q)}{\epsilon(q, \omega)}. \quad (3.48)$$

In niedrigster Ordnung der Störungstheorie werden Stöße in der dielektrischen Funktion vernachlässigt. Diese Näherung wird als Random-Phase-Approximation (RPA) bezeichnet ($\epsilon(q, \omega) \approx \epsilon^{RPA}(q, \omega)$).

Die zweite Erweiterung der Born'schen Näherung ist die sogenannte T-Matrix Näherung (TM). Die 4-Teilchen Green-Funktion wird durch zwei T-Matrizen ersetzt. Die T-Matrizen entsprechen einer sogenannten Leitersummation, bei der Diagramme höherer Wechselwirkung konsistent berücksichtigt werden. Während die Born'sche Näherung nur schwache Stöße beschreibt, werden in der T-Matrix Näherung auch starke Stöße berücksichtigt. Werden Entartungseffekte in der T-Matrix Näherung vernachlässigt, ist sie direkt mit dem differentiellen Wirkungsquerschnitt verbunden [Mes65]

$$|T_{ec}|^2 = \frac{4\pi^2 \hbar^4}{\Omega_0^2 m_{ec}^2} \left(\frac{d\sigma^{ec}}{d\Omega} \right), \quad (3.49)$$

wobei $m_{ec} = m^2 m_c^2 / (m + m_c)$ die reduzierte Masse ist.

Eine gemeinsame Behandlung beider Näherungen etwa durch eine dynamisch abgeschirmte T-Matrix Rechnung ist bislang nicht möglich. Es gibt jedoch Vorschläge, beide Näherungen miteinander zu verbinden. Eine Möglichkeit ist die sogenannte Gould-DeWitt Näherung [Hub61, GD67]

$$d_{ll'}^{ec,GdW} = d_{ll'}^{ec,TM} + d_{ll'}^{ec,LB} - d_{ll'}^{ec,B}. \quad (3.50)$$

Im Rahmen der Gould-DeWitt Näherung wird eine statisch abgeschirmte T-Matrix Rechnung durchgeführt, bei der der Term niedrigster Ordnung, die statische Born'sche Näherung, durch die dynamische Lenard-Balescu Näherung ersetzt wird. Im Rahmen der Green-Funktionsmethode werden also die Diagramme der beiden Näherungen (LB und TM) aufsummiert und die doppelt gezählte Born'sche Näherung (B) abgezogen. Ein Nachteil dieser Näherung

ist die willkürlich erscheinende Wahl der statischen Abschirmung. Streng genommen ist mit Coulomb-Potentialen zu arbeiten, welche jedoch divergente Terme liefern.

Eine Alternative bietet das Konzept der effektiven Abschirmung. Hierbei wird der Abschirmparameter κ in der Born'schen Näherung durch Vergleich mit der Lenard-Balescu Näherung fixiert. Es wird der statische Abschirmparameter so gewählt, dass er mit dem Resultat der dynamischen Abschirmung übereinstimmt. Mit diesem nun effektiven Abschirmparameter κ_{eff} werden dann T-Matrix Rechnungen durchgeführt. Dieses Verfahren entspricht der Gould-DeWitt Methode, sofern κ_{eff} für die statische Abschirmung gewählt wird.

3.4 Analyse der Elektron-Ion Korrelationsfunktionen

3.4.1 Born'sche Näherung

In diesem Abschnitt wird von der Born'schen Näherung Gebrauch gemacht. Die Wechselwirkung in Gl. (3.38) wird durch das Debye-Potential beschrieben. Aufgrund der relativ großen Ionenmassen kann die adiabatische Näherung angewandt werden. Die Elektronen streuen hierbei elastisch an den Ionen, es findet kein Energieübertrag an die Ionen statt ($E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^i \simeq E_{k_2}^i$). Weiterhin werden die Ionen klassisch behandelt, $f_{k_2}^i(1 \pm f_{k_2}^i) \simeq f_{k_2}^i = e^{-\beta E_{k_2}^i} n_i \Lambda_i^3 / (2s_i + 1)$. Mit $\sum_{\mathbf{k}_2, s_2} f_{k_2}^i = n_i \Omega_0 = n_e \Omega_0 / Z$ folgt [MR82]

$$d_{ll'}^{\text{ei},B} = \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{n_e \Omega_0}{Z} \frac{\Omega_0^2}{(2\pi)^6} \int d^3\mathbf{q} \int d^3\mathbf{k}_1 |V_D^{\text{ei}}(q)|^2 q^2 (\beta E_{k_1}^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} \times \delta(E_{k_1}^e - E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e) f_{k_1}^e (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e). \quad (3.51)$$

Es werden Kugelkoordinaten eingeführt, der Vektor \mathbf{q} wird parallel zur z -Richtung gewählt und Vektor \mathbf{k}_1 wird in die x - z -Ebene gelegt:

$$\mathbf{q} = q \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{k}_1 = k_1 \begin{pmatrix} \sin \theta_{k_1} \\ 0 \\ \cos \theta_{k_1} \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Als Zwischenresultat folgt für die Elektron-Ion Korrelationsfunktionen

$$d_{ll'}^{\text{ei},B} = \frac{2\pi\hbar}{3} Z n_e \Omega_0 \frac{16\pi^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{4\pi}{(2\pi)^6} \int_0^\infty dq \frac{q^4}{(q^2 + \kappa^2)^2} \int_0^\infty dk_1 k_1^2 f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e) \times \int_{-1}^1 dz \delta\left(z + \frac{q}{2k_1}\right) \frac{m}{\hbar^2 k_1 q} (\beta E_{k_1}^e)^{\frac{l+l'}{2}-1}. \quad (3.53)$$

Nach der Integration über z folgt die Bedingung $k \geq \frac{q}{2}$. Mit der Substitution $k_1 dk_1 = \frac{1}{2} dk_1^2 = \frac{m}{\hbar^2 \beta} d(\beta E_{k_1}^e)$ gilt

$$d_{ll'}^{\text{ei},B} = \frac{4Z}{3\pi} \frac{n_e \Omega_0 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m^2}{\hbar^3 \beta} \int_0^\infty dq \frac{q^3}{(q^2 + \kappa^2)^2} \int_{\beta \hbar^2 q^2 / (8m)}^\infty d(\beta E_{k_1}^e) (\beta E_{k_1}^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{d(-f_{k_1}^e)}{d(\beta E_{k_1}^e)}. \quad (3.54)$$

Dieser Ausdruck lässt sich durch die dimensionslose Größen $Q = q\sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{8m}}$, $\tilde{\kappa} = \kappa\sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{8m}}$ und $\beta E_{k_1}^e = x$ kompakt schreiben zu [MR82, RRRR15]

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \int_{Q^2}^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}-1} \left[-\frac{d(e^{x-\alpha} + 1)^{-1}}{dx} \right], \quad (3.55)$$

$$d = \frac{4}{3} \sqrt{2\pi m \beta} \left(\frac{n_e e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 \Omega_0, \quad (3.56)$$

wobei $\Lambda_e = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$ die thermische Wellenlänge ist.

Die Elektron-Ion Korrelationsfunktionen lassen sich im Allgemeinen nicht durch analytische Funktionen ausdrücken. Es werden daher im Folgenden zwei Näherungen gemacht, die auf gut bekannte Grenzfälle der Transportgrößen führen. Im hochentarteten Grenzfall wird schließlich die Ziman-Formel erhalten, im Niederdichtegrenzfall die Brooks-Herring Formel.

Hochentarteter Grenzfall und Ziman-Formel

Gl. (3.55) wird partiell integriert

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \left\{ \frac{(Q^2)^{\frac{l+l'}{2}-1}}{e^{Q^2-\alpha} + 1} + \left(\frac{l+l'}{2} - 1 \right) \int_{Q^2}^\infty dx \frac{x^{\frac{l+l'}{2}-2}}{e^{x-\alpha} + 1} \right\}. \quad (3.57)$$

Im hochentarteten Grenzfall ($\alpha \gg 0$) können die auftretenden Fermi-Funktionen als Stufenfunktion approximiert werden (Sommerfeld-Entwicklung)

$$\int_c^\infty dx \frac{1}{e^{x-\alpha} + 1} f(x) \approx \int_c^\alpha dx \mathbb{1}^{c \leq \alpha}(x) f(x), \quad \mathbb{1}^{x \leq y}(x) = \begin{cases} 1 & x \leq y \\ 0 & x > y. \end{cases} \quad (3.58)$$

Für den Fall $T = 0$ ist diese Approximation exakt, sie liefert für die Korrelationsfunktionen

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \alpha^{\frac{l+l'}{2}-1} \int_0^{\sqrt{\alpha}} dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \quad (3.59)$$

$$= Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \alpha^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{1}{2} \left[\ln \left(\frac{\alpha}{\tilde{\kappa}^2} + 1 \right) + \frac{1}{\frac{\alpha}{\tilde{\kappa}^2} + 1} - 1 \right]. \quad (3.60)$$

Wegen $\frac{n_e \Lambda_e^3}{2} = I_{1/2}(\alpha) \rightarrow \frac{\alpha^{3/2}}{\Gamma(5/2)}$ folgt:

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \alpha^{\frac{l+l'-5}{2}} \frac{1}{2} \left[\ln \left(\frac{\alpha}{\tilde{\kappa}^2} + 1 \right) - \frac{1}{\frac{\alpha}{\tilde{\kappa}^2} + 1} \right]. \quad (3.61)$$

Gl. (3.59) lässt sich auf beliebige Potentiale verallgemeinern.

Im Bereich idealer Plasma ($\Gamma < 1$) können die Ionen in guter Näherung als gleichverteilt angenommen werden ($S_{ii} = 1$), ist das System jedoch stark gekoppelt ($\Gamma > 1$), bilden die

Ionen eine Struktur aus ($S_{ii} \neq 1$). Wird ein Ion-Ion Strukturfaktor $S_{ii}(q)$ berücksichtigt, folgt aus Gl. (3.51), wobei $|V_D^{ei}(q)|^2 \rightarrow |V^{ei}(q)|^2 S_{ii}(q)$, analog

$$d_{ll'}^{ei,B} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \alpha^{\frac{l+l'}{2}-1} \int_0^{\sqrt{\alpha}} dQ Q^3 \left| \frac{\Omega_0 \epsilon_0}{Ze^2} \frac{8m}{\beta \hbar^2} V^{ei} \left(\sqrt{\frac{8m}{\beta \hbar^2}} Q \right) \right|^2 S_{ii} \left(\sqrt{\frac{8m}{\beta \hbar^2}} Q \right). \quad (3.62)$$

Unabhängig davon beträgt der Quotient

$$\frac{d_{1l}^{ei}}{d_{11}^{ei}} = \frac{d_{1l}}{d_{11}} = \frac{\alpha^{\frac{l}{2}-2}}{\alpha^{-\frac{3}{2}}} = \alpha^{\frac{l-1}{2}} = \frac{N_{1l}}{N_{11}}. \quad (3.63)$$

Für die elektrische Leitfähigkeit, Gl. (2.4), ergibt sich in L -Momenten Näherung, Gl. (2.48),

$$\begin{aligned} \sigma^{(L)} &= -\frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \begin{vmatrix} 0 & N_{11} & \cdots & N_{1L} \\ N_{11} & d_{11} & \cdots & d_{1L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ N_{L1} & d_{L1} & \cdots & d_{LL} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} d_{11} & \cdots & d_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{L1} & \cdots & d_{LL} \end{vmatrix} \\ &= -\frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \frac{N_{11} d_{11}}{d_{11}} \begin{vmatrix} 0 & \frac{N_{11}}{d_{11}} & N_{12} & \cdots & N_{1L} \\ 1 & 1 & d_{12} & \cdots & d_{1L} \\ \frac{N_{12}}{N_{11}} & \frac{d_{12}}{d_{11}} & d_{22} & \cdots & d_{2L} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{N_{1L}}{N_{11}} & \frac{d_{1L}}{d_{11}} & d_{2L} & \cdots & d_{LL} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} 1 & d_{12} & \cdots & d_{1L} \\ \frac{d_{12}}{d_{11}} & d_{22} & \cdots & d_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d_{1L}}{d_{11}} & d_{2L} & \cdots & d_{LL} \end{vmatrix} \\ &= -\frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} N_{11} \begin{vmatrix} 0 & \frac{N_{11}}{d_{11}} & N_{12} & \cdots & N_{1L} \\ 1 & 1 & d_{12} & \cdots & d_{1L} \\ \frac{d_{12}}{d_{11}} & \frac{d_{12}}{d_{11}} & d_{22} & \cdots & d_{2L} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d_{1L}}{d_{11}} & \frac{d_{1L}}{d_{11}} & d_{2L} & \cdots & d_{LL} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} 1 & d_{12} & \cdots & d_{1L} \\ \frac{d_{12}}{d_{11}} & d_{22} & \cdots & d_{2L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d_{1L}}{d_{11}} & d_{2L} & \cdots & d_{LL} \end{vmatrix} \\ &= \frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \frac{N_{11}^2}{d_{11}} \equiv \sigma^{(1)}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Die Ein-Moment Näherung konvergiert bereits. Der Einfluss höherer Momente des Energietransports $l > 1$ auf die elektrische Leitfähigkeit ist vernachlässigbar. Analytisch wurde Gl. (3.64) für die Zwei-Momenten Näherung von Reinholtz [Rei89] gezeigt. Auch numerisch ist dieses Ergebnis im Rahmen einer Mehr-Momenten Näherung numerisch bekannt, siehe [Rei89, KR00].

Gl. (3.64) entspricht mit d_{11} aus Gl. (3.62) der aus der kinetischen Theorie bekannten Ziman-Formel [Zim61, Fab72]. Da $d_{1l}^{ee} = 0$ spielen automatisch auch Elektron-Elektron Stöße im hochentarteten Bereich keine Rolle. Zu bemerken bleibt, dass Gl. (3.63) eine Folge der Sommerfeld-Entwicklung ist, und somit Gl. (3.64) unabhängig von Strukturfaktor und Potential gilt.

Klassischer Grenzfall und Brooks-Herring-Formel

Im nichtentarteten Grenzfall $\alpha \ll 0$ gehen die Fermi-Verteilungen in Boltzmann-Verteilungen über. Es gilt

$$f^e(x) \approx -\frac{df^e(x)}{dx} \approx \frac{n_e \Lambda_e^3}{2} e^{-x}. \quad (3.65)$$

Die Elektron-Ion Korrelationsfunktionen vereinfachen sich zu

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \int_{Q^2}^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}-1} e^{-x}. \quad (3.66)$$

Als Satz relevanter Observablen werden die Momente \mathbf{P}_l mit $l, l' \in \mathbb{N}$ betrachtet. Damit gilt $\frac{l+l'}{2} \in \mathbb{N}$ oder $\frac{l+l'+1}{2} \in \mathbb{N}$. Zur besseren Übersicht werden die Berechnungen für beide Fälle separat durchgeführt. Zuvor wird jedoch eine Hilfsfunktion eingeführt:

$$F(a^2, t) = (a^2)^{-t} e^{a^2} \int_{a^2}^\infty du u^t e^{-u}. \quad (3.67)$$

Diese Funktion besitzt folgende Eigenschaften:

$$F(a^2, t) = 1 + t (a^2)^{-1} F(a^2, t-1), \quad (3.68)$$

$$F(a^2, -2) = a^2 + \text{Ei}(-a^2) e^{a^2} (a^2)^2, \quad (3.69)$$

$$F(a^2, t > -1) = \Gamma(t+1) (a^2)^{-t} \mathbf{e}_t^{a^2}, \quad (3.70)$$

$$\mathbf{e}_t^{a^2} = \begin{cases} \sum_{k=0}^t \frac{(a^2)^k}{\Gamma(k+1)} & t \in \mathbb{N} \\ \text{erfc}(\sqrt{a^2}) e^{a^2} + \sum_{k=1}^{t+\frac{1}{2}} \frac{(a^2)^{k-\frac{1}{2}}}{\Gamma(k+\frac{1}{2})} & t + \frac{1}{2} \in \mathbb{N}, \end{cases} \quad (3.71)$$

und ist mit der Integralexponentialfunktion verwandt

$$\text{Ei}(x) = - \int_{-x}^\infty dt \frac{e^{-t}}{t}, \quad (3.72)$$

$$= \ln|x| + \gamma + \mathcal{O}(x), \quad (3.73)$$

wobei $\gamma \approx 0,577$ die Euler-Mascheroni Konstante ist.

Fall: $\frac{l+l'}{2} \in \mathbb{N}$

Für diesen Fall gilt:

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \sum_{k=0}^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{1}{\Gamma(k+1)} \int_0^\infty dQ \frac{Q^{3+2k}}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} e^{-Q^2}. \quad (3.74)$$

Nach Substitution $Q^2 + \tilde{\kappa}^2 = u$ und Anwendung des binomischen Lehrsatzes kann das Integral

über eine Summe, bestehend aus Termen der Hilfsfunktion, dargestellt werden

$$d_{ll'}^{\text{ei,B}} = \frac{Zd}{2} \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \sum_{k=0}^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{(\tilde{\kappa}^2)^{k-1}}{\Gamma(k+1)} \sum_{t=0}^{k+1} \binom{k+1}{t} (-1)^t F\left(\tilde{\kappa}^2, k-t-1\right) \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{Zd}{2} \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ - \left[1 + e^{\tilde{\kappa}^2} \text{Ei}(-\tilde{\kappa}^2) (1 + \tilde{\kappa}^2) \right] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{1}{\Gamma(k+1)} (\tilde{\kappa}^2)^{k-1} \left[(-1)^{k+1} \tilde{\kappa}^2 \left\{ 1 + e^{\tilde{\kappa}^2} \text{Ei}(-\tilde{\kappa}^2) (k+1 + \tilde{\kappa}^2) \right\} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{t=0}^{k-1} \binom{k+1}{t} (-1)^t F\left(\tilde{\kappa}^2, k-t-1\right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Entwickelt nach kleinen Dichten ($\tilde{\kappa} \ll 1$) liefert die untere Grenze der hinteren Reihe ($t=0$) den führenden Beitrag, siehe Gl. (3.70). Mit Gl. (3.73) folgt

$$d_{ll'}^{\text{ei,B}} = Zd \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ -\frac{1}{2} [\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{1}{k} \right\} + \mathcal{O}[\tilde{\kappa}^2 \ln(\tilde{\kappa}^2)]. \quad (3.77)$$

Dieses Ergebnis entspricht bereits bekannten Resultaten von Röpke *et al.* [Rö88, RR89, RRMK90]. Anstelle des Parameters $\tilde{\kappa}^2$ wird häufig der sogenannte Born-Parameter ζ verwendet, im Niederdrückegrenzfall gilt

$$\tilde{\kappa}^2 = \frac{\beta \hbar^2}{8m} (\kappa_e^2 + \kappa_i^2) \rightarrow \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\beta^2 e^2 n_e (1+Z)}{\epsilon_0} = \frac{1+Z}{2} \left(\frac{2}{3\pi^2} \right)^{1/3} \frac{\Gamma}{\Theta} =: \frac{1+Z}{2} \zeta. \quad (3.78)$$

Der Born-Parameter ist damit ein charakteristisches Maß für die Korrelationsfunktionen in Born'scher Näherung. Speziell die Kraft-Kraft Korrelationsfunktion d_{11} steht dabei im Verhältnis zum Coulomb-Logarithmus \mathcal{L}^{BH} nach Brooks-Herring [Bro51, Bla57], siehe auch [Rö88]

$$\mathcal{L}_{\text{BH}} = \frac{d_{11}^{\text{B}}}{Zd} = -\frac{1}{2} \ln \left[\ln \left(\frac{1+Z}{2} \zeta \right) + \gamma + 1 \right]. \quad (3.79)$$

Fall: $\frac{l+l'+1}{2} \in \mathbb{N}$

Für diesen Fall folgt aus den Gln. (3.66)-(3.71)

$$d_{ll'}^{\text{ei,B}} = Zd \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \int_0^\infty dQ \frac{Q^3 e^{-Q^2}}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \left[\text{erfc}\left(\sqrt{Q^2}\right) e^{Q^2} + \sum_{k=1}^{\frac{l+l'}{2}-1} \frac{(Q^2)^{k-\frac{1}{2}}}{\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)} \right]. \quad (3.80)$$

Nach partieller Integration lässt sich der erste Term nach $\tilde{\kappa}$ bis zum konstanten Term entwickeln

$$\int_0^\infty dQ \frac{Q^3 \text{erfc}(\sqrt{Q^2})}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} = -\frac{1}{2} [1 + \ln(\tilde{\kappa}^2)] + \int_0^\infty dQ \left[\frac{\tilde{\kappa}^2}{\tilde{\kappa}^2 + Q^2} + \ln(Q^2 + \tilde{\kappa}^2) \right] \frac{e^{-Q^2}}{\sqrt{\pi}} \quad (3.81)$$

$$= -\frac{1}{2} [1 + \ln(\tilde{\kappa}^2)] + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dQ \ln(Q^2) e^{-Q^2} + \mathcal{O}(\tilde{\kappa}) \quad (3.82)$$

$$= -\frac{1}{2} [\ln(\tilde{\kappa}^2) + 1 + \gamma + 2 \ln(2)] + \mathcal{O}(\tilde{\kappa}). \quad (3.83)$$

Im zweiten Term der Gl. (3.80) wird $Q^2 + \tilde{\kappa}^2 = u$ substituiert und der binomische Lehrsatz mit den verallgemeinerten Binomialkoeffizienten $\binom{n}{k} = \frac{1}{\Gamma(k+1)} \prod_{j=0}^{k-1} (n-j)$, $\forall k \in \mathbb{N} \wedge n \in \mathbb{R}$ angewandt. Es folgt

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} &= \frac{Zd}{2} \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ -\left[\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1\right] - 2\ln(2) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{\frac{l+l'-1}{2}} \frac{e^{\tilde{\kappa}^2}}{\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)} \sum_{t=0}^{\infty} \binom{k+\frac{1}{2}}{t} (-\tilde{\kappa}^2)^t \int_{\tilde{\kappa}^2}^{\infty} du u^{-\frac{3}{2}+k-t} e^{-u} \right\} + \mathcal{O}(\tilde{\kappa}). \end{aligned} \quad (3.84)$$

Das auftretende Integral kann ebenfalls über die Hilfsfunktion ausgedrückt werden

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} &= \frac{Zd}{2} \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ -\left[\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1\right] - 2\ln(2) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^{\frac{l+l'-1}{2}} \frac{1}{\Gamma\left(k+\frac{1}{2}\right)} (\tilde{\kappa}^2)^{k-\frac{3}{2}} \sum_{t=0}^{\infty} \binom{k+\frac{1}{2}}{t} (-1)^t F\left(\tilde{\kappa}^2, k-t - \frac{3}{2}\right) \right\} + \mathcal{O}(\tilde{\kappa}). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Entwickelt nach kleinen Dichten ($\tilde{\kappa} \ll 1$) liefert die untere Grenze der hinteren Reihe ($t = 0$) den führenden Beitrag, siehe Gl. (3.70). Es folgt

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ -\frac{1}{2} \left[\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1 \right] - \ln(2) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\frac{l+l'-1}{2}-1} \frac{1}{k-\frac{1}{2}} \right\} + \mathcal{O}(\tilde{\kappa}). \quad (3.86)$$

Gemeinsam mit Gl. (3.77) lässt sich die Elektron-Ion Korrelationsfunktion im Niederdichtegrenzfall kompakt schreiben als

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{B}} = Zd \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ -\frac{1}{2} \left[\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1 \right] + \frac{1}{2} H_{\frac{l+l'}{2}-1} \right\}, \quad (3.87)$$

mit den verallgemeinerten harmonischen Zahlen:

$$H_t = \int_0^1 \frac{1-x^t}{1-x} dx = \begin{cases} \sum_{k=1}^t \frac{1}{k} & t \in \mathbb{N} \\ -2\ln(2) + \sum_{k=1}^{t-\frac{1}{2}} \frac{2}{2k-1} & t + \frac{1}{2} \in \mathbb{N} \end{cases}. \quad (3.88)$$

Im Niederdichtegrenzfall ($\tilde{\kappa} \ll 1, \ln(\tilde{\kappa}) \gg 1$) gilt für den Quotienten

$$\frac{d_{4l}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} = \Gamma\left(\frac{l}{2} + 2\right) = \Gamma(5/2) \frac{N_{1l}}{N_{11}}. \quad (3.89)$$

Desweiteren ist das Verhältnis der Elektron-Elektron Korrelationen zu den Elektron-Ion Korrelationen umgekehrt proportional zur Ionenladung ($d_{4l}^{\text{ee}}/d_{11}^{\text{ei}} \propto Z^{-1}$). Bei Plasmen mit großen Ionenladungen ($Z \gg 1$), z.B. staubige Plasmen, können Elektron-Elektron Stöße vernachlässigt werden (Lorentz-Modell). In diesem Fall folgt für die elektrische Leitfähigkeit,

Gl. (2.4), in L -Momenten Näherung, Gl. (2.48),

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{ei}}^{(L)} &= -\frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \begin{vmatrix} 0 & N_{11} & \cdots & N_{1L} \\ N_{11} & d_{11}^{\text{ei}} & \cdots & d_{1L}^{\text{ei}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ N_{1L} & d_{1L}^{\text{ei}} & \cdots & d_{LL}^{\text{ei}} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} d_{11}^{\text{ei}} & \cdots & d_{1L}^{\text{ei}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{1L}^{\text{ei}} & \cdots & d_{LL}^{\text{ei}} \end{vmatrix} \\
&= \frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \frac{-N_{11}}{\Gamma(5/2)} \begin{vmatrix} 0 & N_{11} & \cdots & \frac{N_{14}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & N_{1L} \\ \frac{\Gamma(5/2)N_{11}}{N_{11}} & d_{11}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{14}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{1L}^{\text{ei}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\Gamma(5/2)N_{1L}}{N_{11}} & d_{1L}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{4L}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{LL}^{\text{ei}} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} d_{11}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{14}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{1L}^{\text{ei}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{1L}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{4L}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{LL}^{\text{ei}} \end{vmatrix} \\
&= \frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \frac{N_{11}}{\Gamma(5/2)} \begin{vmatrix} \frac{N_{14}}{d_{11}^{\text{ei}}} & N_{11} & \cdots & 0 & \cdots & N_{1L} \\ \frac{d_{14}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & d_{11}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{14}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{1L}^{\text{ei}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{d_{4L}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & d_{1L}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{4L}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{LL}^{\text{ei}} \end{vmatrix} / \begin{vmatrix} d_{11}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{14}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{1L}^{\text{ei}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ d_{1L}^{\text{ei}} & \cdots & \frac{d_{4L}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} & \cdots & d_{LL}^{\text{ei}} \end{vmatrix} \\
&= \frac{e^2 \beta}{m^2 \Omega_0} \frac{N_{11} N_{14}}{\Gamma(5/2) d_{11}^{\text{ei}}} \equiv \sigma^{(1)} \frac{32}{3\pi}. \tag{3.90}
\end{aligned}$$

Das Ergebnis weicht von der Ziman-Formel um einen Faktor $\frac{32}{3\pi} \approx 3,4$ ab. In der kinetischen Theorie ist dieses Ergebnis als Brooks-Herring-Formel bekannt [Bro51, Bla57]. Sie wird somit ebenfalls aus dem Zugang der Linearen-Response Theorie erhalten.

Die Determinanten, die zur Berechnung anderer Transportkoeffizienten nötig sind, führen ebenfalls zu analytischen Werten. Auch für die Thermokraft wird ein konvergiertes Resultat erhalten, sofern das vierte Moment berücksichtigt wird. Es gilt

$$\alpha_{\text{ei}}^{(L)} = -\frac{3k_B}{2e}. \tag{3.91}$$

Anders als bei der elektrischen Leitfähigkeit und der Thermokraft, ist für die Wärmeleitfähigkeit das vierte und das sechste Moment zu berücksichtigen, um ein konvergiertes Lorentz-Resultat zu erhalten. Das liegt mathematisch daran, da die Einträge der ersten Spalte des Onsager-Koeffizienten L_{22} zwei Beiträge enthalten. Bei zusätzlicher Berücksichtigung des sechsten Moments wird eine Konvergenz wegen

$$\frac{d_{6l}^{\text{ei}}}{d_{11}^{\text{ei}}} = \Gamma\left(\frac{l}{2} + 3\right) = \Gamma(5/2) \frac{N_{3l}}{N_{11}}, \tag{3.92}$$

erreicht. Für die Wärmeleitfähigkeit im Lorentz-Modell gilt im Niederdruckgrenzfall

$$\lambda_{\text{ei}}^{(L)} = 4 \frac{k_B^2}{e^2} T \sigma_{\text{ei}}^{(L)} = \frac{128 k_B^2}{3\pi e^2} T \sigma_{\text{ei}}^{(1)}. \tag{3.93}$$

Die Beziehung $\lambda_{\text{ei}}^{(L)} \propto (k_B/e)^2 T \sigma_{\text{ei}}^{(L)}$ stellt das empirisch ermittelte Wiedemann-Franz Gesetz dar [WF53]. Der dimensionslose Proportionalitätsfaktor wird als Lorentz-Zahl L bezeichnet. Bereits für Metalle wurde er mittels der Sommerfeld-Entwicklung berechnet $L = \pi^2/3$, siehe [AM76]. Auch im Rahmen der Linearen-Response Theorie wird dieser Wert im hochentarteten Grenzfall erhalten, siehe [Rei89]. Für Lorentz-Plasmen beträgt die Lorentz-Zahl $L_{\text{ei}} = 4$, gemäß Gl. (3.93). Demnach gilt für Lorentz-Plasmen, dass ein guter Stromleiter auch ein guter Wärmeleiter ist. In Abs. 4.2.1 wird der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße untersucht.

3.4.2 Dynamische Abschirmeffekte in Random-Phase-Approximation

Die Abschirmung des Coulomb-Potentials erfolgt über die dielektrische Funktion $\epsilon(q, \omega)$. In niedrigster Ordnung der Störungstheorie wird die dielektrische Funktion in der Random-Phase-Approximation (RPA) ausgewertet. Im semiklassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ konnte die Abschirmung über den inversen Abschirmradius κ , Gl. (3.46), beschrieben werden.

Jenseits dieser Näherung ist der Imaginärteil der dielektrischen Funktion in RPA geschlossen darstellbar, wohingegen der Realteil über ein Integral gegeben ist [AB84]:

$$\begin{aligned} \epsilon^{\text{RPA}}(q, \omega) = 1 + \sum_c \frac{e_c^2 m_c^2 (2s_c + 1)}{2\pi^2 \epsilon_0 \beta \hbar^4 q^3} \int_0^\infty dz \frac{z}{e^{z^2 - \alpha_c} + 1} \ln \left[\frac{(\nu_c + Q_c) + z}{(\nu_c + Q_c) - z} \frac{(\nu_c - Q_c) - z}{(\nu_c - Q_c) + z} \right] \\ + i \sum_c \frac{e_c^2 m_c^2 (2s_c + 1)}{4\pi \epsilon_0 \beta \hbar^4 q^3} \ln \left| \frac{1 + e^{-(Q_c - \nu_c)^2 + \alpha_c}}{1 + e^{-(Q_c + \nu_c)^2 + \alpha_c}} \right|, \end{aligned} \quad (3.94)$$

mit den dimensionslosen Größen $Q_c(q) = \sqrt{\frac{\beta \hbar^2}{8m_c}} q$ und $\nu_c(q, \omega) = \sqrt{\frac{m_c \beta}{2}} \frac{\omega}{q}$. Im nichtentarteten Grenzfall $\alpha_c \ll 0$ vereinfacht sich die dielektrische Funktion

$$\begin{aligned} \epsilon^{\text{RPA}}(q, \omega) = 1 + \sum_c \frac{\kappa_c^2}{q^2} \frac{1}{2Q_c} \left\{ [D(\nu_c + Q_c) - D(\nu_c - Q_c)] \right. \\ \left. - i \frac{\sqrt{\pi}}{2} [e^{-(\nu_c + Q_c)^2} - e^{-(\nu_c - Q_c)^2}] \right\}, \end{aligned} \quad (3.95)$$

mit den Dawson-Integralen $D(x) = e^{-x^2} \int_0^x dt e^{t^2}$.

Die Elektron-Ion Korrelationsfunktion lautet

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei,LB}} = \frac{2\pi\hbar}{3} (2s_i + 1) \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\hbar\omega) \left| \frac{V_C^{\text{ei}}(q)}{\epsilon^{\text{RPA}}(q, \omega)} \right|^2 \delta(\hbar\omega - E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}} + E_{k_1}^{\text{e}}) f_{k_1}^{\text{e}} f_{k_2}^{\text{i}} \\ \times (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}}) (1 \pm f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^{\text{i}}) \delta(\hbar\omega - E_{k_2}^{\text{i}} + E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^{\text{i}}) \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.96)$$

Im Gegensatz zum vorherigen Abschnitt 3.4.1 ist die adiabatische Näherung aufgrund der frequenzabhängigen dielektrischen Funktion nicht trivial. Die Ionen können allerdings weiterhin klassisch behandelt werden, es gilt $f_{k_2}^{\text{i}}(1 \pm f_{k_2}^{\text{i}}) \simeq f_{k_2}^{\text{i}} = e^{-\frac{\beta \hbar^2}{2m_i} k_2^2} n_i \Lambda_i^3 / (2s_i + 1)$, sodass

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei,LB}} = \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{n_e \Lambda_i^3}{Z} \frac{2\pi \Omega_0^3}{(2\pi)^9} \int d^3 \mathbf{q} \int d^3 \mathbf{k}_1 \int_0^\infty dk_2 k_2^2 \int_{-1}^1 dz_{k_2} \int_{-\infty}^\infty d(\hbar\omega) \left| \frac{V_C^{\text{ei}}(q)}{\epsilon^{\text{RPA}}(q, \omega)} \right|^2 \\ \times e^{-\frac{\beta \hbar^2}{2m_i} k_2^2} \delta(\hbar\omega - E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}} + E_{k_1}^{\text{e}}) \frac{m_i}{\hbar^2 k_2 q} \delta(z_{k_2} - \frac{\hbar\omega m_i}{\hbar^2 k_2 q} - \frac{q}{2k_2}) \\ \times f_{k_1}^{\text{e}} (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}}) \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.97)$$

Die Integration über z_{k_2} liefert die Bedingung $k_2 \geq \left| \frac{\hbar\omega m_i}{\hbar^2 q} + \frac{q}{2} \right|$. Das Integral über k_2 wird ausgeführt

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei,LB}} = \frac{4\pi\hbar}{3} \frac{n_e \Lambda_i^3}{Z} \frac{m_i^2}{\beta \hbar^4} \frac{\Omega_0^3}{(2\pi)^6} \int_0^\infty dq q^2 \int_0^\infty dk_1 k_1^2 \int_{-1}^1 dz_{k_1} \int_{-\infty}^\infty d(\hbar\omega) \frac{1}{q} \left| \frac{V_C^{\text{ei}}(q)}{\epsilon^{\text{RPA}}(q, \omega)} \right|^2 f_{k_1}^{\text{e}} \\ \times (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}}) \delta(\hbar\omega - E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}} + E_{k_1}^{\text{e}}) \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) e^{-\frac{\beta \hbar^2}{2m_i} \left(\frac{\hbar\omega m_i}{\hbar^2 q} + \frac{q}{2} \right)^2}, \end{aligned} \quad (3.98)$$

wobei z_{k_1} der Kosinus des Winkels zwischen \mathbf{k}_1 und \mathbf{q} ist. Nach der Substitution $\nu_i = \sqrt{\frac{m_i \beta}{2}} \frac{\omega}{q}$, $Q = \sqrt{\frac{\beta h^2}{8m}} q$ und $x = \beta E_{k_1}^e$ vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei},\text{LB}} &= Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dQ \frac{1}{Q^3} \int_0^\infty dx \int_{-1}^1 dz_{k_1} \int_{-\infty}^\infty d\nu_i \left| \frac{1}{\epsilon^{\text{RPA}}(q(Q), \omega(Q, \nu_i))} \right|^2 \\ &\times e^{-(\nu_i - \sqrt{\gamma_{ei}} Q)^2} \delta \left(z_{k_1} + \frac{Q}{\sqrt{x}} - \frac{\nu_i \sqrt{\gamma_{ei}}}{4\sqrt{x}} \right) \frac{1}{e^{x-\alpha} + 1} \frac{e^{x+4Q\nu_i\sqrt{\gamma_{ei}}-\alpha}}{e^{x+4Q\nu_i\sqrt{\gamma_{ei}}-\alpha} + 1} \\ &\times \left\{ \frac{x}{4} x^{\frac{l+l'}{2}-1} + \left(\frac{x}{4} + \sqrt{x} Q z_{k_1} + Q^2 \right) (x + 4Q\nu_i\sqrt{\gamma_{ei}})^{\frac{l+l'}{2}-1} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{x}{4} + \frac{\sqrt{x}}{2} Q z_{k_1} \right) \left[x^{\frac{l-1}{2}} (x + 4Q\nu_i\sqrt{\gamma_{ei}})^{\frac{l'-1}{2}} + x^{\frac{l'-1}{2}} (x + 4Q\nu_i\sqrt{\gamma_{ei}})^{\frac{l-1}{2}} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.99)$$

wobei $\gamma_{ei} = m/m_i$ ist. Der adiabatische Grenzfall $\gamma_{ei} \rightarrow 0$ wird nun konsistent durchgeführt

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ei},\text{LB}} &= Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \int_0^\infty dQ \frac{1}{Q} \int_{Q^2}^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}-1} \left[-\frac{d(e^{x-\alpha} + 1)^{-1}}{dx} \right] \\ &\times \int_{-\infty}^\infty d\nu_i \left| \frac{1}{\epsilon^{\text{RPA}}(q(Q), \omega(Q, \nu_i))} \right|^2 \frac{e^{-\nu_i^2}}{\sqrt{\pi}}, \end{aligned} \quad (3.100)$$

mit der dielektrischen Funktion in RPA ($\gamma_{ei} \rightarrow 0$):

$$\begin{aligned} \epsilon^{\text{RPA}}(q(Q), \omega(Q, \nu_i)) &= \epsilon^{\text{RPA,e}}(Q, 0) + \frac{\tilde{\kappa}_i^2}{Q^2} [1 - 2\nu_i D(\nu_i)] + i\sqrt{\pi} \frac{\tilde{\kappa}_i^2}{Q^2} \nu_i e^{-\nu_i^2} \\ \epsilon^{\text{RPA,e}}(Q, 0) &= 1 + \frac{\sqrt{\Gamma^2 \Theta}}{4\pi Q^3} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \int_0^\infty dz \frac{z}{e^{z^2-\alpha} + 1} \ln \left| \frac{Q+z}{Q-z} \right|. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Die Elektron-Ion Wechselwirkung wird durch die Elektronen im System statisch abgeschirmt und durch die Ionen dynamisch. Die statische Abschirmung der Elektronen enthält im Vergleich zur Debye-Abschirmung eine komplexere Abhängigkeit in q bzw. Q , welche jedoch im langwelligen Grenzfall $Q \rightarrow 0$ verschwindet. Es gilt

$$\epsilon^{\text{RPA,e}}(Q \rightarrow 0, 0) = 1 + \frac{\tilde{\kappa}_e^2}{Q^2}. \quad (3.102)$$

Wird zudem die dynamische Abschirmung der Ionen durch die statische Abschirmung ersetzt ($\nu_i = 0$ in ϵ^{RPA}), geht Gl. (3.100) in Gl. (3.55) aus dem vorherigen Abschnitt 3.4.1 über.

Jenseits der statischen Näherung kann Gl. (3.100) weiter vereinfacht werden. Mit Hilfe der Identität [ORD62],

$$\int_{-\infty}^\infty dz \frac{e^{-z^2}}{[\tau^2 + 1 - 2zD(z)]^2 + [\sqrt{\pi}ze^{-z^2}]^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\tau^2 (1 + \tau^2)}, \quad (3.103)$$

ist die Integration über ν_i in Gl. (3.100) analytisch lösbar. Es folgt

$$d_{ll'}^{\text{ei},\text{LB}} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \int_0^\infty dQ \frac{1}{Q} \frac{1}{|\epsilon^{\text{RPA,e}}(Q, 0)|^2} S_{ii}^{\text{RPA}}(Q) \int_{Q^2}^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}-1} \left[-\frac{d(e^{x-\alpha} + 1)^{-1}}{dx} \right], \quad (3.104)$$

mit dem statischen Ion-Ion Strukturfaktor in RPA [KRRR13]:

$$S_{ii}^{\text{RPA}}(Q) = \frac{Q^2 \epsilon^{\text{RPA},e}(Q, 0)}{Q^2 \epsilon^{\text{RPA},e}(Q, 0) + \tilde{\kappa}_i^2}. \quad (3.105)$$

Im langwelligen Grenzfall $Q \rightarrow 0$ geht er in den Strukturfaktor nach Debye über [KSK05]:

$$S_{ii}^{\text{RPA}}(Q \rightarrow 0) = S_{ii}^{\text{D}}(Q) = \frac{Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2}{Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2 + \tilde{\kappa}_i^2}. \quad (3.106)$$

Eine Verallgemeinerung von Gl. (3.104) ist durch erweiterte Betrachtungen des Strukturfaktors, insbesondere auch der dielektrischen Funktion jenseits der RPA, möglich. Dies führt zu Stoßintegralen wie im vorigen Abschnitt 3.4.1, siehe Gl. (3.62).

Analog zum vorigen Abschnitt wird eine Entwicklung der Korrelationsfunktion für kleine Dichten durchgeführt. In diesem Grenzfall liegt der Hauptbeitrag des Integrals, Gl. (3.104) bei kleinen Werten von Q , siehe [KRRR13]. Für den Strukturfaktor, insbesondere für die dielektrische Funktion $\epsilon^{\text{RPA},e}(Q, 0)$ wird der langwellige Grenzfall, Gl. (3.102), verwendet, sodass

$$d_{ll'}^{\text{ei,LB}} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} e^\alpha \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2)(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)} \int_{Q^2}^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}-1} e^{-x}. \quad (3.107)$$

Nach einer Partialbruchzerlegung $(Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2)^{-1}(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^{-1} = \tilde{\kappa}_i^{-2} \left[(Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2)^{-1} - (Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^{-1} \right]$ können analoge Rechenschritte zu Abschnitt 3.4.1 durchgeführt werden. Die Elektron-Ion Korrelationsfunktion für ein dynamisch abgeschirmtes Coulomb-Potential lautet:

$$d_{ll'}^{\text{ei,LB}} = Zd \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \left\{ -\frac{1}{2} \left[\ln\left(\tilde{\kappa}_e^2\right) + \gamma + \left(1 + \frac{\tilde{\kappa}_e^2}{\tilde{\kappa}_i^2}\right) \ln\left(1 + \frac{\tilde{\kappa}_i^2}{\tilde{\kappa}_e^2}\right) \right] + \frac{1}{2} H_{\frac{l+l'}{2}-1} \right\}. \quad (3.108)$$

Dieses Ergebnis stimmt im führenden Dichteterm mit der Born'schen Näherung für ein statisch abgeschirmtes Coulomb-Potential (Debye-Potential), Gl. (3.87), überein. Die Differenz zwischen Gl. (3.108) und Gl. (3.87) beträgt

$$d_{ll'}^{\text{ei,LB}} - d_{ll'}^{\text{ei,B}} = d \Gamma\left(\frac{l+l'}{2}\right) \frac{Z - \ln(1+Z)}{2}. \quad (3.109)$$

Formal kann diese Differenz als Faktor des Abschirmparameters κ_e in den logarithmischen Term von Gl. (3.108) einfließen, sodass die dynamischen Abschirmeffekte über einen effektiven statischen Abschirmparameter $\kappa_{\text{eff}}^2 = b \cdot \kappa_e^2$ beschrieben werden. Dieses Vorgehen wurde in verschiedenen Arbeiten [RR89, KRRR13] für das Modell des vollständig ionisierten Wasserstoffs ($Z = 1$) beschrieben. Der effektive statische Abschirmparameter für die Elektron-Ion Korrelationsfunktion des Wasserstoffs lautet:

$$\kappa_{\text{eff}}^2 = b \cdot \kappa_e^2 = 1,4715 \cdot \kappa_e^2 = 1 \cdot \kappa_e^2 + 0,4715 \cdot \kappa_i^2. \quad (3.110)$$

Da $Z = 1$ und somit $\kappa_e^2 = \kappa_i^2$ wird dieses Resultat wie folgt interpretiert: Wird die Abschirmung der Ionen vernachlässigt ($\kappa_i^2 = 0$, $S_{ii} = 1$), ist die reine Elektronenabschirmung in Gl. (3.107) die Gleiche wie im Fall der statischen Abschirmung, Gl. (3.66). Die Elektronen

schirmen somit vollständig statisch ab, ihr Beitrag zum Faktor 1,4715 ist 1. Der übrige Beitrag 0,4715 wird den Ionen zugeschrieben. Die dynamische Abschirmung der Ionen wirkt sich also wie eine statische Abschirmung mit etwa der halben Stärke aus.

Um den Effekt der dynamischen Abschirmung im Vergleich zur statischen Abschirmung besser zu quantifizieren, wird eine effektive Abschirmung eingeführt

$$\left(\kappa_{\text{eff}}^{\text{ei}}\right)^2 = b_{\text{ei}}^{\text{e}} \kappa_{\text{e}}^2 + b_{\text{ei}}^{\text{i}} \kappa_{\text{i}}^2. \quad (3.111)$$

Der elektronische effektive Abschirmfaktor b_{ei}^{e} ist so definiert, dass die statische Born'sche Näherung, Gl. (3.55), mit dem Abschirmparameter $\kappa^2 \rightarrow b_{\text{ei}}^{\text{e}} \kappa_{\text{e}}^2$ der dynamischen Born'schen Näherung (Lenard-Balescu), Gl. (3.104), mit $S_{ii}^{\text{RPA}} \rightarrow 1$ entspricht. Der ionische effektive Abschirmfaktor b_{ei}^{i} ist analog definiert, dass die statische Born'sche Näherung, Gl. (3.55), mit dem Abschirmparameter $\kappa^2 \rightarrow b_{\text{ei}}^{\text{e}} \kappa_{\text{e}}^2 + b_{\text{ei}}^{\text{i}} \kappa_{\text{i}}^2$ mit der dynamischen Born'schen Näherung (Lenard-Balescu), Gl. (3.104), (nun $S_{ii}^{\text{RPA}} \neq 1$) übereinstimmt.

Durch diese Definitionen werden Abschirmeffekte in RPA für beliebige Dichten und Temperaturen über Abschirmfaktoren beschrieben. Im Niederdichtegrenzfall gilt, vgl. Gl. (3.108) mit Gl. (3.87)

$$\kappa^2 = 1 \cdot \kappa_{\text{e}}^2 + Z^{-1} \left[(1 + Z)^{1+Z^{-1}} e^{-1} - 1 \right] \cdot \kappa_{\text{i}}^2. \quad (3.112)$$

Für beliebige Plasmabedingungen hängen die Abschirmfaktoren allerdings von Dichte und Temperatur, und sind darüber hinaus im Allgemeinen für jede Korrelationsfunktion $d_{ll'}^{\text{ei}}$ verschieden. Die ionischen effektiven Abschirmfaktoren b_{ei}^{i} hängen zudem von der Ionenladungszahl Z ab.

Abb. 3.1 zeigt die effektiven Abschirmfaktoren in Abhängigkeit des Entartungsparameters Θ für verschiedene Temperaturen $T = 10^3 - 10^7$ K und Ionenladungszahlen $Z = 1; 2; 4; 16$ der Korrelationsfunktionen $d_{11}^{\text{ei}}, d_{13}^{\text{ei}}, d_{33}^{\text{ei}}$. Während die elektronischen Abschirmfaktoren für die unterschiedlichen Korrelationsfunktionen verschieden sind, besitzen die ionischen Abschirmfaktoren eine Z -Abhängigkeit. Für die ionischen Abschirmfaktoren wird festgestellt, dass bei unterschiedlichen Korrelationsfunktionen die Abweichungen unterhalb von 0,1% liegen. Sowohl die elektronischen als auch die ionischen Abschirmfaktoren weisen eine Temperaturabhängigkeit auf. Für höhere Temperaturen ist der Abschirmfaktor über einen großen Dichtebereich nahezu konstant. Das liegt daran, dass sich das Plasma für höhere Temperaturen ideal verhält, und somit Gl. (3.108) anwendbar ist. Im hochentarteten Grenzfall ($\Theta \ll 1$) geht der elektronische Abschirmfaktor gegen 1, und der ionische gegen 0, der Thomas-Fermi Grenzfall für ideale Quantengase wird realisiert.

In dieser Arbeit wurde für den elektronischen Abschirmfaktor über einen Temperaturbereich von $T = 10^3 - 10^7$ K folgende Fitformel konstruiert

$$b_{\text{ei},ll'}^{\text{e}} = \frac{1}{1 + 0,19 \sqrt{\frac{\Gamma\Theta}{1+\Theta^2}}} - \frac{A_{ll'}}{1 + 1,5\Theta^2} \frac{(\Gamma\Theta)^2}{1 + \Gamma^2\Theta}, \quad (3.113)$$

mit $A_{11} = 0,12$, $A_{13} = 0,28$ und $A_{33} = 0,43$. Die Abweichungen zu den numerischen Werten liegen unterhalb von 6%, siehe Abb. 3.1. Da der numerische Aufwand gering ist, wurde in dieser Arbeit auf die Verwendung der Fitformel verzichtet.

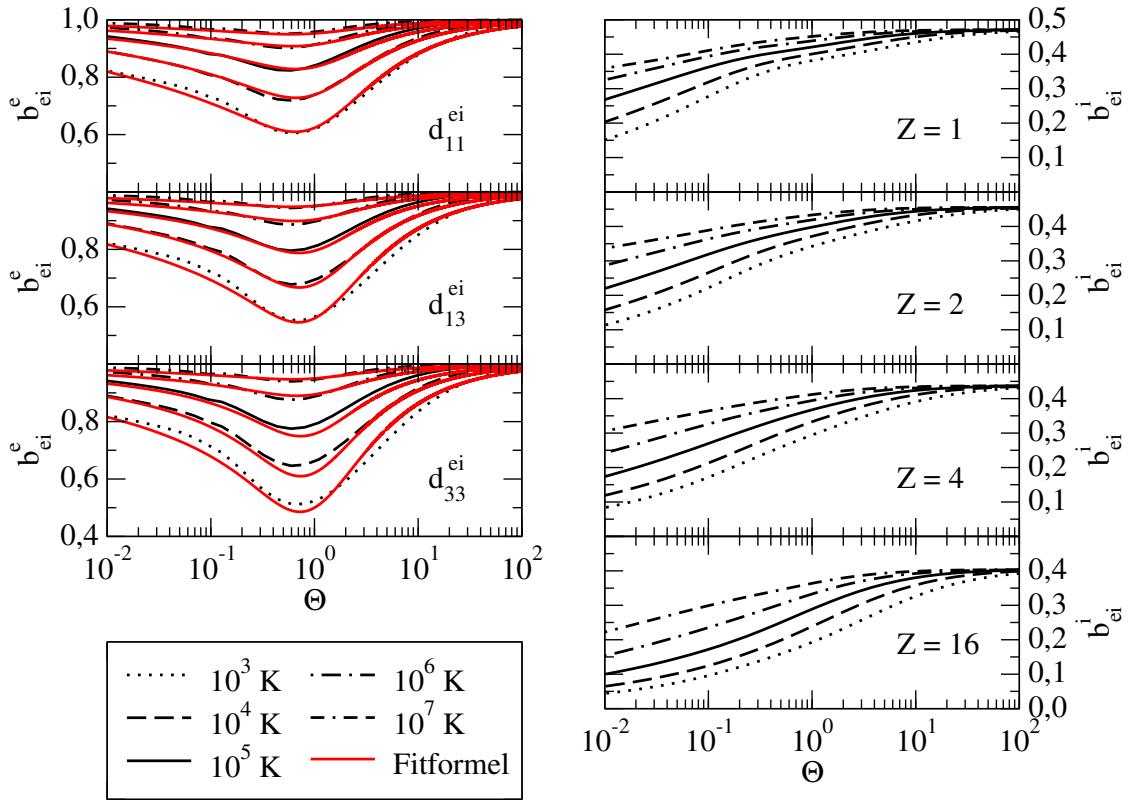


Abb. 3.1: Effektive Abschirmfaktoren in Abhängigkeit vom Entartungsparameter Θ bei verschiedenen Temperaturen $T = 10^3 - 10^7$ K. b_{ei}^e (links) wird für verschiedene Korrelationsfunktionen aufgetragen, b_{ei}^i (rechts) wird für verschiedene Ionenladungen $Z = 1; 2; 4; 16$ dargestellt.

3.4.3 Einfluss starker Stöße in der T-Matrix Näherung

In diesem Abschnitt werden die Effekte starker Stöße auf die Elektron-Ion Korrelationsfunktionen untersucht. Diese werden über die Transmissions-Matrix (T-Matrix) untersucht. In diesem Zusammenhang wird von der T-Matrix Näherung gesprochen. Die Wechselwirkung zwischen Elektronen und Ionen wird in diesem Abschnitt, analog zu Abs. 3.4.1, durch das Debye-Potential beschrieben. Es wird wieder von der adiabatischen Näherung Gebrauch gemacht $E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^i \simeq E_{k_2}^i$, und die Ionen werden klassisch behandelt $f_{k_2}^i (1 \pm f_{k_2}^i) \simeq f_{k_2}^i$. Mit $\sum_{\mathbf{k}_2, s_2} f_{k_2}^i = n_i \Omega_0 = n_e \Omega_0 / Z$ folgt

$$d_{ll'}^{\text{ei,TM}} = \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{n_e \Omega_0}{Z} \frac{\Omega_0^2}{(2\pi)^6} \int d^3\mathbf{k}_1 \int d^3\mathbf{k}'_1 |T_{ei}|^2 (\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}_1)^2 (\beta E_{k_1}^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} \times \delta(E_{k'_1}^e - E_{k_1}^e) f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e), \quad (3.114)$$

wobei $\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{q}$ der Impuls nach der Streuung ist. Der Winkel zwischen \mathbf{k}_1 und \mathbf{k}'_1 ist der Streuwinkel ϑ . Es werden Kugelkoordinaten eingeführt, der Vektor \mathbf{k}_1 wird parallel zur

z -Richtung gewählt und Vektor \mathbf{k}'_1 wird in die x - z -Ebene gelegt, sodass

$$d_{ll'}^{\text{ei,TM}} = \frac{2\pi\hbar n_e \Omega_0}{3} \frac{\Omega_0^2}{Z} \frac{2\pi}{(2\pi)^6} \int_0^\infty dk_1 k_1^2 \int_{-1}^1 d\cos(\vartheta) 4\pi \int_0^\infty dk'_1 k'_1 |T_{\text{ei}}|^2 \quad (3.115)$$

$$\begin{aligned} & \times 2k_1^2 [1 - \cos(\vartheta)] \frac{2m}{\hbar^2} \delta(k'^2 - k_1^2) f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e) (\beta E_{k_1})^{\frac{l+l'}{2}-1} \\ & = \frac{\hbar^3}{3\pi^2 m} \frac{n_e \Omega_0}{Z} \int_0^\infty dk_1 k_1^5 (\beta E_{k_1})^{\frac{l+l'}{2}-1} f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e) Q_{\text{T}}^{\text{ei}}(k), \end{aligned} \quad (3.116)$$

mit $\delta(k_1^2 - k'^2) = \frac{\delta(k_1 - k')}{2k_1}$. Der Transportquerschnitt ist allgemein gegeben durch ($c \neq e$)

$$Q_{\text{T}}^{\text{ec}}(k) = 2\pi \int_{-1}^1 d\cos(\vartheta) [1 - \cos(\vartheta)] \left(\frac{d\sigma^{\text{ec}}}{d\Omega} \right) \quad (3.117)$$

$$= 2\pi \frac{2}{k^2} \sum_{\ell=1}^{\infty} \ell \sin^2 [\delta_{\ell-1}^{\text{ec}}(k) - \delta_{\ell}^{\text{ec}}(k)], \quad (3.118)$$

wobei $\delta_{\ell}^{\text{ec}}$ die Streuphasen der ℓ -ten Partialwelle sind, gegeben durch die Lösung der Calogero Gleichung [Cal67]

$$\delta_{\ell}^{\text{ec}}(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} \tilde{\delta}_{\ell}^{\text{ec}}(r, k), \quad (3.119)$$

$$\frac{\partial \tilde{\delta}_{\ell}^{\text{ec}}}{\partial r} = -\frac{1}{k} \frac{2m_{\text{ec}}}{\hbar^2} V_{\text{ec}}(r) \left[kr j_{\ell}(kr) \cos \tilde{\delta}_{\ell}^{\text{ec}} - kr n_{\ell}(kr) \sin \tilde{\delta}_{\ell}^{\text{ec}} \right]^2, \quad \tilde{\delta}_{\ell}^{\text{ec}}(0, k) = 0, \quad (3.120)$$

mit den sphärischen Bessel- und Neumann Funktionen $j_{\ell}(x)$ und $n_{\ell}(x)$.

Der größte numerische Aufwand in Gl. (3.116) besteht in der Berechnung des Transportquerschnitts. Dieser Transportquerschnitt hängt neben der Wellenzahl des zu streuenden Elektrons k_1 von zwei Parametern ab: der Ionenladungszahl Z und dem Abschirmparameter κ . Durch Einführung folgender dimensionsloser Größen $M = 2Z/(\kappa a_0)$ und $K = k_1^2/\kappa^2$, kann eine Skalierung für den Transportquerschnitt vorgenommen werden, der allein von der Variablen K und dem Parameter M abhängt. Diese Skalierung des Transportquerschnittes $Q_{\text{T}}^{\text{ec}} = Q_{\text{T}}^{\text{ec}} a_0^2 \kappa^2 k_1^2 / (8\pi Z^2)$ wird im Folgenden verwendet. Nach der Substitution $x = \beta E_{k_1}^e$ folgt ($K = x/(4\tilde{\kappa}^2)$)

$$d_{ll'}^{\text{ei,TM}} = Zd \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \frac{1}{2\tilde{\kappa}^2} \int_0^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}} \frac{e^{\alpha-x}}{(1+e^{\alpha-x})^2} Q_{\text{T}}^{\text{ei}}(K(x), M). \quad (3.121)$$

Dieses Ergebnis ist eine Verallgemeinerung der Born'schen Näherung ($|T_{\text{ei}}|^2 = |V_{\text{ei}}|^2$) und wird aus Gl. (3.55) durch Vertauschen der Integrale direkt erhalten, wobei der Transportquerschnitt in Born'scher Näherung durch

$$Q_{\text{T}}^{\text{ei,B}}(K) = \frac{1}{4K} \left[\ln(1+4K) - \left(1 + \frac{1}{4K} \right)^{-1} \right], \quad (3.122)$$

gegeben ist, vgl. auch mit Gl. (3.49). Der Transportquerschnitt ist damit das geeignete Maß, die Relevanz starker Stöße und damit die Gültigkeit der Born'schen Näherung auf die Korrelationsfunktionen sowie auf die Transportgrößen zu untersuchen.

Allgemein ist der Transportquerschnitt durch Gl. (3.117) bestimmt und besteht aus zwei Anteilen. Der erste Term der eckigen Klammer liefert den totalen Wirkungsquerschnitt der Elektron-Ion Stöße, der zweite Term betrachtet eine explizite Winkelabhängigkeit. Diese Winkelabhängigkeit ist für die Beschreibung des Transports essentiell, da nicht jeder Stoß den Stromfluss gleichermaßen beeinflusst. Bei einem kleinen Streuwinkel ($\vartheta \approx 0$) wird das Elektron kaum abgelenkt und der Transport nicht beeinflusst, die eckige Klammer verschwindet; hingegen bei Streuungen um 180° wird das Elektron zurückgeworfen und der Transport maximal gehemmt, die eckige Klammer wird 2.

3.4.4 T-Matrix Effekte für beliebige Entartung des Elektronensystems

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Entartung innerhalb der T-Matrix abgeschätzt. Für beliebige Dichten ist die Zwei-Teilchen T-Matrix gegeben durch [KKER86]

$$T_2^\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}) = V(q) + \sum_{q'} V(q') \frac{1 - (f_{k_1}^e \pm f_{k_2}^i)}{\Delta E^{ei} \pm i\varepsilon} T_2^\pm(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}'|, |\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}'|, |\mathbf{q}' - \mathbf{q}|). \quad (3.123)$$

Im nichtentarteten Fall ($\Theta > 1$) gilt $1 - f_{k_1}^e \mp f_{k_2}^i \approx 1$. Die T-Matrix kann im Schwerpunktssystem durch den differentiellen Wirkungsquerschnitt ausgedrückt werden, Gl. (3.49). Es stellt sich allerdings die Frage, wie sich die T-Matrix verhält, wenn das Elektronensystem entartet ist ($\Theta < 1$). Dazu werden die Ionen weiterhin klassisch behandelt, sodass $1 \pm f_{k_2}^i \approx 1$. Nach Durchführung der adiabatischen Näherung ($E_{k_2}^i \approx E_{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}'|}^i$) folgt

$$T_{ad}^\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) = V(q) + [1 - f_{k_1}^e] \sum_{q'} V(q') \frac{1}{E_{k_1}^e - E_{|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}'|}^e \pm i\varepsilon} T_{ad}^\pm(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}'|, |\mathbf{q}' - \mathbf{q}|). \quad (3.124)$$

Der Unterschied zwischen adiabatischer und nichtentarteter Ein-Teilchen T-Matrix ist in der Ordnung einer Fermi-Funktion $T_{ad}^\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) = T_1^\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathcal{O}(f_{k_1}^e V^2)$. Eingesetzt in die rechte Seite von Gl. (3.124) führt das auf

$$\begin{aligned} T_{ad}^\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) &= V(q) + [1 - f_{k_1}^e] \sum_{q'} V(q') \frac{1}{E_{k_1}^e - E_{|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}'|}^e \pm i\varepsilon} [T_1^\pm(|\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}'|, |\mathbf{q}' - \mathbf{q}|) + \mathcal{O}(f_{k_1}^e V^2)] \\ &\quad + f_{k_1}^e V(q) - f_{k_1}^e V(q) \\ &= f_{k_1}^e V(q) + [1 - f_{k_1}^e] T_1^\pm(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathcal{O}[f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e) V^3]. \end{aligned} \quad (3.125)$$

Für das Betragsquadrat gilt dann

$$|T_{ad}|^2 = (f_{k_1}^e)^2 |V|^2 + (1 - f_{k_1}^e)^2 |T_1|^2 + 2f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e) |V|^2 + \mathcal{O}[f_{k_1}^e (1 - f_{k_1}^e) V^3] \quad (3.126)$$

$$|T_{ad}|^2 \approx \frac{4\pi^2 \hbar^4}{m^2 \Omega_0^2} \left\{ f_{k_1}^e (2 - f_{k_1}^e) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_B + (1 - f_{k_1}^e)^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \right\}. \quad (3.127)$$

Die adiabatische T-Matrix kann somit durch eine Kombination aus differentiellen Wirkungsquerschnitten, gewichtet mit Fermi-Funktionen, angegeben werden. Für $T = 0$ ist die Formel exakt.

Der Einfluss der T-Matrix unter Berücksichtigung von Entartungeffekten wird in Abb. 3.2 dargestellt. Für zwei Temperaturen $T = 10^4; 10^6$ K ist die Kraft-Kraft Korrelationsfunktion d_{11} in Einheiten von d , Gl. (3.56), über den Entartungsparameter aufgetragen. Dabei

wurde die Born'schen Näherung mit Rechnungen der nichtentarteten T-Matrix, Gl. (3.49), und der entarteten T-Matrix, Gl. (3.127), verglichen. Im Niederdichtegrenzfall ($f_k^e \ll 1$) sind Entartungseffekte vernachlässigbar, Gl. (3.127) geht in Gl. (3.49) über. Im entarteten Grenzfall $\Theta \ll 1$ gehen die T-Matrix Rechnungen in die Born'sche Näherung über. Es ist deutlich erkennbar, dass die Entartungseffekte in der T-Matrix zu einem früheren Erreichen der Born'schen Näherung führen. Bei tiefen Temperaturen ist der Effekt deutlich erkennbar. Für hohe Temperaturen spielen starke Stöße ohnehin eine untergeordnete Rolle, die Born'sche Näherung wird gültig.

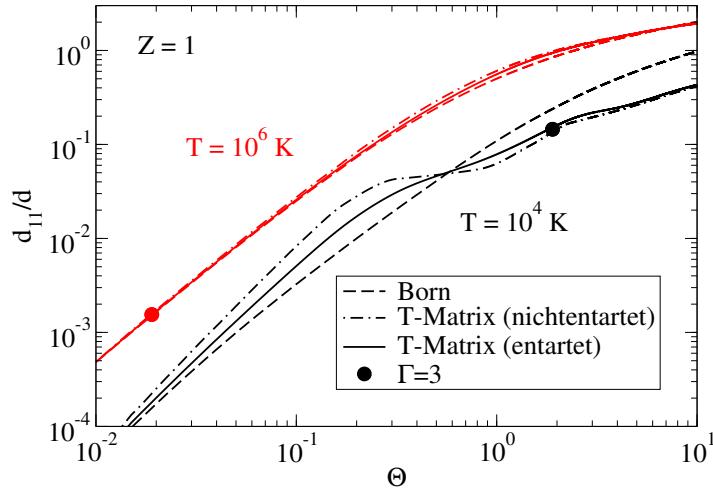


Abb. 3.2: Kraft-Kraft Korrelationsfunktion d_{11} in Einheiten von d , Gl. (3.56), in Abhängigkeit vom Entartungsparameter Θ bei $T = 10^4$ K (schwarz) und $T = 10^6$ K (rot). Ergebnisse der Born'schen Näherung (gestrichelt) werden mit T-Matrix Rechnungen (nichtentartet: Strich-Punkt-Linie, entartet: durchgezogen) verglichen.

3.5 Analyse der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen

In diesem Abschnitt werden die Elektron-Elektron Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen analysiert. Es werden die Näherungen analog zu Abs. 3.4 behandelt. Die Herleitungen unterscheiden sich im Wesentlichen darin, dass beide Stoßpartner quantenmechanisch behandelt werden und aufgrund gleicher Teilchen, die Anwendung der adiabatischen Näherung an dieser Stelle nicht möglich ist.

3.5.1 Born'sche Näherung

Ausgehend von einem Debye-Potential zur Beschreibung der Elektron-Elektron Wechselwirkung gilt für den Elektron-Elektron-Anteil der Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen in Born'scher Näherung [Red97]

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{ee,B} &= \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{\Omega_0^3}{(2\pi)^9} \int d^3\mathbf{k}_1 \int d^3\mathbf{k}_2 \int d^3\mathbf{q} \int_{-\infty}^{\infty} d(\hbar\omega) f_{k_1}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e\right) f_{k_2}^e \left(1 - f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e\right) \\ &\quad \times |V_D(q)|^2 \delta(\hbar\omega - E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e + E_{k_1}^e) \delta(\hbar\omega - E_{k_2}^e + E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e) \\ &\quad \times [\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})]. \end{aligned} \quad (3.128)$$

Es werden Kugelkoordinaten eingeführt, der Vektor \mathbf{q} wird parallel zur z -Richtung gewählt und Vektor \mathbf{k}_1 wird in die x - z -Ebene gelegt

$$\mathbf{q} = q \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{k}_1 = k_1 \begin{pmatrix} \sin \theta_{k_1} \\ 0 \\ \cos \theta_{k_1} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{k}_2 = k_2 \begin{pmatrix} \sin \theta_{k_2} \cos \phi_{k_2} \\ \sin \theta_{k_2} \sin \phi_{k_2} \\ \cos \theta_{k_2} \end{pmatrix}. \quad (3.129)$$

Exemplarisch wird das Zwischenresultat für d_{33}^{ee} angegeben

$$\begin{aligned} d_{33}^{\text{ee},\text{B}} = & \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{8\beta^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\Omega_0}{(2\pi)^5} \frac{m^2}{\hbar^4} \int_0^\infty dq \frac{1}{(q^2 + \kappa^2)^2} \int_{-\infty}^\infty d\hbar\omega \int_0^\infty dk_1 k_1 \int_0^\infty dk_2 k_2 \int_{-1}^1 d(\cos \theta_{k_1}) \\ & \times \int_{-1}^1 d(\cos \theta_{k_2}) \int_0^{2\pi} d\phi_{k_2} \delta \left(\cos \theta_{k_1} + \frac{q}{2k_1} - \frac{m\omega}{\hbar k_1 q} \right) \delta \left(\cos \theta_{k_2} - \frac{q}{2k_2} - \frac{m\omega}{\hbar k_2 q} \right) \\ & \times \left[q^2 \frac{\hbar^4}{4m^2} \left(k_2^2 - k_1^2 \right)^2 + \left(qk_2 \cos \theta_{k_2} - qk_1 \cos \theta_{k_1} - 2q^2 \right) \frac{\hbar^2}{m} \left(k_2^2 - k_1^2 \right) \hbar\omega \right. \\ & + \left(k_1^2 + k_2^2 + 4q^2 + 4qk_1 \cos \theta_{k_1} - 4qk_2 \cos \theta_{k_2} - 2k_1 k_2 \cos \theta_{k_1} \cos \theta_{k_2} \right) (\hbar\omega)^2 \\ & \left. - 2k_1 k_2 \sin \theta_{k_1} \sin \theta_{k_2} \cos \phi_{k_2} (\hbar\omega)^2 \right] f_{k_1}^{\text{e}} \left(1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^{\text{e}} \right) f_{k_2}^{\text{e}} \left(1 - f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^{\text{e}} \right). \end{aligned} \quad (3.130)$$

Die Integrale über die Winkel werden nun ausgeführt. Die verbleibenden Integrale werden durch Substitutionen in dimensionslose Variablen $Q = q\sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{8m}}$, $x = k_1\sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{2m}}$, $y = k_2\sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{2m}}$, $\nu_e = \hbar\omega \frac{\beta}{4Q}$ vereinfacht

$$\begin{aligned} d_{33}^{\text{ee},\text{B}} = & d \frac{2}{n_e \Lambda_e^3} \frac{1}{n_e} \frac{m^{3/2} \sqrt{2}}{(2\pi)^2 \hbar^3 \beta^{3/2}} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \int_{-\infty}^\infty d\nu_e \int_{|Q-\nu_e|}^\infty dx 2x \int_{|Q+\nu_e|}^\infty dy 2y \\ & \times \frac{\left[(y^2 - x^2)^2 - 8(y^2 - x^2) \nu Q + 4(y^2 + x^2) \nu_e^2 - 8\nu_e^4 + 8Q^2\nu_e^2 \right]}{(e^{x^2-\alpha} + 1) (1 + e^{-x^2-4\nu_e Q+\alpha}) (e^{y^2-\alpha} + 1) (1 + e^{-y^2+4\nu_e Q+\alpha})}, \end{aligned} \quad (3.131)$$

wobei $\tilde{\kappa}^2 = \frac{\beta\hbar^2}{8m} \kappa^2$ analog zu Abs. 3.4. Mit der Substitution $x^2 = X + (Q - \nu)^2$, $y^2 = Y + (Q + \nu)^2$ werden die unteren Grenzen der Integrationen über x und y nach null verschoben [RRRR15]

$$d_{33}^{\text{ee},\text{B}} = d \frac{2e^{2\alpha}}{\sqrt{\pi} n_e^2 \Lambda_e^6} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3 e^{-2Q^2}}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \int_{-\infty}^\infty d\nu_e e^{-2\nu_e} f_{33}^{\text{ee}}(\alpha, Q, \nu_e), \quad (3.132)$$

mit

$$\begin{aligned} f_{33}^{\text{ee}}(\alpha, Q, \nu_e) = & \int_0^\infty dX \int_0^\infty dY \frac{e^{(\nu_e-Q)^2-\alpha}}{e^{X+(\nu_e-Q)^2-\alpha} + 1} \frac{e^{(\nu_e+Q)^2-\alpha}}{e^{Y+(\nu_e+Q)^2-\alpha} + 1} \\ & \times \frac{(Y-X)^2 + 4\nu_e^2(Y+X)}{[1 + e^{-X-(\nu_e+Q)^2+\alpha}] [1 + e^{-Y-(\nu_e-Q)^2+\alpha}]}. \end{aligned} \quad (3.133)$$

Nach diesem Schema kann in Born'scher Näherung eine Formel für alle Elektron-Elektron-Korrelationsfunktionen angegeben werden

$$d_{ll'}^{\text{ee},\text{B}} = d \frac{2e^{2\alpha}}{\sqrt{\pi} n_e^2 \Lambda_e^6} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3 e^{-2Q^2}}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} \int_{-\infty}^\infty d\nu_e e^{-2\nu_e} f_{ll'}^{\text{ee}}(\alpha, Q, \nu_e), \quad (3.134)$$

mit

$$\begin{aligned} f_{ll'}^{\text{ee}}(\alpha, Q, \nu_e) &= \frac{1}{4Q^2} \int_0^\infty dX \int_0^\infty dY \frac{e^{(\nu_e-Q)^2-\alpha}}{e^{X+(\nu_e-Q)^2-\alpha}+1} \frac{e^{(\nu_e+Q)^2-\alpha}}{e^{Y+(\nu_e+Q)^2-\alpha}+1} \\ &\times \frac{K_{ll'}^{\text{ee}}(X+(Q-\nu_e)^2, Y+(Q+\nu_e)^2, 4Q^2, 4Q\nu_e)}{[1+e^{-X-(\nu_e+Q)^2+\alpha}] [1+e^{-Y-(\nu_e-Q)^2+\alpha}]}, \end{aligned} \quad (3.135)$$

und dem Term

$$\begin{aligned} K_{ll'}^{\text{ee}}(x, y, p, v) &= \\ &x^{\frac{l+l'}{2}} + (x+v)^{\frac{l+l'}{2}} + y^{\frac{l+l'}{2}} + (y-v)^{\frac{l+l'}{2}} \\ &- x^{\frac{l+1}{2}}(x+v)^{\frac{l'-1}{2}} - (x+v)^{\frac{l-1}{2}}x^{\frac{l'+1}{2}} - y^{\frac{l-1}{2}}(y-v)^{\frac{l'+1}{2}} - (y-v)^{\frac{l+1}{2}}y^{\frac{l'-1}{2}} \\ &+ \frac{p-v}{2} \left[x^{\frac{l-1}{2}}(x+v)^{\frac{l'-1}{2}} + (x+v)^{\frac{l-1}{2}}x^{\frac{l'-1}{2}} + y^{\frac{l-1}{2}}(y-v)^{\frac{l'-1}{2}} + (y-v)^{\frac{l-1}{2}}y^{\frac{l'-1}{2}} \right] \\ &+ \frac{v^2-p^2}{4p} \left[x^{\frac{l-1}{2}}y^{\frac{l'-1}{2}} + y^{\frac{l-1}{2}}x^{\frac{l'-1}{2}} + (x+v)^{\frac{l-1}{2}}(y-v)^{\frac{l'-1}{2}} + (y-v)^{\frac{l-1}{2}}(x+v)^{\frac{l'-1}{2}} \right] \\ &- \frac{(v-p)^2}{4p} \left[x^{\frac{l-1}{2}}(y-v)^{\frac{l'-1}{2}} + (y-v)^{\frac{l-1}{2}}x^{\frac{l'-1}{2}} \right] \\ &- \frac{(v+p)^2}{4p} \left[(x+v)^{\frac{l-1}{2}}y^{\frac{l'-1}{2}} + y^{\frac{l-1}{2}}(x+v)^{\frac{l'-1}{2}} \right]. \end{aligned} \quad (3.136)$$

Analog zu Abschnitt 3.4.1 wird der Niederdichtegrenzfall ($\alpha \ll 0$) untersucht. Es gilt

$$f_{ll'}^{\text{ee},\text{cl}}(Q, \nu_e) = f_{ll'}^{\text{ee}}(\alpha \ll 0, Q, \nu) \quad (3.137)$$

$$= \int_0^\infty dX \int_0^\infty dY \frac{e^{-X-Y}}{4Q^2} K_{ll'}^{\text{ee}}(X+(Q-\nu_e)^2, Y+(Q+\nu_e)^2, 4Q^2, 4Q\nu_e). \quad (3.138)$$

Exemplarisch wird wieder d_{33}^{ee} betrachtet:

$$d_{33}^{\text{ee},\text{B}} = d \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}^2)^2} e^{-2Q^2} 2\sqrt{2\pi}, \quad (3.139)$$

wobei $\int_{-\infty}^\infty d\nu \int_0^\infty dX \int_0^\infty dY e^{-X-Y-2\nu^2} [(Y-X)^2 + 4\nu^2(Y+X)] = 2\sqrt{2\pi}$. Das verbleibende Integral lässt sich über die Hilfsfunktionen, siehe Abs. 3.4.1, darstellen und analog auswerten

$$d_{33}^{\text{ee},\text{B}} = d \frac{\sqrt{2}}{2} \left[\frac{1}{2\tilde{\kappa}^2} F(2\tilde{\kappa}^2, -1) - \frac{1}{2\tilde{\kappa}^2} F(2\tilde{\kappa}^2, -2) \right] \quad (3.140)$$

$$= d\sqrt{2} \left\{ -\frac{1}{2} [\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1] - \frac{1}{2} \ln(2) \right\} + \mathcal{O}[\tilde{\kappa}^2 \ln(\tilde{\kappa}^2)]. \quad (3.141)$$

Die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen können analytisch kompakt in der Form

$$d_{ll'}^{\text{ee},\text{B}} = d B_{ll'}^{\text{ee}} \left\{ -\frac{1}{2} [\ln(\tilde{\kappa}^2) + \gamma + 1] - \frac{1}{2} \ln(2) + \frac{1}{2} C_{ll'}^{\text{ee}} \right\} + \mathcal{O}[\tilde{\kappa}^2 \ln(\tilde{\kappa}^2)], \quad (3.142)$$

angegeben werden. Nach dem Mittelwertsatz der Integralrechnung, erkennbar mit Hilfe der Hilfsfunktionen analog zu Abs. 3.4.1, korrespondiert in Gl. (3.134) der Niederdichtegrenzfall $\tilde{\kappa} \ll 1$ mit dem langwellige Grenzfall $Q \rightarrow 0$ in $f_{ll'}^{\text{ee},\text{cl}}$. In eine Taylor-Reihe entwickelt

$$f_{ll'}^{\text{ee},\text{cl}}(Q, \nu_e) = f_{ll'}^{(0)}(0, \nu_e) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{f_{ll'}^{(2j)}(0, \nu_e)}{\Gamma(2j+1)} Q^{2j}, \quad (3.143)$$

können die Parameter in Gl. (3.142) bestimmt werden:

$$B_{ll'}^{\text{ee}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu_e e^{-2\nu_e} f_{ll'}^{(0)}(0, \nu_e), \quad (3.144)$$

$$C_{ll'}^{\text{ee}} = \frac{2}{B_{ll'}^{\text{ee}}} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dQ \frac{e^{-2Q^2}}{Q} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu_e e^{-2\nu_e^2} [f_{ll'}^{\text{ee},\text{cl}}(Q, \nu_e) - f_{ll'}^{(0)}(0, \nu_e)]. \quad (3.145)$$

Bei allen ungeradzahligen Korrelationsfunktionen $d_{33}^{\text{ee}}, d_{35}^{\text{ee}}, d_{55}^{\text{ee}}$ usw. sind die klassischen Funktionen $f_{ll'}^{\text{ee},\text{cl}}$ Polynome in Q^2 und auch in ν^2 , die Taylor-Reihe in Gl. (3.143) bricht ab. Analytische Ergebnisse für den Vorfaktor $B_{ll'}^{\text{ee}}$ und den Parameter $C_{ll'}^{\text{ee}}$ sind für diesen Fall bekannt, siehe [Red97, KRRR13]. Allerdings ist bereits im Fall des Lorentz-Plasmas, siehe Abs. 3.4.1 und auch [HRRW84], gezeigt worden, dass die geradzahligen Momente \mathbf{P}_4 und \mathbf{P}_6 auf eine Konvergenz der Transportgrößen im Niederdichtegrenzfall führen. Somit besteht auch die Möglichkeit unter Einbeziehung der Elektron-Elektron Stöße eine schnellere Konvergenz zu erwirken. Erstmals werden in dieser Arbeit entsprechende Berechnungen für $B_{ll'}^{\text{ee}}$ und $C_{ll'}^{\text{ee}}$ der weiteren Korrelationsfunktionen vorgestellt, siehe Tab. 3.1. Dabei konnten die Parameter $B_{ll'}^{\text{ee}}$ analytisch bestimmt werden, wohingegen die Parameter $C_{ll'}^{\text{ee}}$ numerisch bis auf drei Nachkommastellen genau bestimmt wurden.

Tab. 3.1: Parameter $B_{ll'}^{\text{ee}}$ und $C_{ll'}^{\text{ee}}$ zur Niederdichteentwicklung der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen $d_{ll'}^{\text{ee},\text{B}}$, Gl. (3.142).

ungeradzahlige Momente [Red97, KRRR13]				geradzahlige Momente				gemischte Momente			
l	l'	$B_{ll'}^{\text{ee}}$	$C_{ll'}^{\text{ee}}$	l	l'	$B_{ll'}^{\text{ee}}$	$C_{ll'}^{\text{ee}}$	l	l'	$B_{ll'}^{\text{ee}}$	$C_{ll'}^{\text{ee}}$
3	3	$\sqrt{2}$	0	2	2	$\frac{151\sqrt{2}-208}{30}$	-0,230	2	3	$\frac{4-\pi}{\sqrt{\pi}}$	-0,095
3	5	$\frac{11}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{11} \approx 0,182$	2	4	$\frac{607\sqrt{2}-816}{40}$	0,025	2	5	$\frac{26-7\pi}{\sqrt{\pi}}$	0,133
3	7	$\frac{477}{8\sqrt{2}}$	$\frac{56}{159} \approx 0,352$	2	6	$\frac{2215}{16\sqrt{2}} - 93$	0,233	3	4	$\frac{6}{\sqrt{\pi}}$	0,092
5	5	$\frac{157}{2\sqrt{2}}$	$\frac{48}{157} \approx 0,306$	4	4	$\frac{6147\sqrt{2}-7296}{160}$	0,165	3	6	$\frac{80+15\pi}{4\sqrt{\pi}}$	0,267
5	7	$\frac{8343}{16\sqrt{2}}$	$\frac{410}{927} \approx 0,442$	4	6	$\frac{20745}{64\sqrt{2}} - 177$	0,316	4	5	$\frac{180-9\pi}{4\sqrt{\pi}}$	0,240
7	7	$\frac{525249}{128\sqrt{2}}$	$\frac{5696}{10299} \approx 0,553$	6	6	$\frac{355785}{256\sqrt{2}} - 600$	0,432	5	6	$\frac{680+105\pi}{4\sqrt{\pi}}$	0,372

3.5.2 Dynamische Abschirmeffekte in Random-Phase-Approximation

Analog zu Abs. 3.4.2 wird anstelle des Debye-Potentials ein dynamisch abgeschirmtes Coulomb-Potential verwendet. Die dynamische Abschirmung erfolgt über die dielektrische Funktion in RPA. Da im vorigen Abschnitt 3.5.1 kein Gebrauch von der adiabatischen Näherung gemacht wurde, sind die Rechenschritte bis Gl. (3.134) analog. Es gilt [Red97]

$$d_{ll'}^{\text{ee},\text{LB}} = d \frac{2e^{2\alpha}}{\sqrt{\pi} n_e^2 \Lambda_e^6} \int_0^\infty dQ \frac{e^{-2Q^2}}{Q} \int_{-\infty}^\infty d\nu_e \left| \frac{1}{\epsilon^{\text{RPA}}(q(Q), \omega(\nu_e))} \right|^2 e^{-2\nu_e^2} f_{ll'}^{\text{ee}}(\alpha, Q, \nu_e), \quad (3.146)$$

mit $f_{ll'}^{\text{ee}}$ aus Gl. (3.135). Der Einfluss der dielektrischen Funktion unterscheidet sich substantiell zu den Elektron-Ion Stößen, da über ν_e anstelle von $\nu_i = \gamma_{ei}\nu_e$ integriert wird. So ist die Gewichtung durch die dielektrische Funktion zu Gl. (3.100) verschieden. Wird nämlich hier der adiabatische Grenzfall durchgeführt, folgt für die dielektrische Funktion

$$\begin{aligned} \epsilon^{\text{RPA}}(q(Q), \omega(Q, \nu_e)) &= \epsilon^{\text{RPA,e}}(Q, \nu_e), \\ \text{Re } \epsilon^{\text{RPA,e}}(Q, \nu_e) &= 1 + \frac{\sqrt{\Gamma^2 \Theta}}{8\pi Q^3} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \int_0^\infty dz \frac{z}{e^{z^2 - \alpha} + 1} \ln \left| \frac{\nu_e^2 - (Q+z)^2}{\nu_e^2 - (Q-z)^2} \right|, \\ \text{Im } \epsilon^{\text{RPA,e}}(Q, \nu_e) &= \frac{\sqrt{\Gamma^2 \Theta}}{16Q^3} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \ln \left| \frac{1 + e^{-(Q-\nu_e)^2 + \alpha}}{1 + e^{-(Q+\nu_e)^2 + \alpha}} \right|. \end{aligned} \quad (3.147)$$

Die Elektron-Elektron Wechselwirkung wird allein durch die Elektronen im System dynamisch abgeschirmt. Die Störung der Elektron-Elektron Wechselwirkung durch die Ionen verschwindet, sie schirmen effektiv nicht ab ($b_{ee,ll'}^i = 0$).

Der elektronische effektive Abschirmfaktor b_{ee}^e ist analog zu Abs. 3.4.2 definiert, dass die statische Born'sche Näherung, Gl. (3.134), mit dem Abschirmparameter $\kappa^2 \rightarrow b_{ee}^e \kappa_e^2$ mit der dynamischen Born'schen Näherung, Gl. (3.146), übereinstimmt.

Der elektronische effektive Abschirmfaktor kann über diese Definition Abschirmeffekte in RPA für beliebige Dichten und Temperaturen über Abschirmfaktoren beschreiben. Im Unterschied zu den Elektron-Ion Korrelationen stellt sich bislang die Frage nach dem exakten Wert für b_{ee}^e im Niederdichtegrenzfall. Ein analytischer Ausdruck, wie er für die Elektron-Ion Stößen existiert, konnten bislang nicht angegeben werden. Numerisch ermittelte Werte von Röpke und Redmer [RR89] und Karakhtanov *et al.* [KRRR13] weichen um knapp 25% ab, siehe Tab. 3.2.

Dieses Problem wird nun analytisch bearbeitet. Exemplarisch wird abermals die Korrelationsfunktion d_{33}^{ee} betrachtet. Im Niederdichtegrenzfall wird analog zu Abs. 3.4.2 der langwellige Grenzfall $Q \rightarrow 0$ in der dielektrischen Funktion genutzt, wodurch die Korrelationsfunktion

$$d_{33}^{\text{ee},\text{LB}} = d \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dQ \frac{e^{-2Q^2}}{Q} \int_{-\infty}^\infty d\nu_e \frac{e^{-2\nu_e^2} (2 + 8\nu_e^2)}{\left\{ 1 + \frac{\tilde{\kappa}_e^2}{Q^2} [1 - 2\nu_e D(\nu_e)] \right\}^2 + \left\{ \frac{\tilde{\kappa}_e^2}{Q^2} \sqrt{\pi} \nu_e e^{-\nu_e^2} \right\}^2}, \quad (3.148)$$

auszuwerten bleibt. Das hintere Integral kann nicht über Gl. (3.103) gelöst werden, da die Exponentialfunktion stärker abfällt. Dass dieses Integral jedoch existiert, folgt sofort aus dem Majoranten-Kriterium. In dieser Arbeit wird das hintere Integral über eine Reihenentwicklung

in analytisch lösbar Integrale überführt. Nach der Substitution $\nu = \sqrt{2}\nu_e$

$$\begin{aligned} d_{33}^{\text{ee,LB}} &= \frac{d}{2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dQ \frac{Q^3 e^{-2Q^2}}{(Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2)^2} \int_{-\infty}^\infty d\nu \frac{e^{-\nu^2}}{\sqrt{2}} (2 + 4\nu^2) \\ &\quad \times \left\{ \left[1 - t\sqrt{2}\nu D \left(\frac{\nu}{\sqrt{2}} \right) \right]^2 + \left[t\sqrt{\frac{\pi}{2}}\nu e^{-\frac{\nu^2}{2}} \right]^2 \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (3.149)$$

mit $t = \frac{\tilde{\kappa}_e^2}{Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2}$ wird der Term in der geschweiften Klammer in eine Taylor-Reihe um $\nu = 0$ entwickelt. Da dieser Term symmetrisch in ν ist, besitzt das Taylor-Polynom nur geradzahlige Potenzen. Die nullte Ordnung ist 1 und führt zum statischen Anteil der Korrelationsfunktion. Die weiteren Entwicklungsterme spiegeln Korrekturen der dynamischen Abschirmung wider.

$$\left\{ \left[1 - t\sqrt{2}\nu D \left(\frac{\nu}{\sqrt{2}} \right) \right]^2 + \left(t\sqrt{\frac{\pi}{2}}\nu e^{-\frac{\nu^2}{2}} \right)^2 \right\}^{-1} = 1 + \sum_{n=1}^\infty \frac{C_n(t)}{\Gamma(2n+1)} \nu^{2n}, \quad (3.150)$$

$$C_n(t) = \left. \left(\frac{\partial^{2n} \{ \dots \}^{-1}}{\partial \nu^{2n}} \right) \right|_{\nu=0} = \sum_{j=1}^{2n} a_{jn} t^j. \quad (3.151)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $C_n(t)$ sind Polynome in t . Mit

$$\int_{-\infty}^\infty d\nu \nu^{2n} \frac{e^{-\nu^2}}{\sqrt{2}} (2 + 4\nu^2) = 2\sqrt{2}(n+1)\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (3.152)$$

$$\begin{aligned} (\tilde{\kappa}_e^2)^j \int_0^\infty dQ \frac{Q^3}{(Q^2 + \tilde{\kappa}_e^2)^{2+j}} e^{-2Q^2} &= \frac{1}{4\tilde{\kappa}_e^2} [F(2\tilde{\kappa}_e^2, -1-j) - F(2\tilde{\kappa}_e^2, -2-j)] \end{aligned} \quad (3.153)$$

$$= \frac{1}{2j(j+1)} + \mathcal{O}(\tilde{\kappa}_e^2) + \mathcal{O}\left[\left(\tilde{\kappa}_e^2\right)^j \ln(\tilde{\kappa}_e^2)\right], \quad (3.154)$$

kann der elektronische effektive Abschirmfaktor im Niederdichtegrenzfall $b_{\text{ee},33}^{\text{e,cl}}$ durch eine Doppelsumme

$$\ln(b_{\text{ee},33}^{\text{e,cl}}) = \sum_{n=1}^\infty \sum_{j=1}^{2n} \frac{2\sqrt{2}(n+1)\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{2\sqrt{2\pi}\Gamma(2n+1)} \frac{a_{jn}}{j(j+1)} \approx -0,8384, \quad (3.155)$$

ausgedrückt und beliebig genau berechnet werden. Die schnelle Konvergenz von $b_{\text{ee},33}^{\text{e,cl}}$ ist in Abb. 3.3 gezeigt. Auf vier Stellen genau ist der Wert in Tab. 3.2 angegeben. Verglichen wird der berechnete elektronische Abschirmfaktor mit den numerischen Werten von Röpke und Redmer [RR89] und Karakhtanov *et al.* [KRRR13]. Dabei ist deutlich erkennbar, dass der numerisch ermittelte Wert von Röpke und Redmer [RR89] bestätigt werden kann.

Zu interpretieren ist dieser effektive Abschirmfaktor so, dass die Elektronen effektiv mit etwa der halben Stärke abschirmen, ähnlich der effektiven Abschirmung in den Elektron-Ion Korrelationen durch die Ionen, siehe Abschnitt 3.4.2. Trotz dieser numerischen Ähnlichkeit von b_{ee}^{e} und b_{ei}^{i} besteht ein wesentlicher Unterschied darin, dass b_{ee}^{e} in adiabatischer Näherung unabhängig von der Ladungszahl der Ionen Z bleibt.

Tab. 3.2: Effektiver Abschirmfaktor $b_{ee,33}^{e,cl}$ im Niederdichtegrenzfall.

	$b_{ee,33}^{e,cl}$
statisch	1
dynamisch	0,4324
Röpke und Redmer [RR89]	0,4313
Karakhtanov <i>et al.</i> [KRRR13]	0,5367

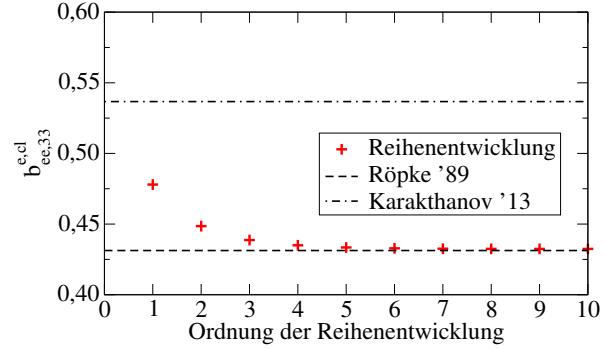


Abb. 3.3: Konvergenz von $b_{ee,33}^{e,cl}$.

Gl. (3.155) lässt sich auf beliebige Abschirmfaktoren $b_{ee,ll'}^{e,cl}$ erweitern

$$\ln \left(b_{ee,ll'}^{e,cl} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{2n} \frac{\langle \nu^{2n} \rangle_{ll'}}{\Gamma(2n+1)} \frac{a_{jn}}{j(j+1)} \quad (3.156)$$

$$\langle \nu^{2n} \rangle_{ll'} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\nu \nu^{2n} e^{-\nu^2} f_{ll'}^{(0)}(0, \nu/\sqrt{2})}{\int_{-\infty}^{\infty} d\nu e^{-\nu^2} f_{ll'}^{(0)}(0, \nu/\sqrt{2})}. \quad (3.157)$$

Somit gibt es für beliebige Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen bereits im Niederdichtegrenzfall verschiedene effektive Abschirmfaktoren, ein weiterer Unterschied zu den Elektron-Ion Korrelationen.

Tab. 3.3: Effektive Abschirmfaktoren $b_{ee,ll'}^{e,cl}$, Gl. (3.156), im Niederdichtegrenzfall der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen.

ungeradzahlige Momente			geradzahlige Momente			gemischte Momente		
l	l'	$b_{ee,ll'}^{e,cl}$	l	l'	$b_{ee,ll'}^{e,cl}$	l	l'	$b_{ee,ll'}^{e,cl}$
3	3	0,4324	2	2	0,5662	2	3	0,4995
3	5	0,3328	2	4	0,4441	2	5	0,3980
3	7	0,2649	2	6	0,3594	3	4	0,3777
5	5	0,2432	4	4	0,3250	3	6	0,2957
5	7	0,1861	4	6	0,2482	4	5	0,2827
7	7	0,1392	6	6	0,1829	5	6	0,2117

In Tab. 3.3 sind erstmals Abschirmfaktoren $b_{ee,ll'}^{e,cl}$ verschiedener Korrelationsfunktionen $\rho_{ll'}^{ee}$ im Niederdichtegrenzfall gezeigt. Tendenziell ist eine Abnahme der Abschirmfaktoren mit höheren Momenten beobachtbar. Das bedeutet, dass die Elektron-Elektron Wechselwirkung für höhere Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen Coulomb-artig wird. Anders als bei den Elektron-Ion Korrelationsfunktionen ist das asymptotische Verhalten für höhere Korrelationsfunktionen $l, l' \gg 1$ unklar. Weitere Analysen zu diesem Gebiet stehen noch aus. Allerdings

ist der Grundstein gelegt, auch im Rahmen einer Mehr-Momenten Näherung dynamische Abschirmeffekte berücksichtigen zu können.

Jenseits des Niederdichtegrenzfalls kann der Abschirmfaktor b_{ee} für beliebige Temperaturen und Dichten ermittelt werden. In dieser Arbeit sind allerdings ausschließlich Berechnungen für die Korrelationsfunktion d_{33}^{ee} durchgeführt worden. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.4 für einen großen Temperaturbereich $T = 10^3 - 10^7$ K in Abhängigkeit von Θ dargestellt. Im Gegensatz zu den Abschirmfaktoren der Elektron-Ion Korrelationsfunktion ist der Einfluss der Temperatur schwach, der Abschirmfaktor b_{ee} ist nahezu rein Θ abhängig. Eine einfache Fitformel beschreibt diese Abhängigkeit

$$b_{ee,33}^{e,\text{cl}}(\Theta) = 0,4324 + \frac{1 - 0,4324}{\sqrt{1 + 30\Theta^2}}. \quad (3.158)$$

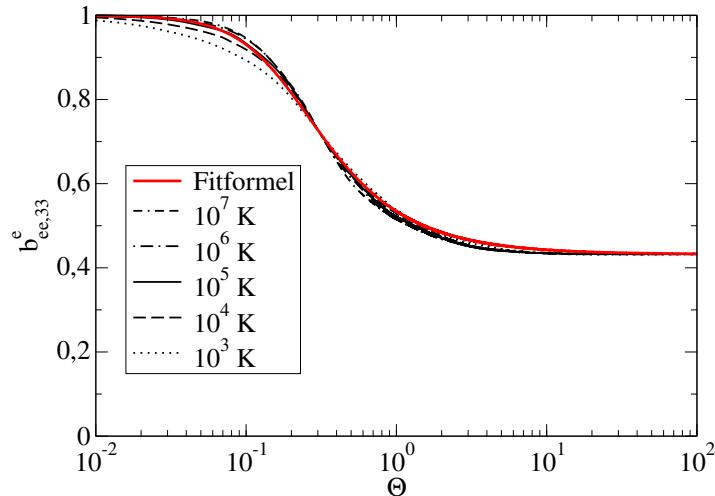


Abb. 3.4: Elektronischer effektiver Abschirmfaktor in Abhängigkeit vom Entartungsparameter Θ bei verschiedenen Temperaturen $T = 10^3 - 10^7$ K.

Im folgenden Abschnitt wird der Einfluss der starken Stöße im Rahmen einer T-Matrix Näherung analog zu Abs. 3.4.3 diskutiert. Mit Hilfe der effektiven Abschirmfaktoren wird die Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen im Vielteilchensystem anstelle eines dynamisch abgeschirmten Coulomb-Potential durch ein effektives Debye-Potential beschrieben. In dieser Arbeit werden entsprechend Abb. 3.4 temperatur- und dichteabhängige Abschirmfaktoren verwendet.

3.5.3 Einfluss starker Stöße in der T-Matrix Näherung

In diesem Abschnitt wird der Einfluss starker Stöße auf die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen untersucht. Die Elektron-Elektron Wechselwirkung wird durch ein Debye-Potential beschrieben. Austauscheffekte werden in diesem Abschnitt berücksichtigt. Es gilt

[MR82, Rö88, Red97]

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ee,TM}} = & \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{\Omega_0^3}{(2\pi)^9} \int d^3\mathbf{k}_1 \int d^3\mathbf{k}_2 \int d^3\mathbf{q} f_{k_1}^e (1 - f_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e) f_{k_2}^e (1 - f_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e) \\ & \times |T_{ee}|^2 \delta(E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e - E_{k_1}^e - E_{k_2}^e + E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e) \\ & \times [\mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{l'}(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})] [\mathbf{K}_l(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}) + \mathbf{K}_l(\mathbf{k}_2, -\mathbf{q})]. \end{aligned} \quad (3.159)$$

Das Streuproblem wird im Folgenden durch eine Transformation ins Schwerpunktsystem vereinfacht. Die Jacobi-Determinante ist betragsmäßig 1, sodass sich die Integrale einfach umschreiben lassen:

$$\int d^3\mathbf{k}_1 \int d^3\mathbf{k}_2 \int d^3\mathbf{q} \dots \rightarrow \int d^3\mathbf{s} \int d^3\mathbf{p} \int d^3\mathbf{p}' \dots \quad (3.161)$$

Die Energiedifferenz in der Delta-Distribution vereinfacht sich stark

$$\delta(E_{|\mathbf{k}_1+\mathbf{q}|}^e - E_{k_1}^e - E_{k_2}^e + E_{|\mathbf{k}_2-\mathbf{q}|}^e) = \frac{m}{\hbar^2} \delta(p'^2 - p^2). \quad (3.162)$$

Die Elektron-Elektron Korrelationsfunktion ist dann

$$\begin{aligned} d_{ll'}^{\text{ee,TM}} = & \frac{2\pi\hbar}{3} \frac{\Omega_0^3}{(2\pi)^9} \int d^3\mathbf{p} \int d^3\mathbf{p}' \int d^3\mathbf{s} f_{|\frac{\mathbf{s}}{2}-\mathbf{p}|}^e (1 - f_{|\frac{\mathbf{s}}{2}-\mathbf{p}'|}^e) f_{|\frac{\mathbf{s}}{2}+\mathbf{p}|}^e (1 - f_{|\frac{\mathbf{s}}{2}+\mathbf{p}'|}^e) \\ & \times |T_{ee}|^2 \frac{m}{\hbar^2} \delta(p'^2 - p^2) \left[\mathbf{K}_{l'}\left(\frac{\mathbf{s}}{2} - \mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{p}'\right) + \mathbf{K}_{l'}\left(\frac{\mathbf{s}}{2} + \mathbf{p}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}\right) \right] \\ & \times \left[\mathbf{K}_l\left(\frac{\mathbf{s}}{2} - \mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{p}'\right) + \mathbf{K}_l\left(\frac{\mathbf{s}}{2} + \mathbf{p}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.163)$$

Für weitere Vereinfachungen werden dimensionslose Variablen eingeführt:

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{m}} \frac{\mathbf{s}}{2}; \quad \mathbf{P} = \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{m}} \mathbf{p}; \quad \mathbf{P}' = \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{m}} \mathbf{p}'. \quad (3.164)$$

Es gilt für die \mathbf{K} -Terme

$$\begin{aligned} & 2^{\frac{l-1}{2}} \sqrt{\frac{\beta\hbar^2}{m}} \left[\mathbf{K}_l\left(\frac{\mathbf{s}}{2} - \mathbf{p}, \mathbf{p} - \mathbf{p}'\right) + \mathbf{K}_l\left(\frac{\mathbf{s}}{2} + \mathbf{p}, \mathbf{p}' - \mathbf{p}\right) \right] \\ & = (\mathbf{S} - \mathbf{P})|\mathbf{S} - \mathbf{P}|^{l-1} + (\mathbf{S} + \mathbf{P})|\mathbf{S} + \mathbf{P}|^{l-1} \\ & \quad - (\mathbf{S} - \mathbf{P}')|\mathbf{S} - \mathbf{P}'|^{l-1} - (\mathbf{S} + \mathbf{P}')|\mathbf{S} + \mathbf{P}'|^{l-1}. \end{aligned} \quad (3.165)$$

Der Winkel zwischen \mathbf{P} und \mathbf{P}' ist der Streuwinkel ϑ . Es werden Kugelkoordinaten eingeführt. Dabei wird \mathbf{P} parallel zur z -Achse und \mathbf{P}' in die x - z -Ebene gelegt:

$$\mathbf{P} = P \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{P}' = P' \begin{pmatrix} \sin \vartheta \\ 0 \\ \cos \vartheta \end{pmatrix}; \quad \mathbf{S} = S \begin{pmatrix} \sin \chi \cos \phi \\ \sin \chi \sin \phi \\ \cos \chi \end{pmatrix}. \quad (3.166)$$

Durch Wirken der Delta-Distribution $\delta(P - P')$, somit $P' \rightarrow P$, gelten folgende Ersetzungen

$$(\mathbf{S} - \mathbf{P})(\mathbf{S} - \mathbf{P}) \rightarrow S^2 + P^2 - 2SP \cos \chi, \quad (3.167)$$

$$(\mathbf{S} + \mathbf{P})(\mathbf{S} + \mathbf{P}) \rightarrow S^2 + P^2 + 2SP \cos \chi, \quad (3.168)$$

$$(\mathbf{S} - \mathbf{P}')(\mathbf{S} - \mathbf{P}') \rightarrow S^2 + P^2 - 2SP [\sin \vartheta \sin \chi \cos \phi + \cos \vartheta \cos \chi], \quad (3.169)$$

$$(\mathbf{S} + \mathbf{P}')(\mathbf{S} + \mathbf{P}') \rightarrow S^2 + P^2 + 2SP [\sin \vartheta \sin \chi \cos \phi + \cos \vartheta \cos \chi], \quad (3.170)$$

$$(\mathbf{S} - \mathbf{P})(\mathbf{S} + \mathbf{P}) \rightarrow S^2 - P^2, \quad (3.171)$$

$$(\mathbf{S} - \mathbf{P}')(\mathbf{S} + \mathbf{P}') \rightarrow S^2 - P^2, \quad (3.172)$$

$$(\mathbf{S} \pm \mathbf{P})(\mathbf{S} \pm \mathbf{P}') \rightarrow S^2 + P^2 \cos \vartheta \pm SP [\cos \chi + \sin \vartheta \sin \chi \cos \phi + \cos \vartheta \cos \chi], \quad (3.173)$$

$$(\mathbf{S} \pm \mathbf{P})(\mathbf{S} \mp \mathbf{P}') \rightarrow S^2 - P^2 \cos \vartheta \pm SP [\cos \chi - \sin \vartheta \sin \chi \cos \phi - \cos \vartheta \cos \chi]. \quad (3.174)$$

Für das Produkt der Fermi-Funktionen gilt nach Wirken der Delta-Distribution

$$F_{ee} \equiv f_{|\frac{s}{2}-\mathbf{p}|}^e \left(1 - f_{|\frac{s}{2}-\mathbf{p}'|}^e\right) f_{|\frac{s}{2}+\mathbf{p}|}^e \left(1 - f_{|\frac{s}{2}+\mathbf{p}'|}^e\right) e^{2\alpha-(S^2+P^2)} \quad (3.175)$$

$$\begin{aligned} &\rightarrow \frac{e^{2\alpha-(S^2+P^2)}}{\left\{1 + 2e^{\alpha-\frac{1}{2}(S^2+P^2)} \cosh[SPA] + e^{2\alpha-(S^2+P^2)}\right\}} \\ &\times \frac{1}{\left\{1 + 2e^{\alpha-\frac{1}{2}(S^2+P^2)} \cosh[SPB] + e^{2\alpha-(S^2+P^2)}\right\}}, \end{aligned} \quad (3.176)$$

mit $A = |\cos \chi|$ und $B = |\sin \vartheta \sin \chi \cos \phi + \cos \vartheta \cos \chi|$. Wegen $0 \leq A \leq 1$ und $0 \leq B \leq 1$ gilt folgende Ungleichung

$$F_{ee}^{\text{Min}} \leq F_{ee} \leq F_{ee}^{\text{Max}}, \quad (3.177)$$

$$F_{ee}^{\text{Min}} = \frac{e^{2\alpha-(S^2+P^2)}}{\left\{\left[1 + e^{\alpha-\frac{1}{2}(S^2+P^2)}\right]^2 + 2e^{\alpha-\frac{1}{2}(S^2+P^2)}[\cosh(SP) - 1]\right\}^2}, \quad (3.178)$$

$$F_{ee}^{\text{Max}} = \frac{e^{2\alpha-(S^2+P^2)}}{\left\{1 + e^{\alpha-\frac{1}{2}(S^2+P^2)}\right\}^4}, \quad (3.179)$$

wobei F_{ee}^{Min} eine untere Schranke und F_{ee}^{Max} eine obere Schranke der Funktion F_{ee} darstellt. Beide Schranken sind zudem winkelunabhängig und gehen gemeinsam mit F_{ee} im nichtentarteten Grenzfall ($\alpha \ll 0$) über in

$$F_{ee}^{\text{cl}} = \left(\frac{n_e \Lambda_e^3}{2}\right)^2 e^{-(S^2+P^2)}. \quad (3.180)$$

Nach dem Mittelwertsatzes der Integralrechnung gilt,

$\exists \bar{\chi}(S, P, \alpha) \in [0, \pi], \bar{\phi}(S, P, \alpha) \in [0, 2\pi], \bar{\vartheta}(S, P, \alpha) \in [0, \pi]$:

$$\begin{aligned} &\int_0^\pi d\chi \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\vartheta f(S, P, \alpha, \chi, \phi, \vartheta) F_{ee}(S, P, \alpha, \chi, \phi, \vartheta) \\ &= F_{ee}(S, P, \alpha, \bar{\chi}(S, P, \alpha), \bar{\phi}(S, P, \alpha), \bar{\vartheta}(S, P, \alpha)) \int_0^\pi d\chi \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\vartheta f(S, P, \alpha, \chi, \phi, \vartheta), \end{aligned} \quad (3.181)$$

können die Schranken zur Eingrenzung der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen genutzt werden. Das Herausziehen der Fermifunktionen vereinfacht die Winkelintegrale deutlich. Im weiteren Verlauf wird speziell d_{33}^{ee} betrachtet. Es gilt

$$\begin{aligned} & \left[(\mathbf{S} - \mathbf{P})|\mathbf{S} - \mathbf{P}|^2 + (\mathbf{S} + \mathbf{P})|\mathbf{S} + \mathbf{P}|^2 - (\mathbf{S} - \mathbf{P}')|\mathbf{S} - \mathbf{P}'|^2 - (\mathbf{S} + \mathbf{P}')|\mathbf{S} + \mathbf{P}'|^2 \right]^2 \\ &= 16P^4 S^2 (1 - \cos^2 \vartheta) [\cos^2 \chi + \sin^2 \chi \cos^2 \phi]. \end{aligned} \quad (3.182)$$

Die Korrelationsfunktion ist

$$d_{33}^{\text{ee,TM}} = \frac{8}{3} \frac{\beta \hbar}{3} \frac{\Omega_0^3}{2\pi^5} \left(\frac{m}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{11}{2}} \int_0^\infty dPP^7 \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) (1 - \cos^2 \vartheta) |T_{\text{ee}}|^2 \int_0^\infty dSS^4 F_{\text{ee}} \quad (3.183)$$

$$= \frac{8}{3} \frac{4\hbar}{3\beta} \frac{\Omega_0}{\pi^4} \left(\frac{m}{\beta \hbar^2} \right)^{\frac{7}{2}} \int_0^\infty dPP^7 Q_v^{\text{ee}} \left(\sqrt{\frac{m}{\beta \hbar^2}} P \right) \int_0^\infty dSS^4 F_{\text{ee}}, \quad (3.184)$$

mit $\int_{-1}^1 d(\cos \chi) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dP' [\cos^2 \chi + \sin^2 \chi \cos^2 \phi] \delta(P' - P) = \frac{8}{3}\pi$, und dem Viskositätsquerschnitt

$$Q_v^{\text{ee}}(p) = 2\pi \int_{-1}^1 d\cos(\vartheta) [1 - \cos^2(\vartheta)] \left(\frac{d\sigma^{\text{ee}}}{d\Omega} \right) \quad (3.185)$$

$$= 2\pi \frac{2}{p^2} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[1 + \frac{(-1)^\ell}{2} \right] \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \sin^2 [\delta_{\ell-1}(p) - \delta_{\ell+1}(p)]. \quad (3.186)$$

Austauschterme sind in der Partialwellenzerlegung durch den Faktor $\left[1 + \frac{(-1)^\ell}{2} \right]$ berücksichtigt. Die Streuphasen werden über die Calogero-Gleichung (3.120) bestimmt.

Dimensionslose Größen werden analog zu Abschnitt 3.4.3 eingeführt: die Potentialstärke $M_{\text{ee}} = -1/(\kappa a_0)$, die skalierte kinetische Energie $K = p^2/\kappa^2$ und der skalierte Viskositätsquerschnitt $Q_v^{\text{ee}}(K, M_{\text{ee}}) = \frac{p^2 \kappa^2 a_0^2}{4\pi} Q_v^{\text{ee}}$. Nach der Substitution $x = P^2$ kann die Korrelationsfunktion wie folgt angegeben werden ($K = x/(8\tilde{\kappa}^2)$)

$$d_{33}^{\text{ee,TM}} = d \left(\frac{2}{n_e \Lambda^3} \right)^2 \frac{\sqrt{2}}{4\tilde{\kappa}^2} \int_0^\infty dx x^2 Q_v^{\text{ee}}(K(x), M_{\text{ee}}) \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dSS^4 F_{\text{ee}}. \quad (3.187)$$

Durch den Mittelwertsatz der Integralrechnung wurde erstmals für beliebige Entartungen eine von 0 verschiedene untere Schranke der Elektron-Elektron Korrelationsfunktion im Rahmen einer T-Matrix Näherung gefunden.

Im nichtentarteten Grenzfall, siehe Gl. (3.180), kann das Integral über S analytisch gelöst werden. Das Ergebnis

$$d_{33}^{\text{ee,TM}} = d \frac{\sqrt{2}}{4\tilde{\kappa}^2} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} Q_v^{\text{ee}}(K(x), M_{\text{ee}}), \quad (3.188)$$

stimmt mit früheren Arbeiten [MR82, Rö88, Red97] überein.

Wie auch der Transportquerschnitt der Elektron-Ion Stöße besteht der Viskositätsquerschnitt der Elektron-Elektron Stöße, Gl. (3.185), aus zwei Anteilen, dem totalen Wirkungsquerschnitt und der zu berücksichtigenden Winkelabhängigkeit. Wie bei den Elektron-Ion

Stößen auch, fallen Streuwinkel $\vartheta \approx 0^\circ$ weniger stark ins Gewicht, da der Transport unbeeinflusst bleibt. Unterschiedlich ist jedoch, dass der Viskositätsquerschnitt bei Streuwinkeln $\vartheta \approx 180^\circ$ ebenfalls verschwindet. Das kann physikalisch so verstanden werden, dass beide Elektronen an der Bewegung des Streuprozesses gleichermaßen beteiligt sind, und nicht etwa wie bei den Elektron-Ion Stößen der Streupartner (das Ion) praktisch fixiert ist. Dadurch ist die Elektronenverteilung bei Streuwinkeln $\vartheta \approx 180^\circ$ die Gleiche wie bei Streuwinkeln $\vartheta \approx 0^\circ$ und beeinflussen die Korrelation und damit den Transport nicht. Erwartungsgemäß wird der Beitrag maximal, wenn der Streuwinkel $\vartheta = 90^\circ$ beträgt.

4. TRANSPORTEIGENSCHAFTEN VOLLSTÄNDIG IONISIERTER PLASMEN

Mit den ausgewerteten Korrelationsfunktionen: die Kubo-Skalarprodukte in Abs. 3.1 sowie die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen der Elektron-Ion und Elektron-Elektron Stöße, Abs. 3.4 und 3.5, können die Onsager-Koeffizienten, Gl. (2.48), und daraus die thermoelektrischen Transportgrößen elektrische Leitfähigkeit σ , Gl. (2.4), die Thermokraft α , Gl. (2.7), sowie die Wärmeleitfähigkeit λ , Gl. (2.6), berechnet werden. Für eine bessere Vergleichbarkeit werden Transportgrößen üblicherweise durch dimensionslose Größen ausgedrückt

$$\sigma(n, T) = \frac{(4\pi\epsilon_0)^2}{\beta^{3/2} m^{1/2} e^2} \sigma^*(\Gamma, \Theta), \quad (4.1)$$

$$\sigma^* = \frac{s}{\mathcal{L}}, \quad \alpha = -a \frac{k_B}{e}, \quad \lambda = L \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T \sigma. \quad (4.2)$$

Hierbei sind s , a und die Lorentz-Zahl L dimensionslose Vorfaktoren der Transportgrößen. σ^* ist die dimensionslose, reduzierte Leitfähigkeit und \mathcal{L} der Coulomb-Logarithmus. Im Rahmen der Linearen-Response Theorie kann der Coulomb-Logarithmus \mathcal{L} durch die Kraft-Kraft Korrelationsfunktion d_{11} , Gl. (3.121), ausgedrückt werden, vgl. Gl. (3.79). Es gilt

$$\mathcal{L} = \frac{d_{11}}{Zd}, \quad (4.3)$$

wobei d in Gl. (3.56) definiert wurde.

Um Berechnungen auf T-Matrix Niveau durchzuführen, muss der Streuprozess genauer untersucht werden. Für den Elektron-Ion Streuprozess ist der Transportquerschnitt, für die Elektron-Elektron Stöße ist der Viskositätsquerschnitt von Interesse. Beide Streuquerschnitte werden in Abs. 4.1 in verschiedenen Näherungen analytisch berechnet und mit numerischen Ergebnissen verglichen. Fitformeln für die Streuquerschnitte werden vorgeschlagenen. Sie reduzieren den numerischen Aufwand stark. Mit diesen Streuquerschnitten sind Berechnungen der Transportgrößen für beliebige Dichten und Temperaturen unter Einbeziehung dynamischer Abschirmeffekte und starker Stöße möglich.

Speziell in Abs. 4.2 wird unter der Fragestellung nach dem Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf die elektrische Leitfähigkeit eine Fitformel für den Korrekturfaktor $R_{ee} = \sigma^{ei+ee}/\sigma^{ei}$ vorgestellt. Dabei wird außerdem die Konvergenz der Mehr-Momenten-Näherung auf die thermoelektrischen Transportgrößen in Abhängigkeit von der Ionenladung Z untersucht.

Abschließend wird in Abschnitt 4.3 mit Hilfe des vollständig ionisierten Plasmamodells die elektrische Leitfähigkeit warmen dichten Aluminiums berechnet und mit gegenwärtig verfügbaren Experimenten verglichen. Dabei werden insbesondere die Einflüsse von Strukturfaktor und Pseudopotential herausgearbeitet.

4.1 Streuquerschnitte der Elektron-Ion und Elektron-Elektron Stöße

Um Transporteigenschaften unter Berücksichtigung starker Stöße berechnen zu können, sind die Streuquerschnitte der kollidierenden Teilchen zu berechnen. Häufig wird dabei eine kompaktere Schreibweise gewählt

$$Q_{(n)}^{ec}(k) = 2\pi \int_{-1}^1 d\cos(\vartheta) [1 - \cos^n(\vartheta)] \left(\frac{d\sigma^{ec}}{d\Omega} \right). \quad (4.4)$$

Dabei beschreibt der erste Term der eckigen Klammer den totalen Wirkungsquerschnitt. Da allerdings nicht alle Stöße gleichermaßen den Transport beeinflussen, wird die Winkeleabhängigkeit des zweiten Terms gebraucht.

In dieser Arbeit werden im Rahmen der Zwei-Momenten Näherung nur der Transportquerschnitt der Elektron-Ion Stöße $Q_T^{ei} \equiv Q_{(1)}^{ei}$ sowie der Viskositätsquerschnitt der Elektron-Elektron Stöße $Q_v^{ee} \equiv Q_{(2)}^{ee}$ benötigt. Bei der Betrachtung höherer Momente, z.B. des siebten Moments \mathbf{P}_7 im Satz der relevanten Observablen, sind neben dem Viskositätsquerschnitt auch höhere Streuquerschnitte für die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen, z.B. $Q_{(4)}^{ee}$ bei d_{77}^{ee} , zu berücksichtigen, siehe [ARR⁺07].

4.1.1 Born'sche Näherung

In der Born'schen Näherung ist der differentielle Wirkungsquerschnitt über das Potential im Impulsraum gegeben

$$\left(\frac{d\sigma^{ec}}{d\Omega} \right)_B = \frac{m_{ec}^2 \Omega_N^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left[|V^{ec}(q)|^2 - \frac{\delta_{ec}}{2} |V^{ec}(q)V^{ec}(q')| \right]. \quad (4.5)$$

mit den Übertragungsimpulsen $q = \sqrt{2p^2[1 - \cos(\vartheta)]}$ und $q' = |\mathbf{p} + \mathbf{p}'| = \sqrt{2p^2[1 + \cos(\vartheta)]}$ sowie dem Kronecker-Delta δ_{ec} . Der hintere Summand berücksichtigt den Austauschterm bei identischen Teilchen; bei dessen Vernachlässigung wird vom direkten Term (Index: d) gesprochen. Aus Gl. (4.4) folgt für die entsprechenden Streuquerschnitte in Born'scher Näherung

$$Q_T^{ei,B}(K) = \frac{1}{4K} \left[\ln(1 + 4K) - \left(1 + \frac{1}{4K} \right)^{-1} \right], \quad (4.6)$$

$$Q_v^{ee,B}(K) = \frac{1}{4K} \left[\left(1 + \frac{1}{2K} \right) \ln(1 + 4K) - 2 \right], \quad (4.7)$$

$$Q_v^{ee,B}(K) = \frac{1}{4K} \left\{ \left[1 + \frac{1}{4K} \left(3 - \frac{1}{2+4K} \right) \right] \ln(1 + 4K) - \frac{5}{2} \right\}. \quad (4.8)$$

Im Rahmen der Born'schen Näherung sind Streuphasenberechnungen aus der Calogero-Gleichung möglich. Für schwache Potentiale sind die Streuphasen klein $\delta_\ell \ll 1$. Nach Entwicklung der Sinus- und Kosinusfunktion um kleine Streuphasen, vereinfacht sich die Calogero-Gleichung und kann direkt integriert werden [Cal67, Mes67]

$$\delta_\ell^{ec} = -\frac{2m_{ec}k}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 V_{ec}(r) j_\ell^2(kr). \quad (4.9)$$

Für das Debye-Potential können die Streuphasen der Born'schen Näherung kompakt dargestellt werden

$$\delta_\ell^{ec} = \sqrt{K} M_{ec} \int_0^\infty dR R e^{-R} j_\ell^2(\sqrt{K}R). \quad (4.10)$$

Damit ist die Born'sche Näherung nicht nur für schwache Potentiale $M \ll 1$ sondern auch für hohe kinetische Energien $K \gg M^2$ gültig.

Für die Korrelationsfunktionen, Gln. (3.121) und (3.187), folgt explizit, dass sie sich im Intervall $x \in [x_{\text{cut},0}, \infty)$ mit $x_{\text{cut},0} = \mathcal{O}(M^2 \tilde{\kappa}^2) = \mathcal{O}(\Gamma^2 \Theta)$ durch die Streuquerschnitte der Born'schen Näherung, Gln. (4.6)-(4.8), beschreiben lassen. Im Grenzfall $\Gamma^2 \Theta \ll 1$ ($T \gg 10^5$ K) kann das Integral praktisch über den gesamten Bereich in Born'scher Näherung berechnet werden.

Wie bereits in Abs. 3.4.3 erwähnt, entspricht die Korrelationsfunktionen, Gl. (3.121), mit dem Transportquerschnitt in Born'scher Näherung, Gl. (4.6), der Korrelationsfunktion in Born'scher Näherung, Gl. (3.134). Ebenso entspricht die Korrelationsfunktion, Gl. (3.187), mit dem direkten Term des Viskositätsquerschnitts in Born'scher Näherung, Gl. (4.7), der Korrelationsfunktion in Born'scher Näherung, (3.132), wobei Austauscheffekte vernachlässigt werden. Wird stattdessen der vollständige Viskositätsquerschnitt, Gl. (4.8), eingesetzt, werden Austauscheffekte im Rahmen der Born'schen Näherung berücksichtigt.

4.1.2 Klassische Streutheorie

In der klassischen Streutheorie werden die geladenen Stoßpartner als klassische Teilchen mit scharfem Ort und Impuls angenommen. Schematisch ist der klassische Streuprozess zwischen einem Elektron und einem Ion in Abb. 4.1 dargestellt.

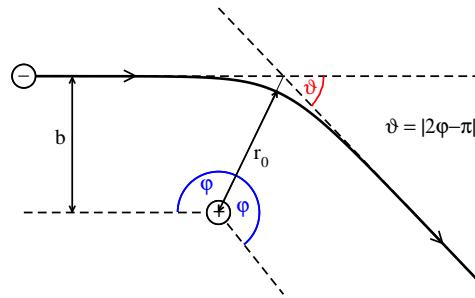


Abb. 4.1: Klassische Streuung eines Elektrons an einem positiv geladenen Ion.

Der Streuprozess kann abhängig vom Stoßparameter b beschrieben werden [LL76]:

$$\left(\frac{d\sigma^{ec}}{d\Omega} \right)_{\text{cl}} = \frac{b}{\sin(\vartheta)} \left(\frac{d\vartheta}{db} \right)^{-1}, \quad \vartheta = |2\varphi - \pi|, \quad \varphi = \int_{r_0}^\infty dr \frac{b}{r^2} \left[1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_k^e} \right]^{-1/2}, \quad (4.11)$$

wobei der Streuwinkel ϑ aus geometrischen Überlegungen folgt und der Winkel φ durch das Potential eindeutig bestimmt ist. Die Streuquerschnitte können zu

$$Q_{(n)}^{ec} = 2\pi \int_0^\infty db [1 - \cos^n \vartheta(b)] b, \quad (4.12)$$

transformiert werden. Für hohe kinetische Energien $K \gg M$ ist die Näherung für kleine Winkel $\vartheta \ll 1$ angemessen. Sie wurde von Liboff [Lib59] und Kihara [Kih59] durchgeführt und führt auf analytische Resultate für die klassischen Streuquerschnitte, siehe auch [HMS71],

$$Q_T^{ei,cl}(K, M) = \frac{1}{2K} \left[\ln \left(\frac{4K}{M} \right) - \gamma - \frac{1}{2} \right], \quad (4.13)$$

$$Q_v^{ee,cl}(K, M_{ee}) = \frac{1}{2K} \left[\ln \left(\frac{4K}{|M_{ee}|} \right) - \gamma - 1 \right]. \quad (4.14)$$

Verglichen mit der Born'schen Näherung, unterscheiden sich die klassischen Streuquerschnitte von den Streuquerschnitten in Born'schen Näherung bei hohen Energien $K \gg M$ um einen Faktor 2. Dies wurde auch von [HMS71] festgestellt und erinnert an die Streuung an harten Kugeln, bei der ebenfalls ein Unterschied von einem Faktor 2 aufgrund der Wellennatur des Elektrons entsteht. Im folgenden Abschnitt wird dieser Faktor 2 durch Berechnungen aus der semiklassischen (WKB) Näherung geklärt. So gilt für $K \gg M$ tatsächlich die asymptotische Form der semiklassischen Näherung, allerdings nur solange $K \ll M^2$. Für den Fall $K \gg M^2$ ist die Born'sche Näherung gültig.

Damit ist $K \ll M^2$ ein weiteres wichtiges Gültigkeitskriterium der klassischen Streutheorie. Für die Korrelationsfunktion bedeutet dies, dass sich das Integral über x in den Gln. (3.121), (3.187) im Intervall $x \in [x_{cut,1}, x_{cut,2}]$ mit $x_{cut,1} = \mathcal{O}(M\tilde{\kappa}^2) = \mathcal{O}(\Gamma^{3/2})$ und $x_{cut,2} = \mathcal{O}(M^2\tilde{\kappa}^2) = \mathcal{O}(\Gamma^2\Theta)$ durch die klassischen Streuquerschnitte beschreiben lässt. Im Grenzfall $\Gamma \ll 1$ und $\Gamma^2\Theta \gg 1$ ($T \ll 10^5$ K) kann das Integral praktisch über den gesamten Bereich im Rahmen der klassischen Streutheorie berechnet werden. Im klassischen Grenzfall folgt

$$d_{ll'}^{ei,cl} = Zd \int_0^\infty dx x^{\frac{l+l'}{2}-1} e^{-x} \left[\ln(x) - \ln(\tilde{\kappa}^2 M) - \gamma - \frac{1}{2} \right], \quad (4.15)$$

$$d_{33}^{ee,cl} = d\sqrt{2} \int_0^\infty dx x e^{-x} \left[\ln(x) - \ln(2\tilde{\kappa}^2 |M_{ee}|) - \gamma - 1 \right]. \quad (4.16)$$

Die Integrale sind analytisch lösbar, es folgt für die Korrelationsfunktionen ($|M_{ee}| = M/Z$)

$$d_{ll'}^{ei,cl} = Zd \Gamma \left(\frac{l+l'}{2} \right) \left\{ -\ln(\tilde{\kappa}^2 M) - \frac{1}{2} - 2\gamma + H_{\frac{l+l'}{2}-1} \right\}, \quad (4.17)$$

$$d_{33}^{ee,cl} = d\sqrt{2} \left\{ -\ln \left(\tilde{\kappa}^2 \frac{M}{Z} \right) - 2\gamma \right\}. \quad (4.18)$$

Bei effektiver Abschirmung gilt im Niederdichtegrenzfall: $M\tilde{\kappa}^2 = Z\sqrt{3}\sqrt{b_{ll'}^e + b_{ll'}^i Z}\Gamma^{3/2}/4$. Für $Z = 1$ und bei vollständiger statischer Abschirmung $b_e = b_i = 1$ werden die bekannten Ergebnisse von Redmer [Red97] reproduziert. Bei Vernachlässigung der Elektron-Elektron

Stöße führt Gl. (4.17) eingesetzt in Gl. (3.90) asymptotisch auf die Spitzer-Formel für die elektrische Leitfähigkeit von Lorentz-Plasmen [Spi67]

$$\sigma_{\text{ei}}^{\text{Sp}} = \frac{(4\pi\epsilon_0)^2}{\beta^{3/2}m^{1/2}e^2} \frac{1,016}{Z\mathcal{L}_{\text{Sp}}}, \quad \mathcal{L}_{\text{Sp}} = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{3\Gamma^{-3}}{Z^2(1+Z)} \right), \quad (4.19)$$

mit dem Coulomb-Logarithmus aus der Spitzer-Theorie \mathcal{L}_{Sp} , siehe auch [CSR50, SH53]. Die Ergebnisse von Spitzer basieren auf der Lösung der Boltzmann-Gleichung, in der der Stoßterm als Diffusionsprozess behandelt wird. Gemeinsam mit dem Drift-Term wird aus der Boltzmann-Gleichung eine Drift-Diffusions-Gleichung (Fokker-Planck Gleichung), welche numerisch gelöst wurde [CSR50, SH53]. Die Berücksichtigung von Elektron-Elektron Stößen ist möglich und wurde von Spitzer *et al.* durchgeführt. Der Einfluss wurde als Faktor dargestellt und beträgt für das vollständig ionisierte Wasserstoffplasma ($Z = 1$): $R_{\text{ee}}^{\text{Sp}} = \sigma_{\text{ei+ee}}^{\text{Sp}}/\sigma_{\text{ei}}^{\text{Sp}} = 0,582$. Anstelle des Vorfaktors $s_{\text{ei}}^{\text{Sp}} = s_{\text{ei}}^{\text{RTA}} = 1,016$, der ebenfalls aus der Relaxationszeitnäherung (RTA) erhalten wird, siehe [LM84], wurde eine Reduktion um fast einen Faktor 2 infolge von Elektron-Elektron Stößen gefunden $s_{\text{ei+ee}}^{\text{Sp}} = 0,591$.

Im Vergleich der Niederdichtegrenzfälle, Gln. (4.17), (4.18), aus der klassischen Streutheorie (anwendbar bei $\Gamma \ll 1$ und $\Gamma^2\Theta \gg 1$) mit Gln. (3.87), (3.142) aus der Born'schen Näherung (anwendbar bei $\tilde{\kappa}^2 \ll 1$ und $\Gamma^2\Theta \ll 1$) fällt auf, dass sie im führenden Term übereinstimmen ($\mathcal{L} \rightarrow -\ln(n_e)/2$). Abweichungen durch Effekte starker Stöße entstehen in höheren Termen, ähnlich wie bei der Berücksichtigung der dynamischen Abschirmung, siehe Abs. 3.4.2 und 3.5.2.

4.1.3 Wentzel-Kramers-Brillouin Methode (WKB Näherung)

Alternativ zur Calogero-Gleichung Gl. (3.120) können die Streuphasen aus der Lösung der radialen Schrödinger-Gleichung gewonnen werden, siehe beispielsweise [LL77, MM65].

Nach der Methode von Wentzel, Kramers und Brillouin - im Folgenden als WKB oder semiklassische Näherung bezeichnet - wird die Radialwellenfunktion um $\hbar \rightarrow 0$ entwickelt. Damit werden in dieser Näherung zwar Welleneigenschaften des gestreuten Elektrons weiterhin berücksichtigt, gequantelte Größen, wie beispielsweise die Anzahl der Bindungszustände aus dem Levinson-Theorem gehen verloren. Grundsätzlich ist die WKB Näherung daher für hohe kinetische Energien verglichen mit dem Potential $K \gtrsim M$ anwendbar. Aus den um $\hbar \approx 0$ entwickelten radialen Wellenfunktionen können die Streuphasen gewonnen werden, siehe [MM65, LL77]:

$$\delta_{\ell}^{\text{WKB},1} = \frac{\pi}{2} \left(\ell + \frac{1}{2} \right) - kr_0 + \int_{r_0}^{\infty} \left[\sqrt{k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m_{\text{ec}}}{\hbar^2} V(r)} - k \right] dr, \quad (4.20)$$

mit dem klassischen Umkehrpunkt $r_0 > 0$, definiert durch die Nullstelle des Wurzelausdrucks $\sqrt{k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2m_{\text{ec}}}{\hbar^2} V(r)}$. Für den Fall ($V \equiv 0$) folgt $\delta_{\ell}^{\text{WKB},1} = \frac{\pi}{2} \left(\ell + \frac{1}{2} - \sqrt{\ell(\ell+1)} \right)$, obwohl gar keine Streuung stattfindet ($\delta_{\ell} \equiv 0$). Für große Drehimpulse $\ell \gg 1$ wird diese fundamentale Bedingung asymptotisch erfüllt, weswegen die WKB Näherung auch vor allem bei höheren Partialwellen Anwendung findet. Von Langer [Lan37] wird eine Modifikation vorgeschlagen, die dieses Problem grundlegend behebt, $\sqrt{\ell(\ell+1)} \rightarrow \ell + \frac{1}{2}$, sodass die WKB Näherung auch für kleinere Streuphasen angewandt werden kann. *Langer's Trick* führt außerdem dazu, dass in WKB Näherung die Bindungsenergien eines attraktiven Coulomb-Potential korrekt

erhalten werden. Die Streuphasen in WKB Näherung sind nach *Langer's Trick* allgemein gegeben durch [MM65, Joa75]

$$\delta_\ell^{\text{WKB}} = \frac{\pi}{2} \left(\ell + \frac{1}{2} \right) - kr_0 + \int_{r_0}^{\infty} \left[\sqrt{k^2 - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2}{r^2} - \frac{2m_{\text{ec}}}{\hbar^2} V(r)} - k \right] dr, \quad (4.21)$$

und speziell für das Debye-Potential gilt

$$\delta_\ell^{\text{WKB}}(K, M) = \frac{\pi}{2} \left(\ell + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{K} R_0 + \int_{R_0}^{\infty} \left[\sqrt{K - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2}{R^2} + M \frac{e^{-R}}{R}} - \sqrt{K} \right] dR. \quad (4.22)$$

Zunächst wird der klassische Umkehrpunkt R_0 ermittelt. Zu lösen ist die algebraische Gleichung

$$0 = K - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2}{R_0^2} + M \frac{e^{-R_0}}{R_0}. \quad (4.23)$$

Bei festgehaltenen M und ℓ bewirken höhere Energien $K^{(2)} > K^{(1)}$ kleinere Nullstellen $R_0^{(2)} < R_0^{(1)}$. Für hohe Energien $K \gg M$ kann der exponentielle Term entwickelt werden $e^{R_0} \simeq 1 - R_0$ und die algebraische Gleichung lässt sich zu einer quadratischen Gleichung umformen. Sowohl für $K > M^2$ als auch für $\ell > \frac{M}{2\sqrt{K}} - \frac{1}{2}$ gilt

$$R_0 = \frac{\ell + \frac{1}{2}}{\sqrt{K}}. \quad (4.24)$$

Bei festgehaltenen K und M verschiebt sich die Nullstelle R_0 mit wachsendem $\ell^{(1)} > \ell^{(2)}$ zu höheren Werten $R_0^{(1)} > R_0^{(2)}$. Im Fall $\ell \gg \sqrt{K}$ ist der exponentiell abfallende Term vernachlässigbar, und man erhält ebenfalls Gl. (4.24) für die Nullstelle. Im Fall attraktiver Potentiale (Elektron-Ion Stöße) kann Gl. (4.23) bei niedrigen kinetischen Energien $K < M/5$ mehrere Nullstellen besitzen. In diesen Fällen ist die WKB Näherung nicht anwendbar.

Der Wurzelterm in Gl. (4.22) kann folgendermaßen umgeschrieben werden

$$\sqrt{K - \frac{\left(\ell + 1/2 \right)^2}{R^2} + M \frac{e^{-R}}{R}} = \sqrt{K - \frac{\left(\ell + 1/2 \right)^2}{R^2}} \sqrt{1 + \frac{M R e^{-R}}{K R^2 - \left(\ell + 1/2 \right)^2}}. \quad (4.25)$$

Nach der Entwicklung des hinteren Wurzelterms $\sqrt{1+x} = 1+x/2+\mathcal{O}(x^2)$ folgt eine einfache Darstellung der Streuphasen

$$\delta_\ell^{\text{WKB}} = \frac{1}{2} \frac{M}{\sqrt{K}} \int_{(\ell+1/2)/\sqrt{K}}^{\infty} \frac{e^{-R}}{\sqrt{R^2 - \frac{\left(\ell + \frac{1}{2} \right)^2}{K}}} dR + \mathcal{O}\left(\frac{M^2}{K}\right) \simeq \frac{1}{2} \frac{M}{\sqrt{K}} \mathcal{K}_0\left(\frac{\ell + \frac{1}{2}}{\sqrt{K}}\right). \quad (4.26)$$

$\mathcal{K}_0(x)$ ist die modifizierte Bessel-Funktion zweiter Art und besitzt die Eigenschaften

$$\mathcal{K}_0(x \ll 1) = -\ln\left(\frac{x}{2}\right) - \gamma + \mathcal{O}(x^2 \ln(x)), \quad \mathcal{K}_0(x \gg 1) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x}\right)\right). \quad (4.27)$$

Die Streuphasen wachsen zunächst logarithmisch an. In dem Übergang von $\ell \ll \sqrt{K}$ zu $\ell \gg \sqrt{K}$ fallen die Streuphasen rapide ab. Ab einer Stelle $\ell_{\text{cut}} = \mathcal{O}(\sqrt{K})$ tragen sie praktisch nichts mehr zu den Streuquerschnitten bei und können vernachlässigt werden. Um das zu veranschaulichen, werden die partiellen Streuquerschnitte eingeführt

$$\mathcal{Q}_{T,\ell}^{\text{ei}} = \ell \sin^2 [\delta_{\ell-1} - \delta_\ell], \quad (4.28)$$

$$\mathcal{Q}_{v,\ell}^{\text{ee}} = \left[1 + \frac{(-1)^\ell}{2} \right] \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \sin^2 [\delta_{\ell-1} - \delta_\ell]. \quad (4.29)$$

Mit den Streuphasen Gl. (4.26) gilt für die partiellen Streuquerschnitte

$$\mathcal{Q}_{T,\frac{M}{2\sqrt{K}} \ll \ell \ll \sqrt{K}}^{\text{ei}} \simeq \frac{\ell}{2K} \left[\ln \left(1 + \frac{1}{\ell - \frac{1}{2}} \right) \right]^2 \xrightarrow{\ell \gg 1} \frac{1}{2K\ell}, \quad (4.30)$$

$$\mathcal{Q}_{v,\frac{M}{2\sqrt{K}} \ll \ell \ll \sqrt{K}}^{\text{ee}} \simeq \frac{1}{4K} \left[1 + \frac{(-1)^\ell}{2} \right] \frac{\ell(\ell+1)}{2\ell+1} \left[\ln \left(1 + \frac{2}{\ell - \frac{1}{2}} \right) \right]^2 \xrightarrow{\ell \gg 1} \frac{1}{2K\ell}. \quad (4.31)$$

Für $\ell \gg \sqrt{K}$ fallen die partiellen Streuquerschnitte exponentiell, ein Abbruch der Reihe bei $\ell_{\text{cut}} = a\sqrt{K}$ wird angenommen

$$\mathcal{Q}_{T/v}^{\text{ei/ee}} = \sum_{\ell=1}^{\infty} \mathcal{Q}_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}} = \sum_{\ell=1}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} \mathcal{Q}_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}}. \quad (4.32)$$

Für den Fall hoher kinetischer Energien $K \gg M^2$ folgt für die Streuquerschnitte

$$\mathcal{Q}_T^{\text{ei}} = \frac{1}{2K} \left[\sum_{\ell=1}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} \frac{1}{\ell} + \Delta_{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor}^{\text{ei}} \right] = \frac{1}{2K} \left[\ln(a\sqrt{K}) + \gamma + \Delta_\infty^{\text{ei}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{K}}\right) \right], \quad (4.33)$$

$$\mathcal{Q}_v^{\text{ee}} = \frac{1}{2K} \left[\sum_{\ell=1}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} \frac{1}{\ell} + \Delta_{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor}^{\text{ee}} \right] = \frac{1}{2K} \left[\ln(a\sqrt{K}) + \gamma + \Delta_\infty^{\text{ee}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{K}}\right) \right], \quad (4.34)$$

mit $\Delta_x^{\text{ei}} = \sum_{\ell=1}^x \ell \ln^2 \left(1 + \frac{2}{2\ell-1} \right) - \frac{1}{\ell} = \Delta_\infty^{\text{ei}} + \mathcal{O}(x^{-1})$, wobei $\Delta_\infty^{\text{ei}} \approx 0,2419$, und $\Delta_x^{\text{ee}} = \sum_{\ell=1}^x \left[1 + \frac{(-1)^\ell}{2} \right] \frac{\ell(\ell+1)}{4\ell+2} \ln^2 \left(1 + \frac{4}{2\ell-1} \right) - \frac{1}{\ell} = \Delta_\infty^{\text{ee}} + \mathcal{O}(x^{-1})$, wobei $\Delta_\infty^{\text{ee}} \approx -0,6639$.

Gln. (4.33), (4.34) stimmen asymptotisch mit der Born'schen Näherung Gln. (4.6), (4.8) überein. Damit wird die Gültigkeit der Born'schen Näherung für $K \gg M^2$ gestützt. Durch Vergleich können die Parameter a jeweils fixiert werden $a^{\text{ei}} = 0,535$ und $a^{\text{ee}} = 0,625$. Genauer gilt $\ln(a^{\text{ei}}) + \Delta_\infty^{\text{ei}} = \ln(2) - \gamma - \frac{1}{2}$ und $\ln(a^{\text{ee}}) + \Delta_\infty^{\text{ee}} = \ln(2) - \gamma - \frac{5}{4}$.

Für den Fall moderater kinetischer Energien $K \gg M$ und $K < M^2$ lassen sich die Streuquerschnitte in zwei Anteile zerlegen

$$\mathcal{Q}_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}} = \sum_{\ell=1}^{\infty} \mathcal{Q}_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}} = \sum_{\ell=1}^{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} \mathcal{Q}_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}} + \sum_{\ell=2+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} \mathcal{Q}_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}}. \quad (4.35)$$

Der erste Anteil liefert dabei maximal

$$\sum_{\ell=1}^{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} Q_{T,\ell}^{\text{ei}} \leq \sum_{\ell=1}^{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} \frac{2}{M^2} \ell < \frac{1}{2K} \left(\frac{1}{2} + \frac{3\sqrt{K}}{M} + \frac{4K}{M^2} \right), \quad (4.36)$$

$$\sum_{\ell=1}^{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} Q_{v,\ell}^{\text{ee}} \leq \sum_{\ell=1}^{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} \frac{1}{M^2} \ell < \frac{1}{2K} \left(\frac{1}{4} + \frac{3\sqrt{K}}{2M} + \frac{2K}{M^2} \right), \quad (4.37)$$

und ist gegenüber dem zweiten Anteil klein

$$\sum_{\ell=2+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} Q_{T/v,\ell}^{\text{ei/ee}} = \frac{1}{2K} \left[\sum_{\ell=2+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} \frac{1}{\ell} + \Delta_{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} - \Delta_{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} \right], \quad (4.38)$$

$$\sum_{\ell=2+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} Q_{T,\ell}^{\text{ei}} \simeq \frac{1}{2K} \left[\ln \left(\frac{4K}{2\sqrt{K} + M} \right) - \gamma - \frac{1}{2} - \Delta_{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} \right], \quad (4.39)$$

$$\sum_{\ell=2+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor}^{\lfloor a\sqrt{K} \rfloor} Q_{v,\ell}^{\text{ee}} \simeq \frac{1}{2K} \left[\ln \left(\frac{4K}{2\sqrt{K} + M} \right) - \gamma - \frac{5}{4} - \Delta_{1+\lfloor \frac{M}{2\sqrt{K}} \rfloor} \right]. \quad (4.40)$$

Zu bemerken ist, dass neben dem ersten Anteil auch höhere Entwicklungsterme der Wurzel, Gl. (4.25), im Fall $K \ll M^2$ Beiträge $\propto 1/K$ liefern. Dennoch wird der führende Term $\ln(K/M)/2K$ durch den zweiten Anteil gegeben und stimmt asymptotisch mit den klassischen Streuquerschnitten, Gln. (4.13), (4.14), überein. Die WKB Näherung bietet somit als übergeordnete Näherung im Niederdruckgrenzfall ($\Gamma \ll 1$) eine geeignete Interpolation zwischen Born'scher Näherung für hohe Temperaturen ($\Gamma^2 \Theta \ll 1$) und der klassischen Streutheorie für tiefe Temperaturen ($\Gamma^2 \Theta \gg 1$).

Allerdings ist der Gültigkeitsbereich der WKB Näherung weitergefasst. Bereits bei kleineren Energien $K \approx M > 1$ werden gute Übereinstimmungen zwischen der WKB Näherung und den numerisch ermittelten Streuphasen beobachtet, siehe Abb. 4.2 (b). Das erlaubt mit Hilfe der WKB Näherung weitere Analysen der Streuquerschnitte durchzuführen. Numerische Berechnungen in dieser Arbeit ergaben ein globales Maximum der Streuquerschnitte bei

$$Q_{T,\max}^{\text{ei}}(K, M \gtrsim 8) \approx Q_T^{\text{ei}}(K = 0,25M, M \geq 8) \approx 0,8/M, \quad (4.41)$$

$$Q_{v,\max}^{\text{ee}}(K, M \gtrsim 8) \approx Q_v^{\text{ee}}(K = M, M \geq 8) \approx 0,19/(M + 1). \quad (4.42)$$

Unter Beachtung dieses Resultats und der zuvor berechneten Grenzfälle werden im nächsten Abschnitt Interpolationsformeln für den Elektron-Ion Transportquerschnitt und den Elektron-Elektron Viskositätsquerschnitt angegeben.

4.1.4 Fitformeln und Vergleich mit numerischen Daten

Zur vereinfachten Handhabung der T-Matrix Näherung erweisen sich analytische Formeln für Streuphasen oder gar für die Streuquerschnitte als hilfreich. Dazu werden zunächst numerische Ergebnisse der Streuphasen mit den Formeln aus der Born'schen Näherung, Gl. (4.10), und der WKB Näherung, Gl. (4.22), verglichen. Anschließend werden die Verläufe der Transportquerschnitte für verschiedene Stärken des Potentials M_{ec} analysiert und mit Fitformeln verglichen.

In Abb. 4.2 sind dazu Streuphasenrechnungen für ein schwaches Potential ($M = \pm 0,1$) und für ein starkes Debye-Potential ($M = \pm 10$) gezeigt. Bei hohen Energien und höheren Drehimpulsquantenzahlen ℓ sind die Streuphasen klein und werden sowohl durch die WKB Näherung als auch durch die Born'schen Näherung gut beschrieben. Beide Näherungen gehen ineinander über.

Bei schwachen Potential ist eine Symmetrie der Streuphasen für attraktive ($M > 0$) und repulsive Potentiale ($M < 0$) zu erkennen. Schwache Stöße werden wie erwartet entsprechend der symmetrischen Born'schen Näherung beschrieben. Durch die WKB Näherung kann lediglich der qualitative Verlauf der Streuphasen verstanden werden. Hingegen bei starken Potentialen eignet sich die WKB Näherung im Rahmen ihrer Auswertbarkeit ($K > M/5$), da Bindungszustände bedingt durch das Levinson Theorem nicht reproduziert werden können. In der Born'schen Näherung werden ebenfalls keine Bindungszustände berücksichtigt, für die Born'schen Streuphasen gilt stets $\delta_\ell(0) = 0$.

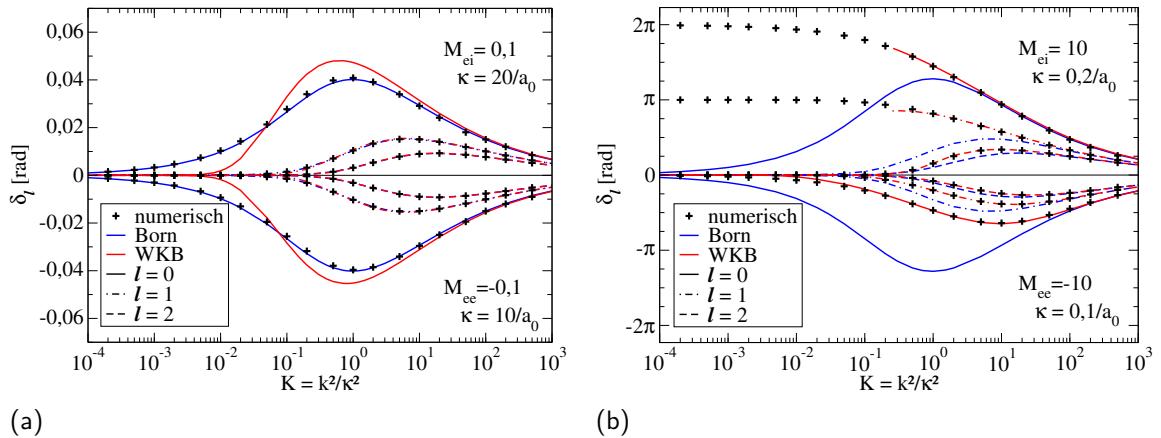


Abb. 4.2: Elektron-Ion und Elektron-Elektron Streuphasen δ_ℓ für $\ell = 0; 1; 2$ für ein (a): schwaches ($|M| = 0,1$) und (b) starkes ($|M| = 10$) Debye-Potential. Numerische Ergebnisse (+) werden mit den Formeln der Born'schen Näherung (blau), Gl. (4.10), und der WKB Näherung (rot), Gl. (4.22), verglichen.

Die Bindungszustände beeinflussen den Transportquerschnitt strukturell. Abb. 4.3 zeigt den skalierten Transportquerschnitt der Elektron-Ion Stöße. Für schwache Potentiale $0 < M < 1,7$ steigt der skalierte Transportquerschnitt an, siehe Abb. 4.3 (a). Bei etwa $M \approx 1,7$ bildet sich der 1s-Zustand. Dieser bewirkt ein Absenken für $M > 1,7$, welches zunächst regulär erfolgt, siehe Abb. 4.3 (b). Allerdings führt der Aufbau des 2s-Zustandes bei etwa $M = 6,45$ zur Ausprägung einer Schulter im skalierten Transportquerschnitt. Diese und weitere Bindungszustände bilden für kleine Energien ($K \ll M$) Strukturen im Transportquerschnitt aus, siehe Abb. 4.3 (b). Für die Korrelationsfunktionen sind sie vor allem bei tiefen Temperaturen $T < 10^4$ K von Interesse. Für die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen in Plasmasystemen spielen sie eine untergeordnete Rolle. Damit können vereinfachte Fitformeln konstruiert werden, die derartige Strukturen nicht erfassen. Für den skalierten Elektron-Ion

Transportquerschnitt wird die folgende Fitformel vorgeschlagen ($M \geq 7$):

$$\mathcal{Q}_T^{ei}(K, M) = \frac{1}{4K} \left\{ \ln \left[1 + 4K \frac{g(K, M)}{h(K, M)} \right] - \left(1 + \frac{1}{4K} \right)^{-1} \right\}, \quad (4.43)$$

$$g^{ei}(K, M) = \frac{e^{(1+\frac{1}{4K})^{-1}} - 1}{4K} \left[0,40 \left(M - \frac{13}{M} \right)^2 - 1 \right] + 1 + q^{ei}(K, M), \quad (4.44)$$

$$h^{ei}(K, M) = 0,40 \left(M - \frac{13}{M} \right)^2 + q^{ei}(K, M), \quad (4.45)$$

$$q^{ei}(K, M) = 0,50K + 2,4\sqrt{KM}. \quad (4.46)$$

Die Fitformel ähnelt in ihrem Aufbau der Born'schen Näherung, Gl. (4.6). In der Konstruktion der Korrekturen $g(K, M)$ und $h(K, M)$ wurde die Nichtnegativität sichergestellt. Die im vorigen Abschnitt diskutierten Grenzfälle der WKB Näherung werden reproduziert.

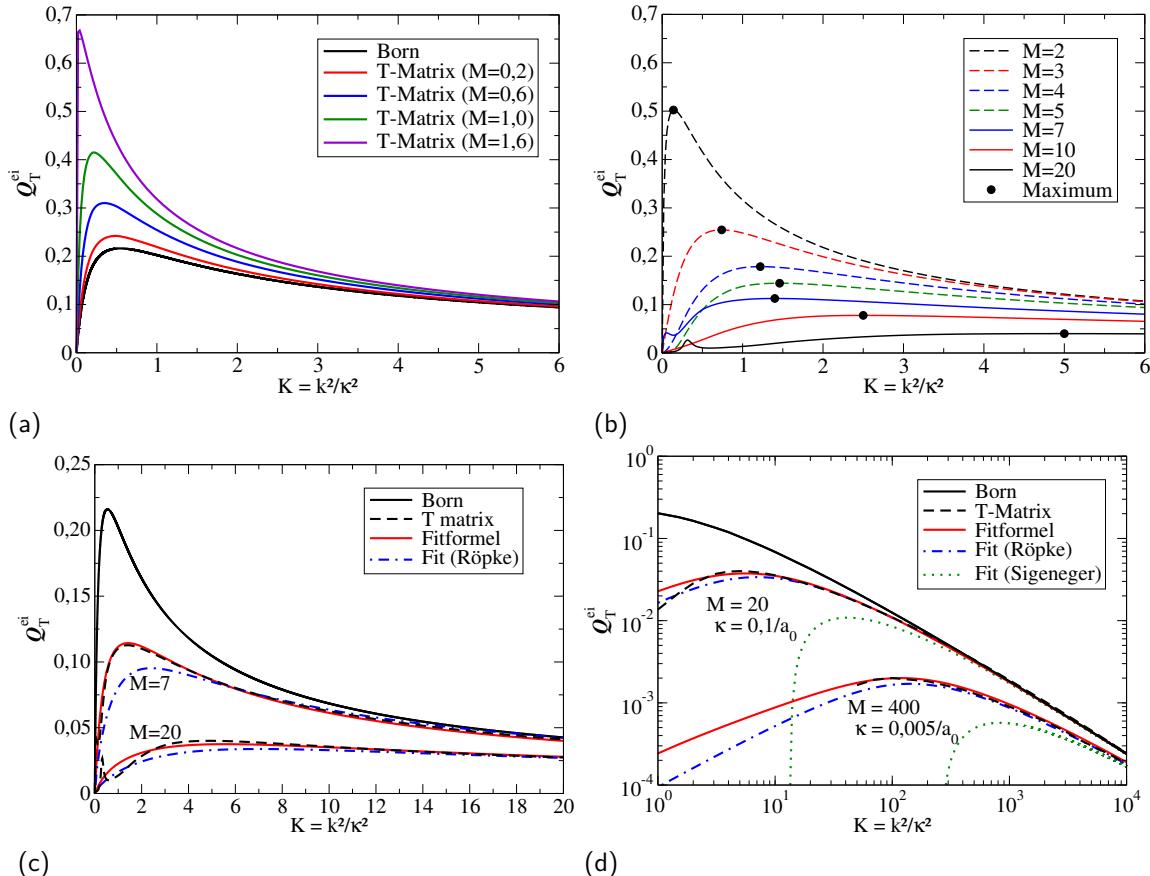


Abb. 4.3: Skalierter Elektron-Ion Transportquerschnitt \mathcal{Q}_T^{ei} für verschiedene Potentialstärken $M = 2Z/(\kappa a_0)$. Numerische Resultate der T-Matrix werden mit Fitformeln aus dieser Arbeit, Gl. (4.43), von Röpke und Redmer [RR89] und Sigeneger *et al.* [SAR⁺88] verglichen.

In den Abb. 4.3 (c),(d) wird die vorgeschlagene Fitformel mit numerischen T-Matrix Rechnungen sowie anderen Fitformeln von Röpke und Redmer [RR89] und Sigeneger *et al.*

[SAR⁺88] verglichen. Die numerischen Rechnungen erfolgten für $M < 100$ durch Lösen der Calogero-Gleichung mittels Runge-Kutta Verfahren, sowie dem Lösen der radialen Schrödinger-Gleichung mit dem Numerov Verfahren, siehe [SAR⁺88], für $M > 100$ wurde die WKB Näherung benutzt. Mit der vorgeschlagenen Fitformel, Gl. (4.43), lassen sich die numerischen Transportquerschnitte sehr gut approximieren. Gute Übereinstimmungen sind teilweise auch mit der Fitformel von Röpke und Redmer [RR89] zu finden. Die Formel von Sigeneger *et al.* [SAR⁺88] ist für die Beschreibung des Elektron-Ion Transportquerschnittes weniger gut geeignet. Verbesserungen der vorgeschlagenen Fitformel sind vor allem bei kleineren Energien erforderlich. So besteht beispielsweise die Möglichkeit den Einfluss der Bindungszustände detaillierter zu analysieren und besser zu berücksichtigen. Vor allem für starke Potentiale ($M > 100$) sind sorgfältige numerische Auswertungen vor allem für kleinere Energien nötig, in denen eine Berechnung der Streuphasen durch die WKB Näherung nicht möglich ist.

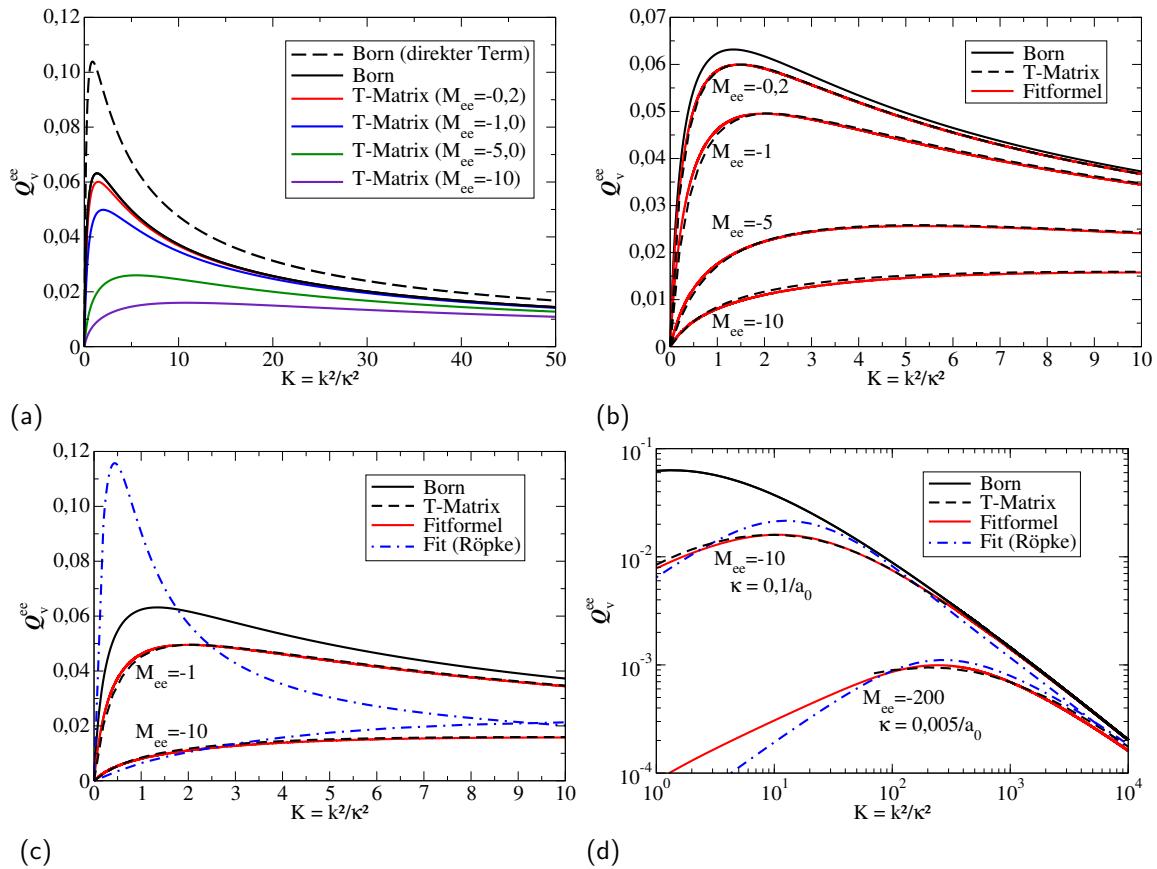


Abb. 4.4: Skalierter Elektron-Elektron Viskositätsquerschnitt \mathcal{Q}_v^{ee} für verschiedene Potentialstärken $M_{ee} = -1/(\kappa a_0)$. Numerische Resultate der T-Matrix werden mit Fitformeln aus dieser Arbeit, Gl. (4.47), und von Röpke und Redmer [RR89] verglichen.

Da für repulsive Potentiale ($M_{ee} < 0$) keine Bindungszustände vorliegen, ist für alle Abschirmparameter ein reguläres Verhalten beobachtbar, siehe Abb. 4.4 (a). Damit vereinfacht sich die Analyse gegenüber den Elektron-Ion Stößen drastisch, und die folgende Fitformel für den (skalierten) Viskositätsquerschnitt der Elektron-Elektron Stöße, anwendbar für beliebige

Potentialstärken M_{ee} , wird vorgeschlagen:

$$\mathcal{Q}_{\text{v}}^{\text{ee}} = \frac{1}{4K} \left\{ \left[1 + \frac{1}{4K} \left(3 - \frac{1}{2+4K} \right) \right] \ln \left[1 + 4K \frac{g^{\text{ee}}(K, M_{ee})}{h^{\text{ee}}(K, M_{ee})} \right] - \frac{5}{2} \right\}, \quad (4.47)$$

$$g^{\text{ee}}(K, M_{ee}) = \frac{e^{\frac{5}{2}[1+\frac{1}{4K}(3-\frac{1}{2+4K})]^{-1}} - 1}{4K} (0,20M_{ee}^2 + |M_{ee}|) + 1 + q^{\text{ee}}(K, M_{ee}), \quad (4.48)$$

$$h^{\text{ee}}(K, M_{ee}) = 0,20M_{ee}^2 + |M_{ee}| + 1 + q^{\text{ee}}(K, M_{ee}), \quad (4.49)$$

$$q^{\text{ee}}(K, M_{ee}) = 0,10K + 0,65\sqrt{K(|M_{ee}| + 10)}. \quad (4.50)$$

Wie schon die Fitformel des Elektron-Ion Transportquerschnitts, Gl. (4.43), ähnelt auch diese Fitformel in ihrem Aufbau der Born'schen Näherung, Gl. (4.6). In der Konstruktion der Korrekturen $g(K, M)$ und $h(K, M)$ wurde die Nichtnegativität sichergestellt. Numerische Berechnungen, die insbesondere den Übergang in die Born'sche Näherung ($M \rightarrow 0$) zeigen, wurden dabei ebenso berücksichtigt, wie die Grenzfälle der WKB Näherung bei starken Potentialen, siehe Abs. 4.1.3.

In Abb. 4.4 (b)-(d) wird die vorgeschlagene Fitformel mit numerisch berechneten T-Matrix Rechnungen und der Fitformel von Röpke und Redmer [RR89] verglichen. Sehr gute Übereinstimmungen können mit der vorgeschlagenen Fitformel erzielt werden, die Fitformel von Röpke und Redmer zeigt starke Abweichungen, die möglicherweise auf die Behandlung des Austauschterms zurückzuführen sind, der für die Elektron-Elektron Stöße eine wesentliche Rolle spielt. Auch für die vorgeschlagene Fitformel sind Verbesserungen bei kleinen Energien ($K \ll M$) bei starken Potentialen ($|M_{ee}| > 100$) denkbar. Dazu sind allerdings weitere sorgfältige numerische Auswertungen jenseits der WKB Näherung erforderlich.

Mit Hilfe der berechneten Elektron-Ion Transportquerschnitte und Elektron-Elektron Viskositätsquerschnitte ist die Analyse von Transportgrößen möglich. Speziell die Fragestellung nach dem Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf die elektrische Leitfähigkeit wird im nächsten Abschnitt aufgegriffen und für beliebige Entartungsparameter Θ und Ionenladungen Z in einem großen Temperaturbereich $T = 10^3 - 10^8$ K untersucht.

4.2 Einfluss der Elektron-Elektron-Stöße auf Transporteigenschaften vollständig ionisierter Plasmen

Die Frage nach dem Einfluss der Elektron-Elektron Stößen auf Transporteigenschaften wie der elektrischen Leitfähigkeit beschäftigt die theoretischen Physiker seit mehreren Jahrzehnten. In verschiedenen Arbeit von Spitzer *et al.* [CSR50, SH53] wird ausgehend von der Boltzmann-Gleichung der Stoßterm als Diffusionsprozess behandelt. Es entsteht eine Fokker-Planck Gleichung, die sowohl Elektron-Ion als auch Elektron-Elektron Stöße enthält. Der Vergleich lieferte schließlich einen faktoriellen Unterschied zwischen der Lorentz-Leitfähigkeit σ^{ei} (ohne Elektron-Elektron Stöße) und der totalen Leitfähigkeit

$$\sigma^{\text{ei+ee}} = R_{\text{ee}}^{\text{Spitzer}} \sigma^{\text{ei}}, \quad (4.51)$$

wobei $R_{\text{ee}}^{\text{Spitzer}}$ einen Korrekturfaktor nach Spitzer darstellt. Er kann auf Berechnungen angewandt werden, die Elektron-Elektron Stöße grundsätzlich vernachlässigen, wie beispielsweise die einfach handhabbare Relaxationszeitnäherung. So stellten beispielsweise Lee und More [LM84] eine einfache Lösung der Boltzmann-Gleichung über die Relaxationszeitnäherung vor, und konnten wesentliche Ergebnisse von Spitzer wie die Vorfaktoren der Transportgrößen für

das Modell des Lorentz-Plasmas reproduzieren. Umgekehrt bietet der Korrekturfaktor auch Experimentatoren die Möglichkeit, gemessene Daten mit einfachen Modellen zu vergleichen.

Die Spitzer-Theorie sowie auch die Relaxationszeitnäherung nach Lee und More beschreiben lediglich die Transportgrößen im Niederdichtegrenzfall. Im hochentarteten Grenzfall $\Theta \ll 1$ führt die Relaxationszeitnäherung auf die sogenannte Ziman-Formel. Obwohl die Ziman-Formel als Relaxationszeitnäherung Elektron-Elektron Stöße vernachlässigt, ist sie bei der Beschreibung der elektrischen Leitfähigkeit dichter Systeme wie z.B. bei flüssigen Metallen [RRR⁺92] oder Weißen Zwergen und Neutronensternen [FI76] erfolgreich. Die naheliegende Interpretation, dass für entartete Systeme die Elektron-Elektron Stöße keine Rolle spielen, führt auf verschiedene empirische Ansätze, den Korrekturfaktor dichte- und temperaturabhängig durch den Entartungsparameter $\Theta(n, T)$ darzustellen. So wurde von Stygar *et al.* [SGF02] ($Z = 1$)

$$R_{ee}^{\text{Stygar}}(\Theta) = 0,582 + \frac{0,418}{1 + 0,6 \ln \left(1 + \frac{\Theta}{20} \right)}, \quad (4.52)$$

der Korrekturfaktor aus Vergleich mit der LRT angefittet. Fortov *et al.* [FTZ⁺03] schlagen die folgende Fitformel vor ($Z = 1$)

$$R_{ee}^{\text{Fortov}}(\Theta) = 0,582 + \frac{0,418}{\sqrt{1 + \Theta^2}}. \quad (4.53)$$

Die Annahme, den Korrekturfaktor durch den Entartungsparameter darzustellen, wird im Rahmen des quantenstatistischen Zugangs in Abs. 4.2.2 überprüft. Da die Frage nach der Relevanz der Elektron-Elektron Stöße mit jener der höheren Momente einhergeht, siehe Abs. 3.5, wird zuvor in Abs. 4.2.1 der Einfluss höherer Momente für beliebige Ionenladungen Z im Niederdichtegrenzfall untersucht. Dichteabhängige Berechnungen für das Modell des vollständig ionisierten Wasserstoffs $Z = 1$ werden in Abs. 4.2.3 mit MD Simulationen verglichen.

4.2.1 Der Einfluss höherer Momente

In dem Zugang der Linearen-Response Theorie entspricht die Ein-Moment Näherung der Ziman-Formel aus der kinetischen Theorie. Sie setzt allerdings eine Gleichgewichtsverteilung der Elektronen voraus (Fermi-Verteilung). Allerdings hemmt der Elektron-Ion Stoßprozess nicht nur die Ladungsträger des elektrischen Stromes, sondern ändert (deformiert) ihre Verteilung. In der kinetischen Theorie kann dies durch eine Entwicklung der Verteilungsfunktion nach einem orthonormalen Funktionssystem z.B. nach Sonine-Polynomen [CC53, SF58] oder Hermiteschen Polynomen [Gra58] erfolgen. In der Lineraren-Response Theorie wird dies im Rahmen der Mehr-Momenten Näherung erzielt. In der Mehr-Momenten Näherung ist zudem eine explizite Berücksichtigung der Elektron-Elektron Stöße möglich.

Die Deformation der Verteilungsfunktion wirkt sich im Niederdichtegrenzfall als ein von der Temperatur unabhängiger Faktor aus. Durch die Berücksichtigung höherer Momente wird eine Konvergenz zu diesem Faktor gezeigt. Werden Elektron-Elektron-Stöße vernachlässigt, so ist der Faktor, sobald das 4. Moment berücksichtigt wird, konvergiert. Doch bereits mit dem 3. Moment sind die Abweichungen unter 5%, siehe Tab. 4.1.

In [HRRW84] wurde vereinfacht angenommen, dass sich die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen auf gleiche Weise auswerten lassen, wie die Elektron-Ion Korrelationsfunktionen. Für die Sätze ungeradzahliger Momente des Energietransports, $\{\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_3, \mathbf{P}_5, \dots\}$, wurden

genauere Auswertungen der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen durchgeführt, siehe [RRT89]; eine Korrektur bei Berücksichtigung geradzahliger Momente blieb bislang aus. Eine wesentliche Schwierigkeit ist dabei, dass die $f_{ll'}^{ee}$ -Terme bei entsprechenden Korrelationsfunktionen keine für die Auswertung des Dreifach-Integrals einfachen Polynome liefern. In dieser Arbeit ist erstmals eine Auswertung gelungen, siehe Abs. 3.5.1. Hierfür sind die $f_{ll'}^{ee}$ -Terme für die Berechnung des Niederdichtegrenzfalls in eine Taylor-Reihe um $Q = 0$ entwickelt worden. Dieser langwellige Grenzfall wird durch den Mittelwertsatz der Integralrechnung gestützt, siehe Abs. 3.5.1 und 3.5.2.

Tab. 4.1: Vorfaktoren der elektrischen Leitfähigkeit s , der Thermokraft a und der Wärmeleitfähigkeit L im Niederdichtegrenzfall des vollständig ionisierten Wasserstoffs ($Z = 1$) bei Vernachlässigung (ei) und Berücksichtigung der Elektron-Elektron Stöße (ei + ee).

	s^{ei}	$s^{\text{ei+ee}}$	a^{ei}	$a^{\text{ei+ee}}$	L^{ei}	$L^{\text{ei+ee}}$
<i>Kinetische Theorie</i>						
Fokker-Planck-Gleichung [SH53]	1,0159	0,5908	1,5000	0,7033	4,0000	1,6218
Relaxationszeitnäherung [LM84]	1,0159	-	1,5000	-	4,0000	-
Grad's 13-Momente [Gra58]	0,972	0,578	1,154	0,804	3,678	1,621
Kohlers Variationsverfahren [App61]	1,01	0,58	1,52	0,72	3,84	1,64
<i>Lineare-Response-Theorie</i>						
Ein-Moment P_1 [HRRW84]	0,2992	0,2992	-	-	-	-
Sätze ungerader Momente $\{P_l\}$						
$l \in \{1; 3\}$ [RRT89]	0,9724	0,5781	1,1538	0,8040	0,5917	0,6936
$l \in \{1; 3; 5\}$ [RRT89]	1,0145	0,5834	1,5207	0,7110	3,6781	1,6215
$l \in \{1; 3; 5; 7\}$ [RRT89]	1,0157	0,5875	1,5017	0,7139	3,9876	1,6113
$l \in \{1; 3; 5; 7; 9\}$ [RRT89]	1,0158	0,5892	1,5004	0,7093	3,9978	1,6140
$l \in \{1; 3; 5; 7; 9; 11\}$ [KRRR13]	1,0159	0,5900	1,5001	0,7067	3,9993	1,6167
Sätze ganzer Momente $\{P_l\}$						
$l \in \{1; 2\}$	0,8322	0,5855	-	-	-	-
$l \in \{1; 2; 3\}$	1,0077	0,5903	1,3818	0,6846	2,0027	1,3515
$l \in \{1; 2; 3; 4\}$	1,0159	0,5910	1,5000	0,7007	3,7055	1,5806
$l \in \{1; 2; 3; 4; 5\}$	1,0159	0,5911	1,5000	0,7035	3,9946	1,6181
$l \in \{1; 2; 3; 4; 5; 6\}$	1,0159	0,5911	1,5000	0,7030	4,0000	1,6210
Sätze ausgewählter Momente $\{P_l\}$						
$l \in \{1; 3; 4\}$	1,0159	0,5857	1,5000	0,6947	3,2464	1,5908
$l \in \{1; 3; 6\}$	1,0110	0,5816	1,5195	0,7287	3,9412	1,6046
$l \in \{1; 2; 3; 6\}$	1,0151	0,5911	1,5031	0,7032	3,9907	1,6191
$l \in \{1; 3; 4; 6\}$	1,0159	0,5896	1,5000	0,7091	4,0000	1,6112
$l \in \{1; 2; 3; 4; 6\}$	1,0159	0,5911	1,5000	0,7033	4,0000	1,6205

Die Werte für die Stärke der Korrelationsfunktionen $B_{ll'}^{ee}$ sind in Tab. 3.1 angegeben. Mit Hilfe dieser Werte ist die Berechnung der dimensionslosen Vorfaktoren der Transportgrößen möglich. Ergebnisse für das vollständig ionisierte Wasserstoffplasma ($Z = 1$) sind in Tab. 4.1 dargestellt. Hierbei werden bekannte Resultate aus der Kinetischen Theorie mit dem Zugang der Linearen-Response-Theorie verglichen, in der wiederum verschiedene Sätze von relevanten

Observablen betrachtet wurden. Grundsätzlich ist eine gute Übereinstimmung zwischen Kinetischer Theorie und der Linearen-Response-Theorie zu erkennen. Speziell in der 3-Momenten-Näherung liegen Abweichungen unterhalb von 3% vor, für die elektrische Leitfähigkeit sogar schon in einer Zwei-Momenten-Näherung. Wie in Abs. 3.4.1 bereits gezeigt, und von Höhne *et al.* [HRRW84] diskutiert, können unter Einbeziehung des vierten Moments konvergierte (exakte) Werte des Vorfaktors der elektrischen Leitfähigkeit und der Thermokraft für das Lorentz-Plasma (ohne ee-Stöße) gefunden werden. Die zusätzliche Berücksichtigung des sechsten Momentes liefert den konvergierten (exakten) Wert für die Lorentz-Zahl $L^{ei} = 4$. Bei der Berücksichtigung von Elektron-Elektron Stößen ist unter Einbeziehung des zweiten Moments eine deutlich schnellere Konvergenz sichtbar. Da anders als bei den Elektron-Ion Korrelationsfunktionen bisher kein systematisches Verhalten der Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen in l und l' , insbesondere für $B_{ll'}^{ee}$, angegeben werden kann, sind Berechnungen exakter Werte für die Vorfaktoren der Transportgrößen unter Berücksichtigung der Elektron-Elektron Stöße bislang nicht möglich. Somit hängen die Ergebnisse, wenn auch nur schwach, vom Satz der relevanten Observablen ab.

In Abb. 4.5 ist die explizite Abhängigkeit der Vorfaktoren von der Ionenladung Z dargestellt. Durch den kontinuierlichen Verlauf können partiell ionisierte Systeme über eine effektive Ladungszahl Z berücksichtigt werden. Neben den Ergebnissen der Kinetischen Theorie sind die Ergebnisse verschiedener Sätze ausgewählter Momente als relevante Observablen gezeigt. Im Detail wurden neben dem ersten Moment (Gesamtmpuls \mathbf{P}_1) die Zunahme höherer Momente untersucht. Eine rasche Konvergenz ist festzustellen, die die Betrachtung eines endlichen Satzes relevanter Observablen rechtfertigt. Für die Vorfaktoren des thermoelektrischen Transports können bereits in der Drei-Momenten Näherung sehr gute Übereinstimmungen mit den Rechnungen von Spitzer erzielt werden. Korrekturen zur Vier-Momenten Näherung sind für die elektrische Leitfähigkeit und für die Thermokraft kaum sichtbar. Auch für die Lorentz-Zahl sind Abweichungen klein, wenn neben dem ersten und dritten Moment das sechste Moment hinzugenommen wird.

In Abb. 4.5 (b) sind die Abweichungen der elektrischen Leitfähigkeitsvorfaktoren berechnet in Zwei-Momenten Näherung $s_{cl}^{(2)}$ mit Rechnungen aus einer Sechs-Momenten Näherung $s_{cl}^{(6)}$ (Satz: $\{\mathbf{P}_1; \dots; \mathbf{P}_6\}$) gezeigt. Die Güte wird durch relative Abweichungen bestimmt

$$\Delta s_{cl} = \frac{s_{cl}^{(6)} - s_{cl}^{(2)}}{s_{cl}^{(6)}}. \quad (4.54)$$

Es erscheint, dass das zweite Moment \mathbf{P}_2 für kleine Ladungszahlen $Z < 3$ und das vierte Moment \mathbf{P}_4 für große Ladungszahlen $Z \geq 3$ geeignet sind. Das dritte Moment (Wärmestrom \mathbf{P}_3) eignet sich hingegen durchweg, Fehler < 6%, für die Beschreibung der elektrischen Leitfähigkeit. Es wird daher in den späteren Kapiteln in einer Zwei-Momenten Näherung mit dem Gesamtmpuls \mathbf{P}_1 und dem Wärmestrom \mathbf{P}_3 als relevante Observablen gearbeitet.

Die Abb. 4.5 (d) und (f) zeigen analog zu Abb. 4.5 (b) die Abweichungen der Vorfaktoren der Thermokraft und der Lorentz-Zahl. Δa_{cl} und ΔL_{cl} sind analog zu Gl. (4.54) definiert. Da die Zwei-Momenten Näherung allerdings nicht ausreichend ist, vgl. mit Abb. 4.5 (c) und (e), werden Sätze der Drei-Momenten Näherung angeschaut. Die Drei-Momenten Näherung stellt eine deutliche Verbesserung zur Zwei-Momenten Näherung dar. Für das ungerade Moment \mathbf{P}_5 liegen die Abweichungen unterhalb von 5% bei dem Vorfaktor der Thermokraft und bei bis zu 8% bei der Lorentz-Zahl. Die ungeraden Momente sind insofern von Interesse, da sich die entsprechenden Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen bislang als Einzige für

beliebige Dichten auswerten lassen. Trotzdem fällt besonders das sechste Moment \mathbf{P}_6 auf. Einerseits liefert es gemeinsam mit dem vierten Moment den exakten Wert der Lorentz-Zahl bei Vernachlässigung der Elektron-Elektron Stöße, siehe Abs. 3.4.1, und andererseits sind auch mit Elektron-Elektron Stößen (sogar ohne das vierte Moment) die Abweichungen zur Lorentz-Zahl unterhalb von 4%.

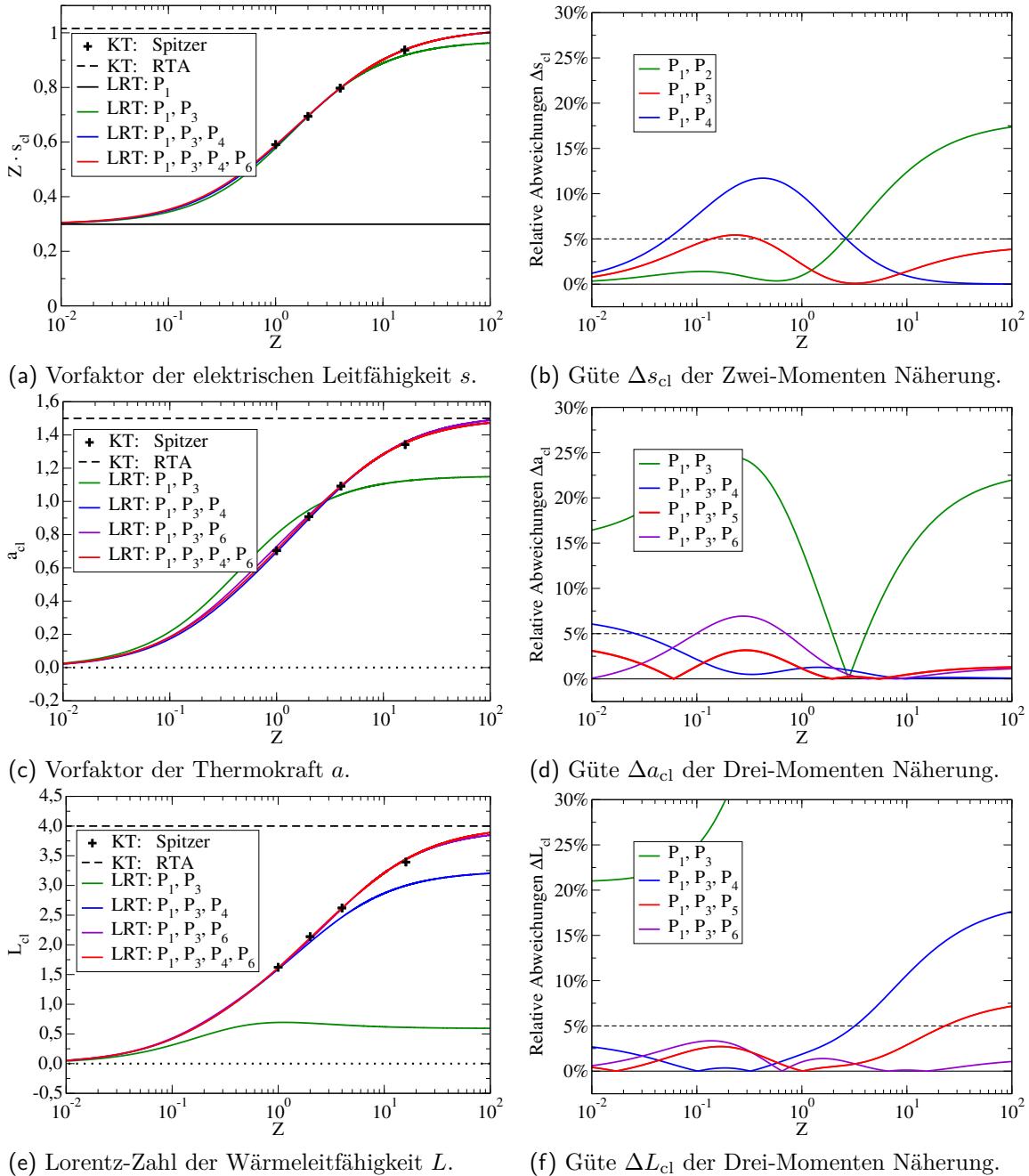


Abb. 4.5: Vorfaktoren des thermoelektrischen Transports im Niederdichtegrenzfall in Abhängigkeit der Ionenladung Z . Ergebnisse aus der Linearen-Response Theorie werden im Rahmen einer Mehr-Momenten Näherung mit Resultaten der Kinetischen Theorie verglichen.

In den Abb. 4.5 (a), (c) und (e) zeigt sich weiterhin deutlich, dass für Plasmen mit hoher Ionenladung $Z \gg 1$, z.B. staubige Plasmen, das Modell des Lorentz-Plasmas (Relaxationszeitnäherung) die Transporteigenschaften angemessen beschreibt. Bereits von Spitzer ermittelt [SH53], sinkt der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße für $Z \gg 1$. Umgekehrt fällt ein interessanter Aspekt für die elektrische Leitfähigkeit partiell schwach ionisierter Plasmen ($Z \ll 1$), z.B. Edelgasplasmen, auf: Die Ein-Moment Näherung der Linearen-Response-Theorie, äquivalent zur Ziman-Formel der Kinetischen Theorie, beschreibt bereits den Transport schwach ionisierter Plasmen angemessen. Eine Korrektur durch höhere Momente ist in diesem Fall nicht notwendig. Schwache Ionisationsgrade, repräsentiert durch $Z \ll 1$, haben eine kleine freie Elektronendichte zur Folge. Dennoch ist speziell für die elektrische Leitfähigkeit die Ziman-Formel, original entwickelt für Festkörper, der Brooks-Herring Formel, eine explizite Niederdichteentwicklung, vorzuziehen. Obwohl auch die Ziman-Formel keine Elektron-Elektron Stöße explizit enthält, erfasst sie den Effekt der Elektron-Elektron Stöße im Fall $Z \ll 1$ vollständig. Die Ursache liegt hierbei bei der Deformation der Verteilungsfunktion. Elektron-Ion Stöße deformieren die Verteilungsfunktion der Elektronen. Die Äquilibrierung infolge von Elektron-Elektron Stößen wirkt der Deformation entgegen, vgl. Tab. 4.1. Beide Stoßprozesse finden auf verschiedenen Zeitskalen statt, etwa $\tau_{ei}/\tau_{ee} \propto n_e(e^2)^2/n_i(Ze^2)^2 = 1/Z$ bzw. $d_{ll'}^{ee}/d_{ll'}^{ei} \propto 1/Z$ ($l, l' \neq 1$). Für $Z \gg 1$ können die Elektron-Elektron Stöße die vergleichsweise starken Elektron-Ion Stöße nicht ausgleichen, die Brooks-Herring Formel ist gültig; für $Z \ll 1$ sind Elektron-Elektron Stöße vergleichsweise häufiger, die Deformation durch Elektron-Ion Stöße wird vollständig kompensiert, der Transport lässt sich über die ideale Fermi-Verteilung beschreiben und die Ziman-Formel bekommt Gültigkeit. Die Elektron-Elektron Stöße nehmen daher trotz Impulserhaltung indirekt Einfluss auf Transporteigenschaften. In Abs. 5.2 wird dieser Effekt auch im PIP Modell beobachtet.

Im nächsten Abschnitt wird die elektrische Leitfähigkeit betrachtet. Der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße sowie der höheren Momente wird in Abhängigkeit von Dichte und Temperatur untersucht. Beide Effekte lassen sich kompakt über das Konzept der Renormierungsfunktion quantifizieren.

4.2.2 Das Konzept der Renormierungsfunktion und der Korrekturfaktor für die elektrische Leitfähigkeit

Der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf Transportgrößen geht stets mit dem Einfluss höherer Momente einher. So wurde bereits erwähnt, dass im Rahmen einer Ein-Moment Näherung Elektron-Elektron-Stöße aufgrund der Impulserhaltung nicht berücksichtigt werden können. Ausgehend von einer Ein-Moment Näherung soll eine Funktion eingeführt werden, die die Leitfähigkeit über höherere Momente renormiert,

$$\sigma = \frac{\sigma^{(1)}}{r(\Gamma, \Theta)}, \quad (4.55)$$

$$r(\Gamma, \Theta) = \frac{N_{11}^2}{-d_{11}} \begin{vmatrix} d_{11} & \dots & d_{1L} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{L1} & \dots & d_{LL} \end{vmatrix} \Bigg/ \begin{vmatrix} 0 & N_{11} & \dots & N_{1L} \\ N_{11} & d_{11} & \dots & d_{1L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ N_{L1} & d_{L1} & \dots & d_{LL} \end{vmatrix}. \quad (4.56)$$

Die Renormierungsfunktion ist ein Maß für den Einfluss höherer Momente (durch Deformation der Verteilungsfunktion) auf die elektrische Leitfähigkeit. Die inverse Renormierungsfunktion $(r(\Gamma, \Theta))^{-1}$ kann daher als eine faktorielle Korrektur der Ziman-Formel angesehen

werden. Speziell in der Zwei-Momenten Näherung, mit Gesamtimpuls \mathbf{P}_1 und Wärmestrom \mathbf{P}_3 als relevante Observablen, lautet die Renormierungsfunktion

$$r^{(2)}(\Gamma, \Theta) = \frac{d_{33}d_{11} - d_{13}^2}{d_{11} \left[d_{33} + \frac{N_{13}^2}{N_{11}^2} d_{11} - 2 \frac{N_{13}}{N_{11}} d_{13} \right]}. \quad (4.57)$$

Da Elektron-Elektron Stöße in den Korrelationsfunktionen einen additiven Beitrag liefern, können Renormierungsfunktionen mit und ohne Elektron-Elektron-Stöße betrachtet werden. Dies eröffnet die Möglichkeit eines direkten Vergleichs und quantifiziert ihren Einfluss auf die elektrische Leitfähigkeit in Form eines von Dichte und Temperatur abhängigen Korrekturfaktors.

$$\sigma = \sigma_{\text{ei+ee}} = R_{\text{ee}} \sigma_{\text{ei}}, \quad R_{\text{ee}} = \frac{r_{\text{ei}}}{r_{\text{ei+ee}}}. \quad (4.58)$$

In der kinetischen Theorie ist die Relaxationszeitnäherung eine häufig verwendete Methode zur Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit. In dieser Näherung werden Elektron-Elektron-Stöße grundsätzlich vernachlässigt. Um Elektron-Elektron-Stöße einzubeziehen ist die Verwendung des Korrekturfaktors möglich. Ebenfalls kann er zur Extraktion der Lorentz-Leitfähigkeit bei Experimenten dienen, sofern das Modell des vollständig ionisiertes Plasmas angenommen werden kann.

In Born'scher Näherung wurde der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf die statische Leitfähigkeit für beliebige Dichten von Reinholtz *et al.* [RRRR15] durchgeführt. Betrachtet wurde ein statisch abgeschirmtes Coulomb-Potential, indem sowohl Elektronen als auch Ionen vollständig zum Abschirmparameter beitragen $\kappa^2 = \kappa_e^2 + \kappa_i^2$. Austauschterme wurden vernachlässigt. Im nichtentarteten Grenzfall ($\tilde{\kappa}^2 \leqslant 1 + \frac{1+Z}{2}\zeta$, siehe Gl. (3.78)) folgt für die Korrelationsfunktionen, siehe Abs. 3.4.1 und Abs. 3.5.1,

$$\frac{N_{13}}{N_{11}} \rightarrow \frac{5}{2}; \quad \frac{d_{13}}{d_{11}} \rightarrow 1 - x; \quad \frac{d_{33}^{\text{ei}}}{d_{11}} \rightarrow 2 - 3x; \quad \frac{d_{33}^{\text{ee}}}{d_{11}} \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{Z} + \frac{\sqrt{2} \ln 2}{Z} x, \quad (4.59)$$

wobei $x = \left(\ln \left| \frac{1+Z}{2} \zeta \right| + \gamma + 1 \right)^{-1}$, und damit für die Renormierungsfunktionen:

$$r_{\text{ei}}(\zeta) = \frac{4}{13} - \frac{84}{169}x + \mathcal{O}(x^2), \quad (4.60)$$

$$r_{\text{ei+ee}}(\zeta) = \frac{4 \cdot (Z + \sqrt{2})}{13Z + 4\sqrt{2}} - \frac{12Z \left[\sqrt{2}(4 - 3 \ln 2) + 7Z \right]}{(13Z + 4\sqrt{2})^2} x + \mathcal{O}(x^2), \quad (4.61)$$

$$R_{\text{ee}}(\zeta) = 1 - A - Bx + \mathcal{O}(x^2). \quad (4.62)$$

mit $A = 9\sqrt{2}/[13(\sqrt{2} + Z)]$ und $B = 3[\sqrt{2}Z(67 + 39 \ln 2) + 56]/[13(\sqrt{2} + Z)]^2$. Für $Z = 1$ ist $A = 0,405$ und $B = 0,576$. Eine Interpolationsformel für einen weiten Dichte- und Temperaturbereich wurde in [RRRR15] angegeben. Eine deutlich einfache Darstellung mit ähnlich guter Qualität ist

$$R_{\text{ee}}^{\text{Born}}(\zeta, Z) = 1 - A \left\{ 1 - \left[1 + \frac{A}{B} \ln \left(1 + e^{-\gamma-1-B/A} \frac{2}{1+Z} \zeta^{-1} \right) \right]^{-1} \right\}. \quad (4.63)$$

Diese einfache Interpolationsformel kann bereits für grobe Abschätzungen verwendet werden. Verbesserungen sind möglich durch die Berücksichtigung der dynamischen Abschirmung, des

Austauschterms und der starken Stöße (T-Matrix). Besonders der Effekt der dynamischen Abschirmung wurde in den letzten Jahren verstärkt von Karakhtanov *et al.* [KRRR13, Kar16] diskutiert. In [Kar16] wurde das asymptotische Verhalten des Korrekturfaktors im Niederdichtegrenzfall unter Einbeziehung der dynamischen Abschirmung untersucht. Die asymptotische Formel von Karakhtanov lautet für $Z = 1$ [Kar16]:

$$R_{ee} = 0,582 + 0,512 \left(\ln \frac{\Theta}{\Gamma} \right)^{-1} + 0,0225 \Theta^{-\frac{3}{2}}. \quad (4.64)$$

Kleinere Abweichungen im führenden Term zu Gl. (4.62) liegen darin begründet, dass Karakhtanov [Kar16] eine 6-Momenten Näherung durchführte und somit den Spitzer-Grenzwert besser erreicht. Die Abweichungen im logarithmischen Term sind maßgeblich durch die Abschirmung gegeben.

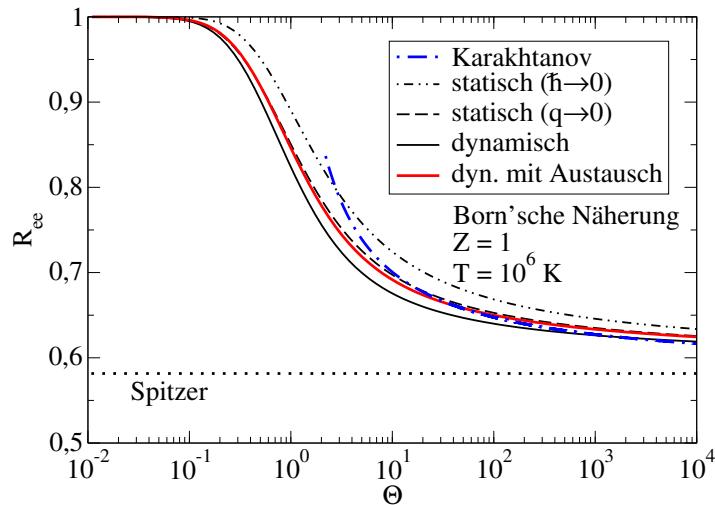


Abb. 4.6: Korrekturfaktor R_{ee} in Abhängigkeit vom Entartungsparameter Θ bei $T = 10^6$ K. In Born'scher Näherung werden Abschirmeffekte: statisch klassisch $\hbar \rightarrow 0$ (Strich-Punkt-Punkt Linie), statisch langwellig $q \rightarrow 0$ (gestrichelt) sowie dynamisch (durchgezogen) und der Einfluss des Austauschterms (rot) dargestellt. Der Grenzwert von Spitzer [SH53] (gepunktet) sowie die Asymptote von Karakhtanov [Kar16] (Strich-Punkt-Linie) sind angegeben.

Abb. 4.6 zeigt den Korrekturfaktor in Abhängigkeit vom Entartungsparameter für $T = 10^6$ K in Born'scher Näherung unter Berücksichtigung der Effekte der dynamischen Abschirmung und des Austauschterms. Es wurde zudem zwischen zwei Formen der statischen Abschirmung $\omega \rightarrow 0$ unterschieden: dem semiklassischen Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ mit $\kappa^2 \rightarrow \kappa_e^2 + \kappa_i^2$, siehe [RRRR15], und dem langwigen Grenzfall $q \rightarrow 0$ mit $\kappa^2 \rightarrow \kappa_e^2 + \kappa_i^2$ für Elektron-Ion und $\kappa^2 \rightarrow \kappa_e^2$ für Elektron-Elektron Stöße. Bei alleiniger Berücksichtigung der dynamischen Abschirmung sind gute Übereinstimmungen mit den Asymptoten von Karakhtanov [Kar16] zu erkennen. Dennoch ist festzustellen, dass der Niederdichtegrenzfall, beschrieben durch zwei Entwicklungsterme, erst bei hohen Entartungsparametern $\Theta > 10^3$ (entspricht bei $T = 10^6$ K: $n_e < 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ und $\Gamma < 0,01$) erreicht wird.

Verglichen mit der dynamischen Abschirmung in Abs. 3.5.2 werden die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen im statischen Fall unterschätzt. Daher folgt für die dynamische Abschirmung ein vergleichsweise niedrigerer Korrekturfaktor. Allerdings führt wiederum der

Austauschterm zu einer Erhöhung des Korrekturfaktors. Bezogen auf den statischen langwelligen Grenzfall $\omega \rightarrow 0, q \rightarrow 0$ kompensieren sich beide Effekte teilweise.

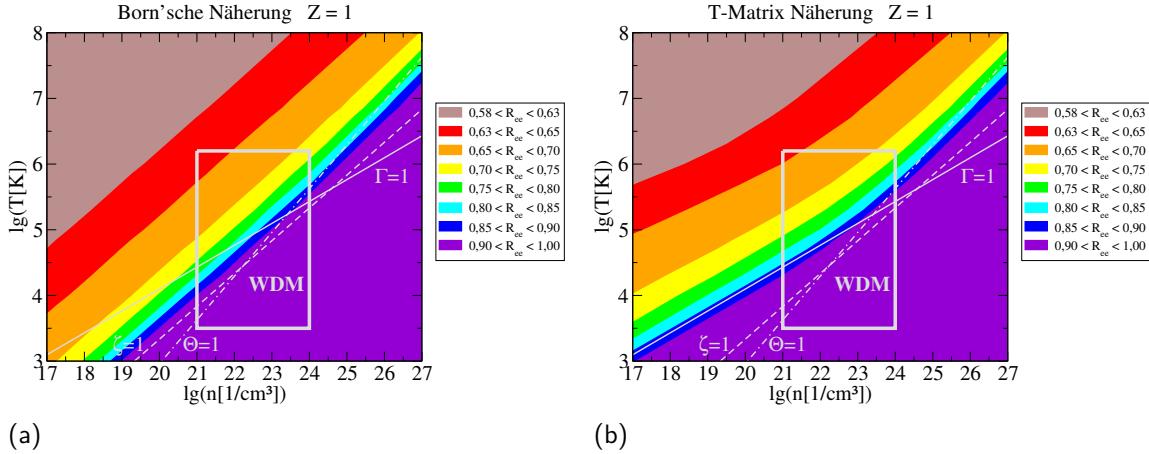


Abb. 4.7: Korrekturfaktor in der Dichte-Temperatur Ebene für $Z = 1$. Ergebnisse der Born'schen Näherung (a) sind T-Matrix Rechnungen (b) gegebenübergestellt.

Um den Einfluss starker Stöße zu untersuchen, wurden T-Matrix Rechnungen durchgeführt. Abb. 4.7 stellt die Born'sche Näherung und die T-Matrix Näherung gegenüber. In der Born'schen Näherung Abb. 4.7 (a) ist ein relativ einfacher Zusammenhang zwischen dem Korrekturfaktor von Dichte und Temperatur erkennbar. So lässt sich der Korrekturfaktor durch einen Parameter (ζ) darstellen. Ein komplizierteres Bild liefert die T-Matrix Näherung Abb. 4.7 (b). So ist vor allem bei niedrigeren Temperaturen $\Gamma^2\Theta \ll 1$ eine Abhängigkeit vom Parameter Γ ähnlich wie bei den Korrelationsfunktionen, siehe beispielsweise Abs. 4.1.2, erkennbar. Für hohe Temperaturen wie auch bei hohen Dichten geht die T-Matrix Näherung in die Born'sche Näherung über. Der Effekt starker Stöße reicht demnach bei tiefen Temperaturen von dünnen Plasmen bis hin zur Warmen Dichten Materie (WDM).

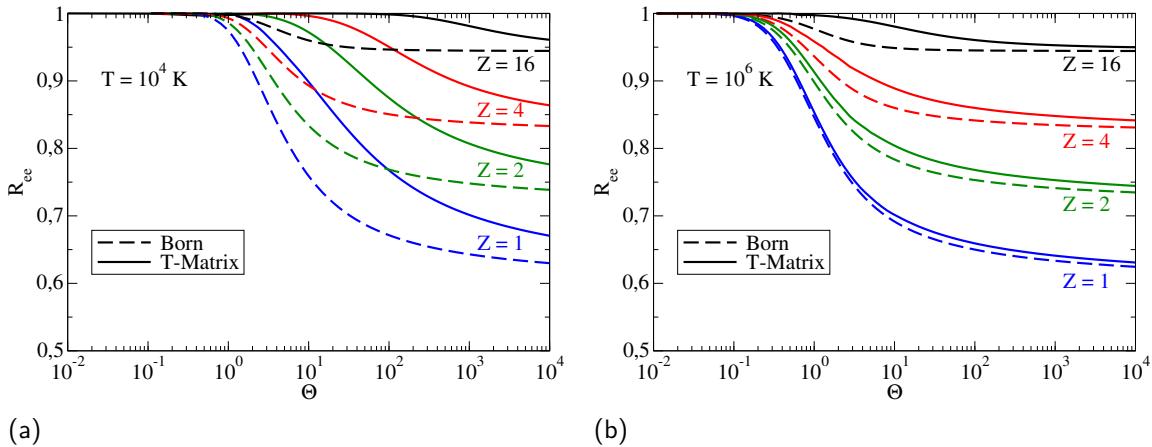


Abb. 4.8: Korrekturfaktor R_{ee} in Abhängigkeit vom Entartungsparameter Θ bei zwei Temperaturen (a): $T = 10^4 \text{ K}$ und (b): $T = 10^6 \text{ K}$ für verschiedene Ionenladungen: $Z = 1$ (blau), 2 (grün), 4 (rot) und 16 (schwarz). Ergebnisse der Born'schen Näherung (gestrichelt) werden mit T-Matrix Rechnungen (durchgezogen) verglichen.

In Abb. 4.8 werden die Born'sche Näherung und die T-Matrix Näherung für verschiedene Ionenladungen Z untersucht. Wie bereits aus Abb. 4.7 zu entnehmen, sind die Abweichungen zwischen beiden Näherungen bei tiefen Temperaturen größer. Für höhere Ionenladungen zeigen zudem beide eine Erhöhung des Korrekturfaktors in Richtung 1. Allerdings sind auch bei 10^6 K, Abb. 4.7 (b), deutliche Effekte starker Stöße bei höheren Ionenladungen $Z > 1$ sichtbar. Das liegt an der durch $Z > 1$ verstärkten Elektron-Ion Wechselwirkung. Die Born'sche Näherung ist für $Z > 1$ somit erst bei höheren Temperaturen gültig.

Um den Einfluss der Elektron-Elektron Stöße direkt auszurechnen, sind einfache Fitformeln ähnlich zur Born'schen Näherung Gl. (4.63) wünschenswert. Wie bereits in Abb. 4.7 angedeutet, ist vor allem bei niedrigeren Temperaturen $T < 10^5$ K ein systematischer Verlauf des Korrekturfaktors in Abhängigkeit von Γ zu erkennen. Um dies besser zu visualisieren, wird der Korrekturfaktor in Abb. 4.9 bei Temperaturen von $10^3 - 10^5$ K und verschiedenen Ionenladungen $Z = 1; 2; 4; 16$ über den Kopplungsparameter Γ dargestellt. Abb. 4.9 (a) verdeutlicht dabei die schwache Temperaturabhängigkeit, für die Ladungszahlen $Z > 1$ sind praktisch keine Temperaturabhängigkeiten sichtbar. Das ermöglicht die Konstruktion einer Fitformel für den Korrekturfaktor R_{ee} in diesem Bereich ($T \leq 10^5$ K):

$$R_{ee}^{\text{TM}}(\Gamma, Z) = 1 - A(Z) \left\{ 1 - \left[1 + \frac{A(Z)}{cB(Z)} \ln \left(1 + e^{-cB(Z)/A(Z)} (C(Z) \Gamma)^{-3c} \right) \right]^{-1} \right\}, \quad (4.65)$$

mit $A = 9\sqrt{2}/[13(\sqrt{2}+Z)]$, $B(Z) = 0,9Z^{-2/3}$, $C(Z) = e^{1-2,5 \ln(1+Z^{-1})}$ und $c = 0,7$. Für $Z = 1$ ist $A = 0,594$, $B = 0,90$ und $C = 0,48$. Die Güte der Fitformel wird in Abb. 4.9 (b) ebenfalls für verschiedene Ionenladungen $Z = 1; 2; 4; 16$ dargestellt. Die Maximalabweichungen liegen unterhalb von 3%.

Damit stellt die vorgeschlagenen Fitformel eine deutliche Verbesserung gegenüber früherer Fitformeln [RRRR15] dar. Sie ist für niedrige Temperaturen $T < 10^5$ K gültig und enthält Effekte der starken Stöße, der dynamischen Abschirmung und berücksichtigt den Austauschterm. Verbesserte Fitformeln für höhere Temperaturen sind Gegenstand weiterer Arbeiten.

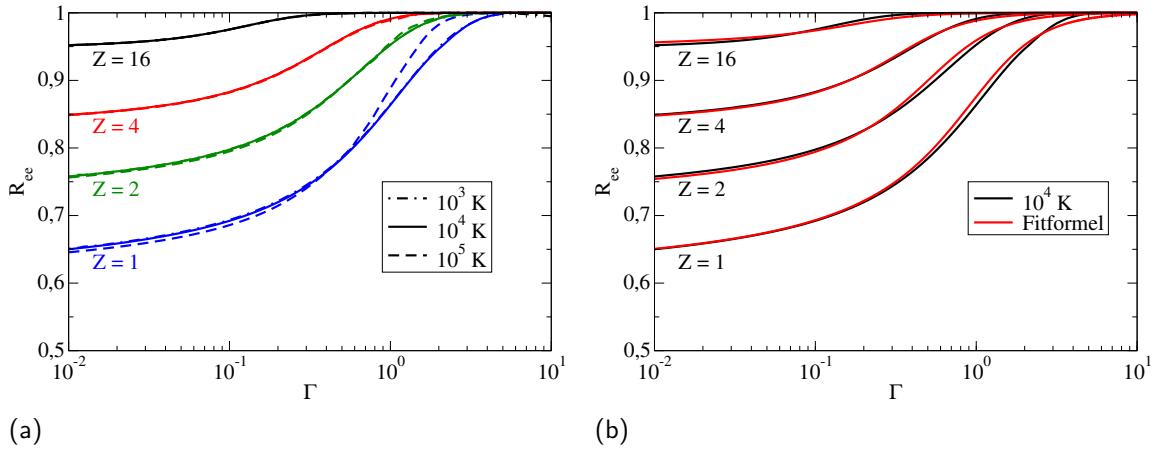


Abb. 4.9: Korrekturfaktor R_{ee} , durchgeführt in T-Matrix Näherung, in Abhängigkeit des Kopplungsparameters Γ bei (a): verschiedenen Temperaturen $T = 10^3 - 10^5$ K und (b): im Vergleich mit der Fitformel, Gl. (4.65).

Abschließend werden die T-Matrix Rechnungen mit den empirischen Fitformeln von Stygar *et al.* [SGF02], Gl. (4.52), und Fortov *et al.* [FTZ⁺03], Gl. (4.53), in Abb. 4.10 verglichen.

In der von Stygar *et al.* [SGF02] ermittelten Fitformel wurden Berechnungen aus der Linearen-Response-Theorie von Kuhlbrodt [KR00], mit Berechnungen aus der Relaxationszeitnäherung (kinetische Theorie) verglichen $R_{ee} = \sigma_{ei+ee}^{\text{LRT}} / \sigma_{ei}^{\text{RTA}}$. In [SGF02] wurde ein Temperaturbereich von etwa $\approx 10^4$ K betrachtet. Die Auswertung der Stoßintegrale (KT) bzw. der Korrelationsfunktionen (LRT) erfolgte über quantenmechanische Streuquerschnitte (T-Matrix Niveau), die Wechselwirkung wurde über Debye-Potentiale beschrieben. Es überrascht daher kaum, dass die Übereinstimmung der Stygar-Formel Gl. (4.52) mit dem Korrekturfaktor bei 10^4 K am besten ist. Allerdings wurde von Stygar *et al.* angenommen, dass der wesentliche Einfluss des Korrekturfaktors durch den Entartungsparameter gegeben ist, eine Temperaturabhängigkeit wurde vernachlässigt.

Für höhere Temperaturen nähern sich die Kurven der Fortov-Formel Gl. (4.53) an. Ein wesentlicher Unterschied bleibt jedoch im asymptotischen Verhalten $\Theta \gg 1$ bestehen. Der Übergang in den klassischen Spitzer-Wert wird bei Fortov über ein Potenzverhalten beschrieben, wobei die numerischen Ergebnisse auf ein schwächeres (logarithmisches) Verhalten deuten, ähnlich der Stygar-Formel.

Im Rahmen des quantenstatistischen Zugangs wird klar gezeigt, dass zwar die Beschreibung des Korrekturfaktors durch einen Parameter in einem gewissen Temperaturbereich möglich ist, allerdings im Fall niedriger Temperaturen $T \leq 10^5$ K durch den Kopplungsparameter Γ und nicht wie in [SGF02, FTZ⁺03] angenommen durch den Entartungsparameter Θ beschrieben wird.

Im nächsten Abschnitt wird der konkrete Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf die elektrische Leitfähigkeit veranschaulicht. Dazu werden Modellrechnungen vollständig ionisierten Wasserstoffs mit MD-Simulationen verglichen.

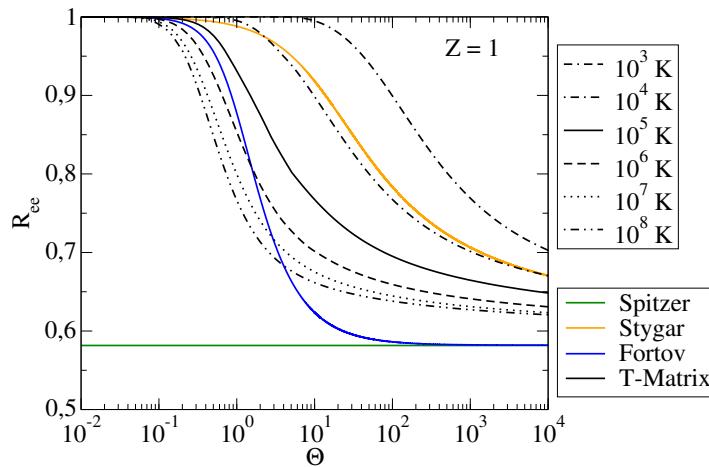


Abb. 4.10: Korrekturfaktor R_{ee} in Abhängigkeit vom Entartungsparameter Θ in einem weiten Temperaturbereich $T = 10^3 - 10^8$ K, berechnet in T-Matrix Näherung (schwarz), im Vergleich mit empirischen Fitformeln von Stygar *et al.* [SGF02] (orange) und Fortov *et al.* [FTZ⁺03] (blau) und dem Spitzer-Wert [SH53] (grün).

4.2.3 Modellrechnungen für die Leitfähigkeit vollständig ionisierten Wasserstoffs

In diesem Abschnitt werden Ergebnisse der elektrischen Leitfähigkeit vollständig ionisierten Wasserstoffs vorgestellt. Die Resultate werden mit der analytischen Spitzer-Formel und bis-

her nicht veröffentlichten Molekulardynamik (MD) Simulationen verglichen. Alle in diesem Abschnitt vorgestellten MD Simulationen wurden von Yaroslav Lavrinenco durchgeführt und freundlicherweise für Vergleiche in dieser Arbeit zur Verfügung gestellt [Lav17].

In Abb. 4.11 ist die reduzierte elektrische Leitfähigkeit bei $T = 20\,000$ K über den Kopplungsparameter Γ aufgetragen. Neben der Spitzer-Formel sind Berechnungen aus MD Simulationen von Lavrinenco [Lav17] sowie aus der Zwei-Momenten Näherung auf T-Matrix Niveau angegeben. In Abb. 4.11 (a) wird dabei der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße und in Abb. 4.11 (b) der Einfluss der dynamischen Abschirmung dargestellt. Die dynamische Abschirmung wurde im Rahmen der T-Matrix Näherung über die dichteabhängigen Abschirmfaktoren berücksichtigt.

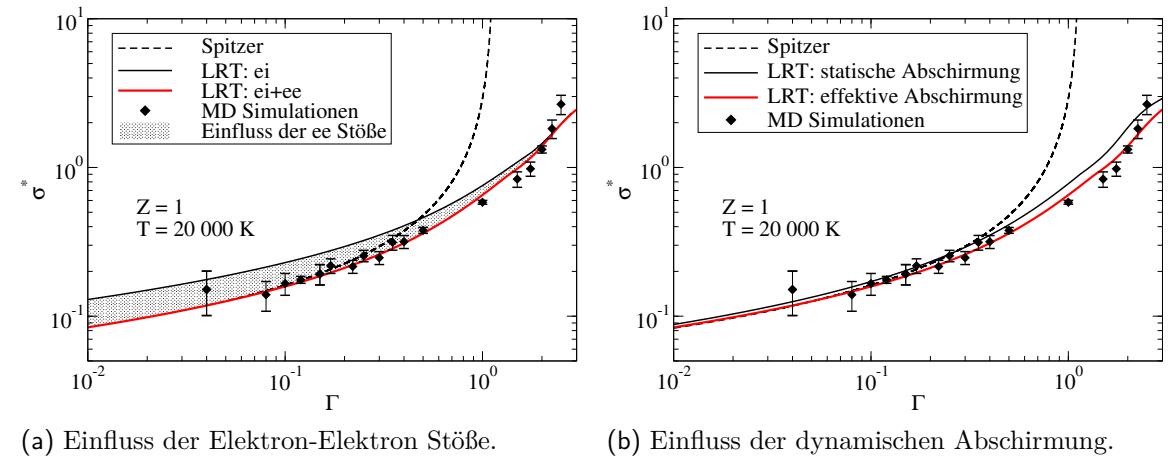


Abb. 4.11: Reduzierte Leitfähigkeit σ^* , Gl. (4.2), für das Modell des vollständig ionisierten Wasserstoffs ($Z = 1$) bei $T = 20\,000$ K. Berechnungen aus der T-Matrix Näherung (durchgezogen) werden mit der Spitzer-Formel [SH53] und MD-Simulationen, durchgeführt von Lavrinenco [Lav17] (\blacklozenge), verglichen.

Die Spitzer-Formel aus der kinetischen Theorie ist im Niederdichtegrenzfall $\Gamma \ll 1$ gültig, und kann durch den hier gewählten Zugang der Linearen-Response-Theorie reproduziert werden. Für $\Gamma \approx 1$ divergiert sie und ist für die Beschreibung nichtidealener Plasmen ungeeignet. Da die Lineare-Response-Theorie für beliebige Dichten anwendbar ist, ist eine Berechnung der Leitfähigkeit für beliebige Plasmaparameter grundsätzlich möglich.

Über die MD Simulationen von Lavrinenco [Lav17] werden die elektrischen Ströme (Trajektorien der Elektronen) zu verschiedenen Zeiten berechnet. Die Dynamik wird aus Newton'schen Bewegungsgleichungen erhalten, Quanteneffekte werden durch Pseudopotentiale berücksichtigt. Die Laplace-transformierte Autokorrelation der Ströme entspricht der Strom-Strom Korrelationsfunktion in der Kubo-Formel Gl. (2.42). Um Berechnungen für kleine Dichten durchzuführen sind große Simulationsboxen nötig, Rechenaufwand und Zuverlässigkeitsteile steigen entsprechend, siehe Abb. 4.11. Die MD Simulationen können daher für mittlere Dichten angewandt werden. Das ermöglicht die Untersuchung nichtidealener Effekte, wie der dichteabhängigen Korrekturfaktoren und der dynamischen Abschirmung.

In Abb. 4.11 (a) wird der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße durch den markierten Bereich visualisiert. Entsprechend Abs. 4.2 nimmt ihr Einfluss bei steigender Dichte ab. Bei hohen Dichten sind die Elektron-Elektron Stöße vernachlässigbar. Die gute Übereinstimmung zwischen der Zwei-Momenten Näherung (Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen) mit den MD

Simulationen (Strom-Strom Korrelationsfunktion) weist darauf hin, dass der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße in der Kubo-Formel enthalten ist. Ein Ziel zukünftiger Arbeiten ist es, diesen Effekt auch störungstheoretisch systematisch abzuleiten.

Abschirmeffekte sind in Abb. 4.11 (b) gezeigt. Dazu wurde in Anlehnung früherer Arbeiten [MR82, RRT89, ARR⁺07] die Korrelationsfunktionen in T-Matrix Näherung mit dem statischen Debye-Potential ($\kappa^2 = \kappa_e^2 + \kappa_i^2$) berechnet. Zwar wird die Spitzer-Formel im Niederdichtegrenzfall asymptotisch erreicht, jedoch entstehen im Bereich nichtidealener Plasmen ($\Gamma \approx 1$) Abweichungen zu den MD Simulationen. Durch die Berücksichtigung dynamischer Abschirmeffekte über die in dieser Arbeit konstruierten effektiven Abschirmung kann eine Übereinstimmung bei mittleren Dichten bishin zu $\Gamma \leq 3$ erzielt werden.

Für hohe Dichten ($\Gamma > 1$) bilden die Ionen im Plasma Strukturen aus, die durch den Ion-Ion Strukturfaktor ($S_{ii} \neq 1$) erfasst werden können. Der Ion-Ion Strukturfaktor kann beispielsweise über Hyper-Netted-Chain (HNC) oder Percus-Yevic (PY) Rechnungen bestimmt werden. Am Beispiel warmen dichten Aluminiums wird im nächsten Abschnitt der Einfluss des Strukturfaktors aufgrund starker Kopplungsparameter ($\Gamma \gg 1$) und der Einfluss des Pseudopotentials aufgrund des Pauli-blockings bei tiefen Temperaturen bishin zum Schmelzpunkt untersucht.

4.3 Leitfähigkeit realer Systeme I: Warmes dichtes Aluminium

In den letzten Jahren wurden neue experimentelle Methoden zur Bestimmung der elektrischen Leitfähigkeit entwickelt. Dabei wurde Aluminium im WDM Bereich durch Laserbeschuss erzeugt, das Thompson-Streuspektrum gemessen und die dynamische Stoßfrequenz extrahiert [SGL⁺15]. Die statische Leitfähigkeit wurde durch Extrapolation der Stoßfrequenz auf $\omega \rightarrow 0$ erhalten. Diese neue experimentelle Methode besitzt zurzeit relativ große Fehlerbalken (Faktor 5), verglichen mit den direkten Messungen der elektrischen Leitfähigkeit um den Schmelzpunkt. Dennoch ermöglichen sie, Aussagen über das Verhalten der elektrischen Leitfähigkeit im WDM Bereich zu treffen, ohne Drude-Modelle anzunehmen.

Um diese neuen Experimente theoretisch beschreiben zu können, stellt sich die Frage nach einer Interpolation zwischen der Leitfähigkeit dichten Aluminiums um den Schmelzpunkt bis hin zu hohen Temperaturen, indem sich das Plasma ideal verhält. In den Ergebnissen von Sperling *et al.* [SGL⁺15] wurde die Zusammensetzung des Aluminium-Plasmas mit Hilfe des Programm Pakets COMPTRA04 [KHR05] ausgerechnet. Im gesamten Temperaturbereich wurde ein Ionisationsgrad von $\alpha_{ion} \approx 3$ festgestellt. Zur Berechnung der Leitfähigkeit wird somit das Modell eines vollständig ionisierten Plasmas mit der Ionenladung $Z = 3$ verwandt. Da ausgehend vom Schmelzpunkt bis hin zu Temperaturen ≈ 10 eV das Plasma entartet ist, lässt sich die Ziman-Formel, Gl. (3.64) mit Gl. (3.62),

$$\sigma^{Ziman} = Z \frac{12\pi^3 e^2 \hbar^3 n_e}{m^2 \Omega_0^2} \left[\int_0^\infty dq q^3 V_{ei}^2(q) S_{ii}(q) f_{q/2}^e \right]^{-1}, \quad (4.66)$$

anwenden. Während bei hohen Temperaturen die Ionen nahezu gleichverteilt sind, bilden sie im Bereich tiefer Temperaturen deutliche Strukturen aus ($S_{ii} \neq 1$), siehe hierfür die Messungen des statischen Ion-Ion Strukturfaktors um den Schmelzpunkt $T_m = 0,08$ eV von Waseda [Was80]. Zur Beschreibung der Elektron-Ion Wechselwirkung reicht das Debye-Potential nicht aus, das Pauli-blocking zwischen dem gestreuten Elektron und der Elektronenhülle

muss berücksichtigt werden. In [SS66] wurden die Pauli-blocking Korrekturen aus Orbitalwellenfunktionen parametrisiert, die Parameter durch einen Vergleich mit dem gemessenen Phononspektrum fixiert, und ein Pseudopotential konstruiert.

Für die Leitfähigkeitsberechnung werden sowohl der Strukturfaktor als auch das Pseudopotential temperaturabhängig benötigt. Entsprechende Ansätze zur Interpolation von Strukturfaktor und für das Pseudopotential werden in Abs. 4.3.1 und 4.3.2 entsprechend beschrieben. Ergebnisse für die statische elektrische Leitfähigkeit werden in Abs. 4.3.3 diskutiert.

4.3.1 Berücksichtigung des Strukturfaktors

Um die Leitfähigkeit über Gl. (4.66) berechnen zu können, muss der ionischen Strukturfaktor im entsprechenden Temperaturbereich $T = 10^{-1} - 10^2$ eV bekannt sein. Für den Fall hoher Temperaturen verhält sich das Plasma ideal $\Gamma < 1$ und der Ion-Ion Strukturfaktor ist nach Debye gegeben, siehe Gl. (3.106). Für den Strukturfaktor verschiedener flüssiger Metalle können Harte-Kugel Modelle, siehe [AL66, Wer63], gemessene Strukturfaktoren um den Schmelzpunkt [Was80, SD73] erfolgreich beschreiben. Die Percus-Yevick (PY) Lösung für das Harte-Kugel Modell liefert einen analytischen Ausdruck für den Strukturfaktor [AL66, Wer63]

$$S_{ii}(q; \eta, r_{hc}) = [1 - C(q; \eta, r_{hc})]^{-1}, \quad (4.67)$$

$$C(q; \eta, r_{hc}) = -24\eta \int_0^1 ds s^2 \frac{\sin(s\zeta)}{s\zeta} \left[\frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} - 6\eta \frac{(1+\eta/2)^2}{(1-\eta)^4} s + \frac{\eta}{2} \frac{(1+2\eta)^2}{(1-\eta)^4} s^3 \right], \quad (4.68)$$

mit der Variablen $\zeta = 2qr_{hc}$, die den Harte-Kugel-Radius r_{hc} enthält, und dem Füllungsfaktor η , der die Höhe der Extrema, insbesondere des ersten Maximums, charakterisiert. Es gilt, je höher der Füllungsfaktor, desto ausgeprägter die Struktur. Nach Auswertung der Experimente schlug Waseda *et al.* einen exponentiellen Fit zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit vor: $\eta^W(T) = A \exp(-BT)$ [Was80]. Dieser Fit basiert allerdings nur auf den Daten im Bereich des Schmelzpunktes. Um einen Strukturfaktor für den gesamten Temperaturbereich zu gewinnen, werden hier beide Parameter η und r_{hc} als frei wählbar angesehen. Neben der Temperaturabhängigkeit wird ein Dichteinfluss berücksichtigt. Für die Auswertung stehen die Daten aus Messungen von Waseda [Was80] und aus Classical-map Hyper-Netted-Chain (CHNC) Simulationen [BBK⁺15, SRB⁺17] zur Verfügung, die im idealen Bereich ($\Gamma < 1$) mit dem Debye-Modell übereinstimmen, siehe Abb. 4.12.

Die Parameter η und r_{hc} werden so gewählt, dass sie wesentliche Charakteristika der Messungen und CHNC-Simulationen reproduzieren. Hierzu zählt die Höhe des ersten Maximums $S_{ii,\max}$, die ein Maß für die Ausprägung der Struktur ist. $S_{ii,\max}$ ist eindeutig durch den Füllungsfaktor η gegeben. Für die Berechnung der Leitfähigkeit ist ebenfalls die Lage des ersten Maximums q_{\max} von Bedeutung. Die Lage des ersten Maximums ist eindeutig durch den Harte-Kugel-Radius r_{hc} und den Füllungsfaktor η gegeben.

In Tab. 4.2 sind die experimentellen Daten und die Ergebnisse aus CHNC-Rechnungen für Position und Höhe der Maxima gezeigt. Dabei fällt auf, dass für tiefere Temperaturen, die Höhe der Maxima durch die CHNC-Rechnungen überschätzt werden, allerdings die Position mit den Experimenten gut übereinstimmt. Daher wurde bei der Konstruktion der Fit-Formeln darauf geachtet, die Positionen der Maxima aus den CHNC-Rechnungen zu reproduzieren. Für die PY-Parameter werden folgende Fits vorgeschlagen: für den Harte-Kugel-Radius $r_{hc}(n_i, T) = 10,17 - 0,72 \ln(T[\text{eV}]) (n_i[a_B^{-3}])^{1/3}$ und für den Füllungsfaktor $\eta(n_i, T) = 23,21 n_i[a_B^{-3}] (T[\text{eV}])^{-0,36}$. Hierbei wurde angenommen, dass der Füllungsfaktor

η proportional mit der Teilchendichte n_i ansteigt, und der Harte-Kugel-Radius mit der Teilchendichte $n_i^{1/3}$ abnimmt.

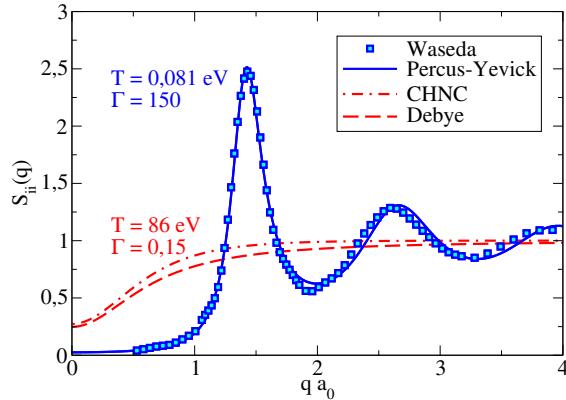


Abb. 4.12: Statischer Ion-Ion Strukturfaktor $S_{ii}(q)$ als Funktion des Übertragungsimpulses q am Schmelzpunkt $T = T_m$ (blau) und im Bereich idealer Plasmen $T = 86 \text{ eV}$ (rot). Experimentelle Daten am Schmelzpunkt bei einer Dichte von $\rho = 2,37 \text{ g/cm}^3$ aus Röntgenstreuexperimenten von Waseda [Was80] (\square) wird mit der Percus-Yevick-Formel, Gl. (4.67), (durchgezogene Linie) verglichen. CHNC-Simulationen [SRB⁺17] (Strich-Punkt-Linie) im idealen Plasmabereich bei $\rho = 2,7 \text{ g/cm}^3$ werden mit dem Strukturfaktor nach Debye, Gl. (3.106), (gestrichelt) verglichen.

Im Gegensatz zu dem Fit von Waseda *et al.* [Was80], $\eta^W(T) = 0,61 \exp(-3,99 T[\text{eV}])$, indem ein exponentielles Abklingen des Füllungsfaktors angenommen wird, wird in dieser Arbeit ein Potenzgesetz bzgl. der Temperatur vorgeschlagen. Die Peak-Höhe der Experimente und der CHNC-Rechnungen bei $T > 6 \text{ eV}$ wird reproduziert, siehe Tab. 4.2.

Tab. 4.2: Gemessene [Was80] und berechnete (CHNC) [SRB⁺17] Lage und Höhe des ersten Maximums im Aluminium-Strukturfaktor $S_{ii,\max}(q_{\max})$, siehe auch Abb. 4.12. Zum Vergleich werden entsprechende Resultate aus der PY-Formel, Gl. (4.67), mit den gefitteten PY-Parametern η und r_{hc} gezeigt.

T [eV]	ρ [g/cm ³]	$q_{\max}^{\text{exp.}} a_0$, [Was80]	$S_{ii,\max}^{\text{exp.}}$, [Was80]	$q_{\max}^{\text{CHNC}} a_0$, [SRB ⁺ 17]	$S_{ii,\max}^{\text{CHNC}}$, [SRB ⁺ 17]	$q_{\max}^{\text{PY}} a_0$	$S_{ii,\max}^{\text{PY}}$
0,08	2,37	1,43	2,475	-	-	1,43	2,485
0,09	2,35	1,43	2,271	-	-	1,43	2,312
0,11	2,27	1,43	1,934	-	-	1,43	1,905
0,17	2,70	-	-	1,43	3,88	1,39	1,969
0,43	2,70	-	-	1,42	2,41	1,41	1,447
0,86	2,70	-	-	1,42	1,81	1,44	1,281
1,72	2,70	-	-	1,45	1,44	1,49	1,188
6,03	2,70	-	-	1,61	1,10	1,61	1,100
8,62	2,70	-	-	1,74	1,06	1,65	1,085

4.3.2 Verwendung von Pseudopotentialen

Neben dem Strukturfaktor ist das Potential in stark entarteten Systemen von großer Bedeutung. Pseudopotentiale berücksichtigen die Wechselwirkung der freien Elektronen mit den Schalenelektronen der Ionen. Die 10 Schalenelektronen eines Aluminium-Ions schirmen nicht nur den 13-fach positiv geladenen Ionenkern ab (langreichweite Coulomb-Wechselwirkung mit $Z = 3$), sondern verhindern außerdem die Besetzung der 1s, 2s und 2p Zustände durch freie Elektronen (kurzreichweite Abstoßung durch das Pauli-blocking). Sie können experimentell aus Messungen des Phononspektrums gewonnen werden, [SS66], und liefern eine gute Übereinstimmung zwischen der gemessenen Leitfähigkeit aus den Experimenten am Schmelzpunkt und den Berechnungen aus der Ziman-Formel, Gl. (4.66), siehe [AL66, SS66].

Ein Pseudopotential, welches die nichtlokalen Austauscheffekte durch ein effektives Feld approximiert, wurde von Schneider und Stoll [SS66] konstruiert

$$\begin{aligned} V_{\text{ei}}(q) &= \frac{V_{\text{ei}}^{\text{ps}}(q)}{1 + W(q)}, \\ V_{\text{ei}}^{\text{ps}}(q) &= (n_i \Omega_0)^{-1} \left[-\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 q^2} + \gamma_1 H_1(qr_1) + \gamma_2 H_2(qr_2) \right], \\ W(q) &= \frac{\kappa_{\text{TF}}^2}{q^2} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{q^2 + 2,39 k_{\text{F}}^2} \right) f \left(\frac{q}{2k_{\text{F}}} \right), \\ f(t) &= \frac{1}{2} + \frac{1-t^2}{4t} \ln \left| \frac{1+t}{1-t} \right|, \end{aligned} \quad (4.69)$$

mit der Abschirmfunktion $W(q)$. Dabei ist $\kappa_{\text{TF}}^2 = e^2 m (3n_e/\pi)^{1/3}/(\pi \epsilon_0 \hbar^2)$ der Thomas-Fermi Abschirmparameter. Das Pauli-blocking wird durch Überlappung wasserstoffartiger Orbitawellenfunktionen (s und p -artige) berücksichtigt, in Impulsdarstellung

$$H_1 = \frac{1}{(1 + (qr_1)^2)^2}, \quad H_2 = \frac{qr_2}{(1 + (qr_2)^2)^3}. \quad (4.70)$$

Die Parameter γ_n und r_n werden aus den gemessenen Phonon-Dispersionsrelationen am Schmelzpunkt erhalten [SS66]. Für Aluminium lauten die Parameter $r_1 = 0,32a_0$, $r_2 = 0,30a_0$, $\gamma_1 = 0,322$ Ryd, and $\gamma_2 = 0,155$ Ryd.

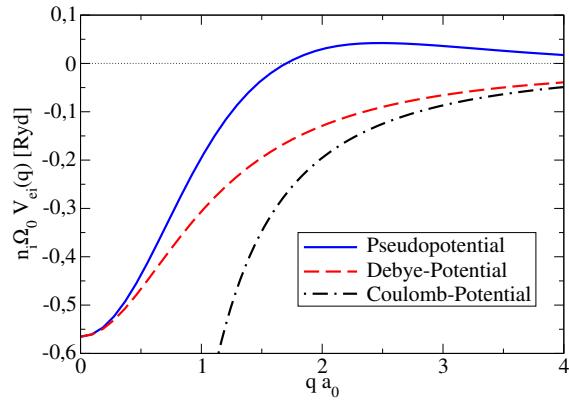


Abb. 4.13: Das Pseudopotential (blau durchgezogen) von Schneider und Stoll [SS66], siehe Gl. (4.69), im Vergleich mit dem Debye-Potential (rot gestrichelt) und dem Coulomb-Potential (schwarze Strich-Punkt-Linie) am Schmelzpunkt T_m .

Eine Interpolation zwischen dem Pseudo-Potential, Gl. (4.69), für Temperaturen um den Schmelzpunkt und dem Debye-Potential für das ideale Plasma wurde über dichte- und temperaturabhängige Parameter durchgeführt. Dazu wird der Thomas-Fermi Abschirmparameter κ_{TF} durch den elektronischen Abschirmparameter κ_e ersetzt, und die Pauli-blocking-Terme exponentiell mit der Temperatur, bezogen auf den Schmelzpunkt T_m , abgeschwächt $\gamma_1(T)[\text{Ryd}] = 0,322 \exp[-a(T - T_m)/\text{Ryd}]$ und $\gamma_2(T)[\text{Ryd}] = 0,155 \exp[-a(T - T_m)/\text{Ryd}]$. Die Reduktion der Pauli-Terme ist bei hohen Temperaturen eine Konsequenz aus inneren Anregungen und wird durch den Abschwächungsparameter $a > 0$ charakterisiert. Für hohe Temperaturen verschwinden die Pauli-blocking-Terme und das Pseudopotential geht in ein abeschirmtes Coulomb-Potential über. In [SRB⁺17] wurde über eine lokale Dichtenäherung die Größenordnung des Parameters a abgeschätzt; insbesondere im nichtentarteten Grenzfall gilt $a \simeq \pi^2/4 \approx 2,47$. In dieser Arbeit wird erwartet, dass $1 < a < 4$.

4.3.3 Ergebnisse für die elektrische Leitfähigkeit

Durch die eingeführten temperaturabhängigen Pseudopotentiale und Strukturfaktoren ist es möglich, die Leitfähigkeit über einen weiten Temperaturbereich $T = 10^{-1} - 10^2$ eV anzugeben.

In Abb. 4.14 werden die Einflüsse des Strukturfaktors und des Pseudopotentials ($a = \pi^2/4$) dargestellt, und mit Experimenten und anderen Zugängen verglichen. Separat wurde die Leitfähigkeit unter Berücksichtigung des Strukturfaktors und des Pseudopotentials berechnet. Das einfache Modell (Debye-Potential und Strukturfaktor $S_{ii} = 1$) liefert im Vergleich zu den Experimenten von Gathers [Gat83] und den neuen Experimenten von Sperling [SGL⁺15] eine Größenordnung niedrigere Leitfähigkeitswerte. Die separate Betrachtung des Pseudopotentials weist einen stärkeren Effekt auf, der durch das Stoßintegral in Gl. (4.66) begründet ist. Der Hauptbeitrag dieses Stoßintegrals liegt um den doppelten Fermi-Impuls $q \approx 2k_F$. Speziell dort wirkt das Pseudopotential deutlich schwächer als das Debye-Potential, siehe Abb. 4.13, die Stöße bzw. Korrelationen verschwinden in diesem Bereich, und der Elektronenstrom fließt praktisch ungehindert.

Berücksichtigt man allein den Strukturfaktor, verschiebt sich der Bereich starker Korrelationen, gekennzeichnet durch Maxima und Minima im Strukturfaktor. In der *Summe* - oder genauer im Integral - bleibt das Stoßintegral bzw. die Kraft-Kraft Korrelationsfunktion und damit die Leitfähigkeit unverändert. Der Einfluss ist gering < 10%. Eine quantitative und qualitative Übereinstimmung kann gefunden werden, wenn beide Effekte kombiniert betrachtet werden. Da durch den Strukturfaktor die Bereiche um den doppelten Fermi-Impuls stärker gewichtet werden, diese wiederum aufgrund des schwachen Pseudopotentials ausgeschaltet werden, steigt der Wert der Leitfähigkeit, verglichen mit den anderen Berechnungen. Der temperaturabhängige Strukturfaktor führt zur charakteristischen Erhöhung der Leitfähigkeit in Richtung des Schmelzpunktes, die auch experimentell beobachtet wird. Berechnungen von Dharma-wardana [Dw16] liefern eine solche Charakteristik nicht, da zwar ein Pseudopotential aus DFT-MD Rechnungen konstruiert, allerdings der Strukturfaktor temperaturunabhängig gewählt wurde. In DFT-MD Simulationen von Sjostrom und Daligault [SD15] wird diese Charakteristik der Leitfähigkeit gefunden, allerdings sind die berechneten Werte für die Leitfähigkeit um 50% höher als die experimentellen Daten von Gathers [Gat83]. Mögliche Einflüsse können hierbei die Extrapolation der dynamischen Leitfähigkeit auf den statischen Grenzfall und die Wahl des Austauschfunktionalen sein.

Es wird festgestellt, dass beide WDM-Effekte erforderlich und temperaturabhängig zu berücksichtigen sind, um die Experimente beschreiben zu können. Für die korrekte Be-

schreibung der Leitfähigkeit bei höheren Temperaturen verschwindet einerseits die Struktur und das Pauli-blocking weicht auf, andererseits muss dann der Einfluss höherer Momente berücksichtigt werden. In Abb. 4.14 ist der Einfluss höherer Momente für das einfache Debye-Modell durchgeführt worden, die Ziman-Formel, Gl. (4.66), wurde renormiert. Im Bereich hoher Temperaturen $\Gamma^2\Theta \ll 1$ ($T \approx 100$ eV) beträgt der Einfluss höherer Momente etwa einen Faktor 2.

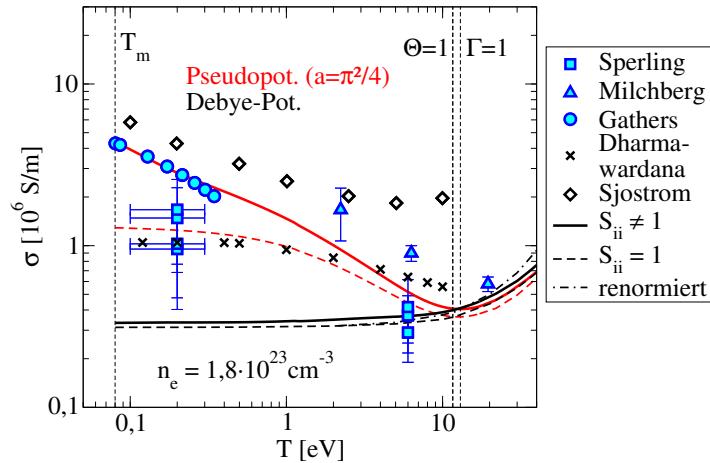


Abb. 4.14: Die elektrische Leitfähigkeit σ in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 2,7 \text{ g/cm}^3$. Ergebnisse dieser Arbeit unter Berücksichtigung des Strukturfaktors ($S_{ii} = 1$: gestrichelt, $S_{ii} \neq 1$: durchgezogen) sowie des Potentials (Psueopotential: rot, Debye-Potential: schwarz) werden mit Berechnungen von Dharma-wardana [Dw16] (\times), DFT-MD Simulationen von Sjostrom und Daligault [SD15] (\diamond) und Experimenten (\blacksquare : [SGL⁺15]; \blacktriangle : [MFDM88]; \bullet : [Gat83]) verglichen.

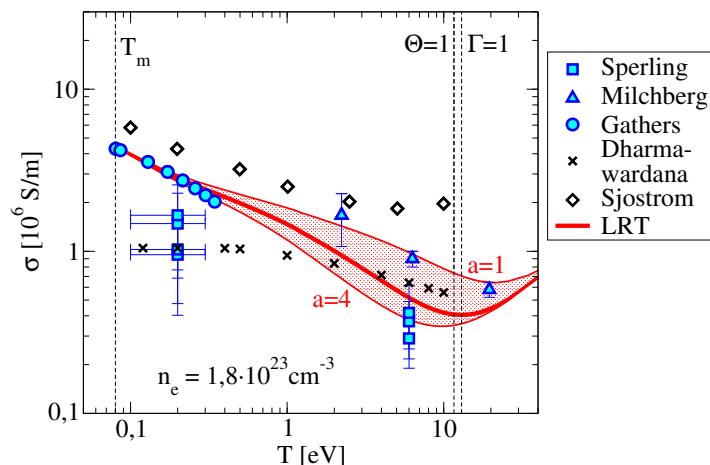


Abb. 4.15: Die elektrische Leitfähigkeit σ in Abhängigkeit von der Temperatur bei Festkörperdichte $\rho = 2,7 \text{ g/cm}^3$. Ergebnisse dieser Arbeit (rot) werden mit Berechnungen von Dharma-wardana [Dw16] (\times), DFT-MD Simulationen von Sjostrom und Daligault [SD15] (\diamond) und Experimenten (\blacksquare : [SGL⁺15]; \blacktriangle : [MFDM88]; \bullet : [Gat83]) verglichen. Der Einfluss der Abschwächung a ist angegeben.

Zusätzlich zu Abb. 4.14 wird in Abb. 4.15 der temperaturabhängige Einfluss des Pseudopotentials über den Abschwächungsparameter a untersucht. Verschiedene Abschwächungen $1 < a < 4$ werden durch einen gepunkteten Bereich um die Leitfähigkeitskurve des abgeschätzten Wertes $a = \pi^2/4$ visualisiert. Es wird gezeigt, dass stärkere Abschwächungen zu einer deutlichen Ausprägung des Minimums in der Leitfähigkeit führen. Die Experimente von Milchberg *et al.* [MFDM88] suggerieren ein schwächeres Abfallen der statischen Leitfähigkeit und werden bei $a = 1$ gut erklärt, wohingegen die Experimente von Sperling *et al.* [SGL⁺15] auf ein stärkeres Abfallen der Leitfähigkeit deuten, die sich durch den klassisch abgeschätzten Parameter $a \approx \pi^2/4$ erzielen lässt.

Um weiterführende Aussagen über die Güte der vorgestellten Interpolationen zu machen, sind zukünftige Experimente in diesem Bereich nötig. Auch kann eine Übertragung dieser Methode auf andere Elemente erfolgen.

5. TRANSPORTEIGENSCHAFTEN PARTIELL IONISIERTER PLASMEN

Im chemischen Modell werden Bindungszustände im Vielteilchensystem als eigenständige Komponente betrachtet. Im Beispiel partiell einfach ionisierter Plasmen werden neben freien Elektronen und freien einfach geladenen Ionen ihre Bindungszustände als freie Atome behandelt. Bei partiell mehrfach ionisierten Plasmen unterscheidet man zudem auch die Ionen entsprechend ihrer Ladungszahl. Daher ist die Zusammensetzung des Plasmas ein zentrales Charakteristikum, um Transportgrößen auszurechnen.

Die Zusammensetzung hängt von den Plasmaeigenschaften Temperatur T und Massendichte ρ ab. Das Plasma besteht aus Elektronen e^- , Ionen I^{k+} mit verschiedenen Ladungszahlen k und Atomen I^0 . Dann werden chemische Reaktionen über das Massenwirkungsgesetz



$$\mu_{k-1} = \mu_k + \mu_e + E_{(k)}^{\text{ion}}, \quad k = 1, \dots, k_{\max}, \quad (5.2)$$

beschrieben, mit den Ionisationsenergien $E_{(k)}^{\text{ion}}$ und den chemischen Potentialen $\mu_j = \mu_j^{\text{id}} + \mu_j^{\text{int}}$. Über die Separation des idealen Anteils $e^{\beta\mu_j^{\text{id}}} = n_j \Lambda_j^3 / g_j$, wobei $g_j = (2s_j + 1)$ der Spinfaktor ist, sind die Partialdichten n_j bestimmbare. Es folgt die Saha-Gleichung [KKER86, KSK05]

$$n_{k-1} = n_k \frac{g_{k-1}}{g_k} e^{\beta [E_{(k)}^{\text{ion}} + \mu_e^{\text{id}} + \Delta_k]}, \quad (5.3)$$

mit dem Shift $\Delta_k = \mu_e^{\text{int}} + \mu_k^{\text{int}} - \mu_{k-1}^{\text{int}}$. Im Grenzfall niedriger Dichten sind die Wechselwirkungsanteile durch den Debye-Abschirmparameter $\mu_j^{\text{int}} = -\kappa_{\text{De}} e_j^2 / (8\pi\epsilon_0)$ gegeben. Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom Debye-Shift. Berücksichtigt man mehrere Ionisationsstufen erhält man ein System nichtlinearer Gleichungen, die sogenannten verkoppelten Saha-Gleichungen. Zur Berechnung der Zusammensetzung in dieser Arbeit werden die Saha-Gleichungen, Gl. (5.3), über das Programm Paket COMPTRA04 [KHR05] gelöst.

Sind die Partialdichten n_j bekannt, lassen sich die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen bestimmen. Die Zerlegung erfolgt entsprechend Kapitel 4, allerdings kommen qualitativ neue Beiträge hinzu, die Elektron-Atom Korrelationsfunktionen $d_{ll'}^{\text{ea}}$. Die Verbindung des chemischen Bildes mit der Linearen-Response Theorie zur Beschreibung partiell ionisierter Plasmen wird als PIP-Modell bezeichnet. Die Schwierigkeit liegt in der Behandlung der Elektron-Atom Wechselwirkung. In vielen Arbeiten [RRN95, Red99, KR00, KRR⁺05] und insbesondere auch im Programm Paket COMPTRA04 [KHR05] wird das aus dem quantenstatistischen Zugang gewonnene Polarisationspotential [RRZ87] verwendet. Transportgrößen wie die elektrische Leitfähigkeit partiell ionisierter Edelgase weichen allerdings bis zu mehreren Größenordnungen von experimentellen Messungen ab. Adams *et al.* [ARR⁺07] erklärte die Ursache damit, dass der für die Korrelationsfunktionen essentielle Transportquerschnitt berechnet aus dem Polarisationspotential experimentell ermittelte Transportquerschnitte nicht reproduzieren kann,

und konnte zu den experimentellen Leitfähigkeitsmessungen gute Ergebnisse erzielen, indem er eben die experimentellen Transportquerschnitte als Input für d_{ll}^{ea} verwendete. Allerdings liegen die experimentellen Transportquerschnitte nur für den isolierten Fall vor. Der Einfluss der Plasmaumgebung kann somit nicht berücksichtigt werden. Um Plasmaeffekte konsistent einzubeziehen, ist die Kenntnis des Elektron-Atom Potentials nötig.

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Fragestellung nach der quantenstatistischen Behandlung der Elektron-Atom Korrelationsfunktionen aufgegriffen und am Beispiel partiell ionisierter Edelgasplasmen analysiert. Dazu wird in Abs. 5.1 zunächst das optische Potential zur Beschreibung der Elektron-Atom Wechselwirkung eingeführt, Plasmaeffekte diskutiert und Transportquerschnitte mit Experimenten verglichen. Darauf aufbauend werden die Elektron-Atom Korrelationsfunktionen in Abs. 5.2. berechnet und den anderen Korrelationsfunktionen gegenübergestellt. Abschließend wird in Abs. 5.3 die elektrische Leitfähigkeit berechnet und mit Messungen aus Schockwellenexperimenten verglichen, eine Fitformel für die Leitfähigkeit partiell ionisierten Heliums und Neons wird angegeben.

5.1 Das optische Potential im Plasmasystem

5.1.1 Das optische Potential für das isolierte System

Die Elektron-Atom Wechselwirkung kann mit Hilfe der Green-Funktionstechnik störungstheoretisch analysiert werden. Entsprechende Terme können mit Diagrammen repräsentiert und visualisiert werden. Terme des effektiven Wechselwirkungspotentials wurden von Redmer *et al.* im Rahmen einer Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung durchgeführt [RRZ87],

$$V_{\text{ea}} = V^{(1)} + V^{(2)} + V_{\text{ex}}, \quad (5.4)$$

mit den beiden niedrigsten Ordnungen der direkten Terme $V^{(1)}$, $V^{(2)}$ und dem nichtlokalen Austauschterm V_{ex} .

Der Term niedrigster Ordnung $V^{(1)}$ beschreibt die Coulomb-Wechselwirkung zwischen einem freien Elektron mit dem positiv geladenen Atomkern und den gebundenen Elektronen, welche die Atomhülle formen. Man spricht in diesem Zusammenhang auch vom atomaren Formfaktor. Das Potential lautet

$$V_{\text{HF}}(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \int_r^\infty dr_1 4\pi r_1 \rho(r_1) (r_1 - r), \quad (5.5)$$

mit der Dichte der Schalenelektronen ρ des Atoms. ρ wird über die atomaren Roothaan-Hartree-Fock Wellenfunktionen [CR74] bestimmt, weswegen Gl. (5.5) als Hartree-Fock Potential $V^{(1)} \equiv V_{\text{HF}}(r)$ bezeichnet wird. Für große Abstände fällt das Hartree-Fock Potential exponentiell ab.

Dem gegenüber stehen die Resultate von Born und Heisenberg [BH24], nach denen das Elektron-Atom Potential für große Abstände mit $V_{\text{ea}}(r \rightarrow \infty) \propto -r^{-4}$ abnimmt. Mit Hilfe der Green-Funktionstechnik ist es Redmer *et al.* gelungen, dieses Potenzverhalten in zweiter Ordnung Störungstheorie über das Polarisationspotential zu reproduzieren, $V^{(2)} \equiv V_{\text{P}}$, siehe [RRZ87]. In dieser Arbeit wird eine einfache analytische Form des Polarisationspotentials gewählt, welche von Paikeday zur Beschreibung der Elektronenstreuung an Edelgasatomen angenommen wurde, siehe [Pai00]

$$V_{\text{P}}(r) = -\frac{e^2 \alpha_{\text{P}}}{8\pi\epsilon_0 (r + r_0)^4}. \quad (5.6)$$

Hierbei ist die Polarisierbarkeit α_P für die Atome tabelliert [Lid01]. Die Energieabhängigkeit der Polarisierbarkeit α_P ist klein, siehe [Pai00], und wird in dieser Arbeit vernachlässigt. Der Cut-off Parameter r_0 liegt in der Größenordnung des Bohr'schen Radius a_0 und wird in Abs. 5.1.3 anhand der gemessenen Transportquerschnitte für jedes Element angefittet.

Mit $V^{(1)} \equiv V_{\text{HF}}(r)$ aus Gl. (5.5) und $V^{(2)} \equiv V_P$ aus Gl. (5.6) wird die Elektron-Atom Wechselwirkung, Gl. (5.4), durch das Modell des *optischen Potentials* [Van75, PS89]

$$V_{\text{opt}} = V_{\text{HF}} + V_P + V_{\text{ex}} \quad (5.7)$$

beschrieben. Der Austauschterm V_{ex} wird dabei durch ein lokales Feld genähert. Für das optische Potential können somit Streuphasenrechnungen aus der Calogero-Gleichung, Gl. (3.120), in ähnlicher Weise wie für das Debye-Potential durchgeführt werden. Im nächsten Abs. 5.1.2 wird der Austauschterm V_{ex} in Lokalfeldnäherung bestimmt, mit dem Ziel, eine einheitliche Form zur Beschreibung aller Edelgase zu finden.

5.1.2 Das Austauschpotential in Lokalfeldnäherung

Der Austauschterm in Gl. (5.7) beschreibt den Austausch zwischen einfallendem Elektron mit den Elektronen der Atomhülle. Für eine vereinfachte Handhabbarkeit wird das Austauschpotential durch ein lokales Feld beschrieben. Diese Näherung hat sich in der Literatur etabliert [FM73, YMS78, MW60, Har67, Van75] und sich für die Beschreibung von Streuprozessen mehrfach bewährt [RT75, SG82, AT05].

Die am häufigsten vertretende Form des lokalen Austauschterms wird aus der semiklassischer Näherung (SCA) erhalten und lautet [FM73, RT75, YMS78]:

$$V_{\text{ex}}^{\text{SCA}}(r, K_{\text{RT}}(r)) = \frac{\hbar^2}{4m} \left[K_{\text{RT}}^2(r) - \sqrt{K_{\text{RT}}^4(r) + \frac{4me^2}{\hbar^2 \epsilon_0} \rho(r)} \right]. \quad (5.8)$$

Der Ausdruck $K_{\text{RT}}(r)$ beschreibt den lokalen Impuls des einfallenden Elektrons nach Riley und Truhlar [RT75, YMS78]

$$K_{\text{RT}}^2(r) = k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} [|V_{\text{HF}}(r)| + |V_P(r)|]. \quad (5.9)$$

Alternativ zu Gl. (5.8) wurde von Mittleman und Watson [MW60] ein freies Elektronengas angenommen. Im Rahmen dieser Näherung ist der Austauschterm gegeben durch [RT75]

$$V_{\text{ex}}^M(r, K(r)) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{\pi} K_F(r) F\left(\frac{K(r)}{K_F(r)}\right), \quad (5.10)$$

mit dem lokalen Elektronenimpuls $K(r)$, dem lokalen Fermi-Impuls $K_F(r) = [3\pi^2\rho(r)]^{1/3}$ und der Funktion

$$F(\eta) = \frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln \left| \frac{\eta+1}{\eta-1} \right|. \quad (5.11)$$

Für den lokalen Elektronenimpuls $K(r)$ werden verschiedene Ansätze gemacht. Von Riley und Truhlar wird beispielsweise die Ersetzung $K(r) \rightarrow K_{\text{RT}}(r)$, Gl. (5.9), in Gl. (5.10) vorgeschlagen. Diese Näherung des Austauschterms wird als *Riley-Truhlar's freie Elektronengas Austauschnäherung* (FER) bezeichnet.

Alternativ zu Riley und Truhlar führte Hara den lokalen Impuls über das Ionisationspotential I ein [Har67]:

$$K_{\text{H}}^2(r) = k^2 + 2 \frac{2m}{\hbar^2} I + K_{\text{F}}^2(r). \quad (5.12)$$

Die Ersetzung $K(r) \rightarrow K_{\text{H}}(r)$ in Gl. (5.10) wird im Folgenden als *Hara's freie Elektronengas Austauschnäherung* (FEH) bezeichnet. Allerdings wurde bereits von Hara [Har67] das inkorrekte asymptotische Verhalten dieses lokalen Impulses bei großen Abständen festgestellt, siehe auch [RT75]. Verschiedene Modifikationen des FEH Modells werden beispielsweise von Sur und Gosh [SG82] und Riley und Truhlar [RT75] vorgeschlagen.

Tab. 5.1: Streuphasen δ_ℓ (in rad) der $e\text{-He}$ Streuung. Numerische Rechnungen in SEA von Duxler *et al.* [DPL71] im Vergleich mit den lokalen Modellen SCA, FEH, FER und mFER, eingesetzt in Gl. (5.7), ($V_P = 0$).

Helium	ka_0	SEA	mFER	SCA	FEH	FER
δ_0	0,10	2,994	2,993	3,006	2,957	3,337
	0,25	2,776	2,770	2,783	2,691	3,043
	0,50	2,436	2,412	2,422	2,304	2,648
	0,75	2,139	2,093	2,111	2,001	2,332
	1,00	1,890	1,835	1,856	1,769	2,071
	1,50	1,522	1,473	1,491	1,446	1,654
δ_1	0,50	0,043	0,045	0,076	0,023	0,218
	0,75	0,110	0,101	0,146	0,064	0,316
	1,00	0,183	0,159	0,205	0,116	0,359
	1,50	0,284	0,247	0,279	0,212	0,367
δ_2	0,75	0,005	0,006	0,009	0,004	0,013
	1,00	0,014	0,015	0,020	0,010	0,025
	1,50	0,042	0,041	0,047	0,035	0,053

Tab. 5.2: Streuphasen δ_ℓ (in rad) der $e\text{-Ne}$ Streuung. Numerische Rechnungen in SEA von Thompson [Tho66] im Vergleich mit den lokalen Modellen SCA, FEH, FER und mFER, eingesetzt in Gl. (5.7), ($V_P = 0$).

Neon	ka_0	SEA	mFER	SCA	FEH	FER
δ_0	0,20	6,072	6,104	6,179	6,028	7,716
	0,30	5,965	6,004	6,069	5,902	7,056
	0,40	5,857	5,899	5,947	5,779	6,648
	0,50	5,748	5,789	5,820	5,659	6,361
	0,90	5,321	5,349	5,333	5,215	5,626
	1,00	5,219	5,243	5,222	5,114	5,480
δ_1	0,50	3,040	3,052	3,030	2,917	3,196
	0,70	2,933	2,949	2,909	2,785	3,124
	0,80	2,873	2,890	2,845	2,724	3,073
	0,90	2,812	2,828	2,781	2,667	3,017
	1,00	2,751	2,766	2,719	2,615	2,958
δ_2	0,50	0,004	0,005	0,008	0,002	0,016
	1,00	0,065	0,059	0,075	0,034	0,127

Tab. 5.3: Streuphasen δ_ℓ (in rad) der $e\text{-Ar}$ Streuung. Numerische Rechnungen in SEA von Thompson [Tho66] und von Pindzola und Kelly [PK74] im Vergleich mit den lokalen Modellen SCA, FEH, FER und mFER, eingesetzt in Gl. (5.7), ($V_P = 0$).

Argon	ka_0	SEA	mFER	SCA	FEH	FER
δ_0	0,10	9,274	9,266	9,374	9,249	11,858
	0,25	9,045	9,015	9,141	8,987	10,628
	0,50	8,647	8,580	8,658	8,561	9,250
	0,75	8,249	8,164	8,206	8,162	8,536
	1,00	7,875	7,790	7,808	7,798	8,030
	1,50	7,252	7,170	7,163	7,182	7,288
δ_1	0,10	6,279	6,276	6,279	6,275	6,318
	0,25	6,227	6,193	6,213	6,192	6,381
	0,50	6,001	5,901	5,938	5,909	6,214
	0,75	5,702	5,583	5,613	5,604	5,901
	1,00	5,411	5,305	5,320	5,333	5,575
	1,50	4,923	4,861	4,854	4,892	4,996
δ_2	0,25	0,002	0,002	0,004	0,001	0,031
	0,50	0,045	0,035	0,061	0,024	0,815
	0,75	0,277	0,185	0,284	0,150	1,963
	1,00	0,860	0,581	0,782	0,536	2,008
	1,50	1,644	1,539	1,614	1,594	1,877

Tab. 5.4: Streuphasen δ_ℓ (in rad) der $e\text{-Xe}$ Streuung. Numerische Rechnungen in SEA von Amus'ya *et al.* [ACC⁺75, OL83] im Vergleich mit den lokalen Modellen SCA, FEH, FER und mFER, eingesetzt in Gl. (5.7), ($V_P = 0$).

Xenon	ka_0	SEA	mFER	SCA	FEH	FER
δ_0	0,10	15,481	15,478	15,613	15,455	18,128
	1,00	13,716	13,502	13,518	13,504	13,739
δ_1	1,00	11,136	11,042	11,062	11,052	11,441

Allerdings wird in dieser Arbeit eine Modifikation des FER Modells vorgeschlagen. Hierbei wird zu den Potentialen in Gl. (5.9) der ruhende Austauschterm $V_{\text{ex}}^M(r, 0) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{2}{\pi}K_F(r)$ ergänzt. Für den lokalen Impuls folgt

$$K_{\text{mRT}}^2(r) = k^2 + \frac{2m}{\hbar^2} \left[|V_{\text{HF}}(r)| + |V_P(r)| + \left| V_{\text{ex}}^M(r, 0) \right| \right]. \quad (5.13)$$

Die Ersetzung $K(r) \rightarrow K_{\text{mRT}}(r)$ in Gl. (5.10) wird als *modifiziertes FER* (mFER) bezeichnet.

Um die Güte der lokal-genäherten Austauschterme festzustellen, werden Vergleichsrechnungen mit dem nichtlokalen Austauschterm durchgeführt. Verglichen werden hierbei die für das Streuproblem relevanten Streuphasen. In erster Ordnung Störungstheorie (ohne Polarisationspotential), auch *statische Austauschnäherung* (SEA) genannt, wurden Streuphasen mit dem nichtlokalen Austauschterm von Duxler *et al.* [DPL71] für Helium, von Thompson [Tho66] für Neon und Argon, von Pindzola und Kelly [PK74] für Argon und von Amus'ya *et al.* [ACC⁺75, OL83] für Xenon berechnet. Diese werden in den Tabellen 5.1-5.4 entsprechend für Helium, Neon, Argon und Xenon mit den Streuphasen aus den eingeführten Modellen (SCA, FEH, FER und mFER) verglichen. Konsistenterweise wurde das Polarisationspoten-

tial bei diesen Berechnungen vernachlässigt ($V_P = 0$).

Von Riley und Truhlar [RT75] wurde bereits für Helium und Argon festgestellt, dass das FEH Modell Austauscheffekte unterschätzt und das FER Modell die Austauscheffekte überschätzt. Dies wird ebenfalls für die anderen Elemente Neon und Xenon festgestellt. Somit sind beide Modelle für die Beschreibung der Austauscheffekte ungeeignet. Die semiklassische Näherung (SCA), Gl. (5.8) mit (5.9), und das in dieser Arbeit vorgeschlagene Modell mFER, Gl. (5.10) mit (5.13), liefern hingegen eine deutlich bessere Übereinstimmungen mit den SEA-Streuphasen. Beide Modelle besitzen außerdem das gleiche asymptotische Verhalten bei hohen Energien $ka_0 \gg 1$. Für kleine Wellenzahlen $ka_0 < 0,5$ liefert das vorgeschlagene Modell, mFER, die beste Übereinstimmung. In diesem Bereich liegen die Abweichungen bei allen Edelgasen unterhalb von 0,1rad.

Für alle Edelgase wird in den folgenden Abschnitten der Austauschterm V_{ex} des optischen Potentials V_{opt} , Gl. (5.7), durch das mFER Modell, Gl. (5.10) mit (5.13), beschrieben. Das ist speziell für die Berechnung des Transportquerschnittes der leichten Edelgase (Helium und Neon) von großer Bedeutung, da sowohl die einfache Struktur bei Helium als auch die Schulter bei Neon, siehe Abb. 5.1 (a) und (b) im nächsten Abschnitt, maßgeblich durch den Austauschterm bestimmt wird.

5.1.3 Elektron-Atom Transportquerschnitt im isolierten System

Für die Berechnung von Streuquerschnitten mit dem optischen Potential, Gl. (5.7), wird final der Cut-off Parameter r_0 in Gl. (5.6) benötigt. Für die Bestimmung des Cut-off Parameters gibt es unterschiedliche Methoden und Ansätze, siehe [Pai76, RRZ87, MW59, Sch79].

In der Literatur ist die Bestimmung des Cut-off Parameters r_0 über die korrekte Beschreibung des Polarisationspotentials an der Stelle $V_P(r = 0)$ am häufigsten vertreten, siehe [RRZ87]. Bei semiklassischer Behandlung der Elektronen wurde eine analytische Formel von Mittleman und Watson [MW59], $r_0 = [\alpha P a_0 / (2Z^{1/3})]^{1/4}$, angegeben. Allerdings ist die genaue Kenntnis von $V_P(r = 0)$ für das Elektron-Atom Streuproblem von untergeordneter Rolle, da die Coulomb-Wechselwirkung, beschrieben durch das Hartree-Fock Potential, für kleine Abstände divergent und somit dominant ist.

Alternativ wird daher der Cut-off Parameter r_0 durch experimentelle Ergebnisse aus dem Streuproblem angefittet. Beispielsweise ermittelte Paikeday [Pai76, Pai00] den Cut-off Parameter r_0 durch Vergleiche mit den gemessenen differentiellen Wirkungsquerschnitten der Elektron-Atom Stöße, Schrader [Sch79] orientierte sich hingegen an der gemessenen Streulänge der Positron-Atom Wechselwirkung. In dieser Arbeit wird der Cut-off Parameter so gewählt, dass der Transportquerschnitt langsamer Elektronen ($ka_0 < 1$) reproduziert wird, gegeben durch die Experimente von Crompton [CER70] für Helium und Robertson [Rob72] für Neon. Für Argon, Krypton und Xenon, bei denen das Ramsauer-Minimum im totalen Wirkungsquerschnitt gemessen wurde, siehe [RK29, TB22], wird der Cut-off Parameter r_0 hier durch das entsprechende Minimum im Transportquerschnitt (Position und Tiefe), siehe [MCRR77, EE88, KSO86], fixiert.

Die Ergebnisse sind in Tab. 5.5 aufgelistet. Wie erwartet ist der Cut-off Parameter in der Größenordnung des Bohr'schen Radius $r_0 \approx 1a_0$. Diese werden in das Polarisationspotential, Gl. (5.6), eingesetzt und der Transportquerschnitt für das isolierte System berechnet.

Tab. 5.5: Cut-off Parameter r_0 in Einheiten des Bohr'schen Radius a_0 .

$r_0[a_0]$	He	Ne	Ar	Kr	Xe
diese Arbeit	1,00	1,00	0,86	0,92	1,00
Mittleman und Watson [MW59]	0,86	0,89	1,21	1,27	1,38
Paikeday [Pai76, Pai00]	0,92	1,00	2,89	3,40	-
Schrader [Sch79]	1,77	1,90	2,23	2,37	2,54

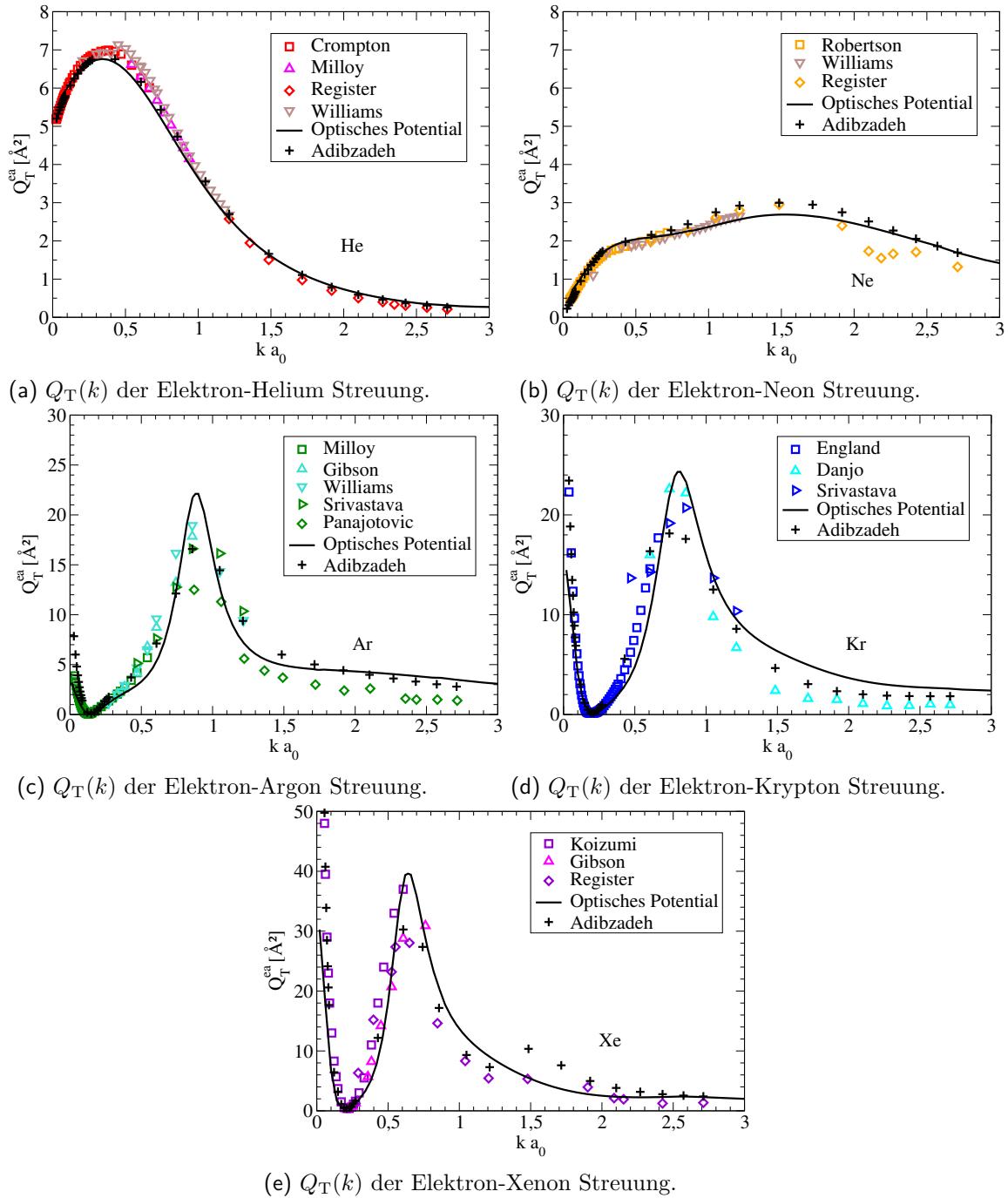


Abb. 5.1: Transportquerschnitte der Elektronenstreuung an Edelgasen. Streuphasenrechnungen aus dem optischen Potential, Gl. (5.7), in der vorgestellten Form, Gln. (5.5), (5.6), (5.10) und (5.13) werden mit den Rechnungen aus [AT05] und Experimenten [CER70, MC77, RTS80, Wil79, Rob72, RT84, MCR77, GGS⁺96, STCT81, PFP⁺97, EE88, Dan88, KSO86, GLA⁺98, RVT84] verglichen.

Um das Modell des optischen Potentials, Gl. (5.7) mit Gln. (5.5), (5.6), (5.10) und (5.13), zur Beschreibung der Elektron-Atom Wechselwirkung zu legitimieren, wird der für die Transporteigenschaften wichtige Transportquerschnitt aus Streuphasenrechnungen mit experimentellen Daten verglichen, siehe Abb. 5.1. Dabei liegen für die Edelgase jeweils Messdaten über einen Wellenzahlbereich von $0 < ka_0 < 3$ für He [CER70, MC77, RTS80, Wil79], für Ne [Wil79, Rob72, RT84], für Ar [Wil79, MCR77, GGS⁺96, STCT81, PFP⁺97], für Kr [STCT81, EE88, Dan88] und für Xe [KSO86, GLA⁺98, RVT84] vor. Zusätzlich werden Berechnungen von Adibzadeh [AT05] angegeben.

In den einzelnen Abbildungen 5.1 (a)-(e) sind sehr gute Übereinstimmungen zwischen der Theorie und den Experimenten erkennbar. Das optische Potential in der vorgestellten Form ist demnach für die Beschreibung der Elektron Wechselwirkung mit Edelgasatomen geeignet. Die einfache Struktur von Helium wird ebenso reproduziert wie die Schulter von Neon und das Ramsauer-Minimum der schwereren Edelgase Argon, Krypton und Xenon. Die Maximas stimmen ebenfalls mit den experimentellen Daten überein. Im Bereich hoher Energien sind bei den schweren Edelgasen Abweichungen erkennbar. Diese Abweichungen könnten beispielsweise durch eine energieabhängige Behandlung des Polarisationspotentials geschlossen werden. Für die Berechnung von Transportgrößen, genauer der Korrelationsfunktionen, bei Temperaturen einiger Elektronenvolt spielt dieser Bereich allerdings keine Rolle.

Gute Übereinstimmungen mit den Experimenten wurden außerdem von Adibzadeh und Theodosiou [AT05] erzielt. Ihre Berechnungen haben ebenfalls das optische Potential zur Grundlage. Allerdings ist die Behandlung des Austauschterms und des Polarisationspotentials unterschiedlich. Für jedes Edelgas wurde jeweils eine spezielle Wahl von Austausch- und Polarisationsterm getroffen mit wiederum vier Fitparametern. Im Gegensatz dazu, enthält das vorgestellte Modell eine einheitliche Form für den Austauschterm aller Edelgase und nur einen Fitparameter r_0 , siehe Tab. 5.5, im Polarisationspotential.

5.1.4 Berücksichtigung von Plasmaeffekten

Die Beiträge des optischen Potentials für das isolierte System wurden in den vorigen Abschnitten angegeben. Im Plasma sind Abschirmeffekte zu erwarten, das optische Potential muss genau wie das Coulomb-Potential der Elektron-Ion und Elektron-Elektron Wechselwirkung abgeschirmt werden. Dabei wird jeder Beitrag des optischen Potentials separat abgeschirmt. Das optische Potential für das Plasmasystem ist gegeben durch

$$V_{\text{opt}}^{\text{s}}(r) = V_{\text{HF}}^{\text{s}}(r) + V_{\text{P}}^{\text{s}}(r) + V_{\text{ex}}^{\text{s}}(r). \quad (5.14)$$

wobei das Superskript s auf die Abschirmung, engl. screening, hindeutet.

Die Abschirmung des Polarisationspotentials wurde in früheren Arbeiten untersucht, siehe [RR85]. Ähnlich wie beim abgeschirmten Coulomb-Potential kann das Polarisationspotential durch einen Abschirmfaktor abgeschirmt werden

$$V_{\text{P}}^{\text{s}}(r) = V_{\text{P}}(r) e^{-2\kappa r} (1 + \kappa r)^2, \quad (5.15)$$

wobei κ der Abschirmparameter ist. Entsprechend der adiabatischen Näherung wird auch für die Elektron-Atom Wechselwirkung der effektive Abschirmparameter der Elektron-Ion Wechselwirkung verwendet.

Das Hartree-Fock Potential enthält die Coulomb-Wechselwirkung des einfallenden Elektrons mit dem Atomkern und den Schalenelektronen. Für das abgeschirmte Hartree-Fock Potential werden die Coulomb-Wechselwirkungen durch Debye-Potentiale ersetzt, siehe [Kar06].

Damit gilt für das abgeschirmte Hartree-Fock Potential

$$V_{\text{HF}}^{\text{s}}(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[-\frac{Ze^{-\kappa r}}{r} + \int \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|} \rho(r_1) d^3\mathbf{r}_1 \right], \quad (5.16)$$

mit der Kernladungszahl $Z = \int d^3\mathbf{r}' \rho(r') = \int_0^\infty dr' 4\pi r'^2 \rho(r')$, wobei $\rho(r)$ die Dichte der Schalenelektronen ist. Der zweite Term in der eckigen Klammer kann als

$$2\pi \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \rho(r_1) \int_{-1}^1 dz \frac{e^{-\kappa\sqrt{r^2+r_1^2-2rr_1z}}}{\sqrt{r^2+r_1^2-2rr_1z}} = 2\pi \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \rho(r_1) \int_{|r-r_1|}^{r+r_1} dy \frac{e^{-\kappa y}}{rr_1},$$

geschrieben werden. Das Integral über y ist auswertbar, wodurch das Integral über r_1 in drei Anteile aufgeteilt wird. Es folgt

$$V_{\text{HF}}^{\text{s}}(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(-\frac{Ze^{-\kappa r}}{r} + I_1 + I_2 + I_3 \right), \quad (5.17)$$

$$I_1 = \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r} \int_0^r 2\pi r_1 \rho(r_1) e^{\kappa r_1} dr_1, \quad (5.18)$$

$$I_2 = -\frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r} \int_0^\infty 2\pi r_1 \rho(r_1) e^{-\kappa r_1} dr_1, \quad (5.19)$$

$$I_3 = \frac{e^{\kappa r}}{\kappa r} \int_r^\infty 2\pi r_1 \rho(r_1) e^{-\kappa r_1} dr_1. \quad (5.20)$$

Im Niederdichtegrenzfall ($\kappa \rightarrow 0$) geht Gl. (5.17) in das Hartree-Fock Potential für das isolierte System, Gl. (5.5), über.

Aus der Entwicklung der Exponentialfunktion im Integranden von I_1 und I_2 , siehe entsprechend Gln. (5.18) und (5.19), erhält man die Ungleichung

$$I_1 + I_2 > \frac{Ze^{-\kappa r}}{r} - \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r} \int_r^\infty 2\pi r_1 \rho(r_1) (1 + \kappa r_1 + \kappa^2 r_1^2) dr_1. \quad (5.21)$$

Für große Abstände $r\kappa \gg 1$ wird I_3 , Gl. (5.20), betragsmäßig größer als der zweite Term in Gl. (5.21). Das abgeschirmte Hartree-Fock Potential wird also stets repulsiv.

Mit der Zerlegung des Integrals $I_1 = \int_0^r dr_1 \dots = \int_0^\infty dr_1 \dots - \int_r^\infty dr_1 \dots$, Gl. (5.18), folgt

$$\begin{aligned} V_{\text{HF}}^{\text{s}}(r) &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \int_0^\infty 4\pi r_1^2 \rho(r_1) \left(\frac{\kappa^2 r_1^2}{3!} + \frac{\kappa^4 r_1^4}{5!} + \dots \right) dr_1 \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \kappa r} \int_r^\infty \frac{\rho(r_1)}{r_1} \sinh[\kappa(r_1 - r)] dr_1. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Der erste Term in Gl. (5.22) ist in der Ordnung $\mathcal{O}(e^{-\kappa r}/r)$. Der zweite Term mit der unteren Grenze r fällt für große Abstände $r \rightarrow \infty$ exponentiell ab, da bereits die Dichte der Schalenelektronen für Abstände größer des Atomradius exponentiell fällt. Die Ordnung ist

$\mathcal{O}(e^{-r/a_0})$ oder schwächer, entsprechend der Orbitalwellenfunktionen, siehe [CR74]. Damit ist bei großen Abständen $r \gg a_0$ für den Fall $\kappa < 1/a_0$ der zweite Term stets vernachlässigbar. Nach der Entwicklung von Gl. (5.22) um $(\kappa a_0)^2$ gilt asymptotisch

$$\lim_{r \rightarrow \infty} V_{\text{HF}}^s(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \sum_{k=0}^{\infty} (\kappa a_0)^{2k+2} \mathcal{C}_k, \quad (5.23)$$

$$\mathcal{C}_k = \frac{Z^{-1}}{(2k+3)!} \int_0^{\infty} \left(\frac{r_1}{a_0}\right)^{2k+2} 4\pi r_1^2 \rho(r_1) dr_1. \quad (5.24)$$

Die Koeffizienten \mathcal{C}_k hängen von der Element spezifischen Dichte der Schalenelektronen ab. Numerische Werte für die Edelgase sind in Tab. 5.6 angegeben. Für Wasserstoff gilt in Übereinstimmung mit Karakhtanov, siehe [Kar06], $\mathcal{C}_0^{\text{H}} = 1/2$ und $\mathcal{C}_{k>0}^{\text{H}} = 0$.

Tab. 5.6: Koeffizienten \mathcal{C}_k aus Gl. (5.24) für die Edelgase.

k	$\mathcal{C}_k^{\text{He}}$	$\mathcal{C}_k^{\text{Ne}}$	$\mathcal{C}_k^{\text{Ar}}$	$\mathcal{C}_k^{\text{Kr}}$	$\mathcal{C}_k^{\text{Xe}}$
0	0,1974	0,1563	0,2411	0,1830	0,1933
1	0,0324	0,0228	0,0672	0,0568	0,0727
2	0,0050	0,0033	0,0170	0,0165	0,0262
3	0,0007	0,0005	0,0044	0,0044	0,0088
4	0,0001	0,0001	0,0013	0,0011	0,0028

Die Summe in Gl. (5.23) konvergiert schnell, siehe Tab. 5.6. Es folgt für das abgeschirmte Hartree-Fock Potential bei $0 < \kappa a_0 < 1$ asymptotisch,

$$V_{\text{HF}}^s(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \mathcal{C}_0 \left[(\kappa a_0)^2 + \mathcal{O}(\kappa^4) \right], \quad (5.25)$$

$$\mathcal{C}_0 = \frac{Z^{-1}}{6} \int_0^{\infty} \left(\frac{r_1}{a_0}\right)^2 4\pi r_1^2 \rho(r_1) dr_1. \quad (5.26)$$

Für die Abschirmung des Austauschterms in Gl. (5.14) wird das Hartree-Fock Potential und das Polarisationspotential in Gl. (5.13) entsprechend ihrer abgeschirmten Pendants, Gln. (5.15) und (5.17), ersetzt.

Ein zentraler Unterschied zum isolierten Fall Gl. (5.7) ist, dass im Plasma nicht mehr das Polarisationspotential, sondern das Hartree-Fock Potential den dominanten Beitrag für große Abstände liefert. Somit wird das abgeschirmte optische Potential für alle Edelgase repulsiv. Karakhtanov [Kar06] berechnete dieses asymptotische Verhalten bereits für partiell ionisierten Wasserstoff.

Für das Beispiel Argon ist das abgeschirmte optische Potential in Abb. 5.2 gezeigt. Darin wird der isolierten Fall ($\kappa a_0 = 0$), sowie der Einfluss des Plasmas bei verschiedenen Plasmabedingungen $\kappa a_0 = 0,05$ und $0,1$ gezeigt. Bei einer Temperatur von 20 000 K entspricht das den schweren Teilchendichten $n_{\text{heavy}} = 1,9 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ und $1,5 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ bzw. den Massendichten $\rho = 0,01 \text{ g/cm}^3$ und $0,1 \text{ g/cm}^3$ entsprechend. Für kleine Abstände ist der Einfluss des Plasmas vernachlässigbar. Für große Abstände hingegen wirken die abgeschirmten optischen Potentiale abstoßend und gehen in den asymptotischen Hartree-Fock Term Gl. (5.25) über. Für die anderen Edelgase ist das Verhalten ähnlich.

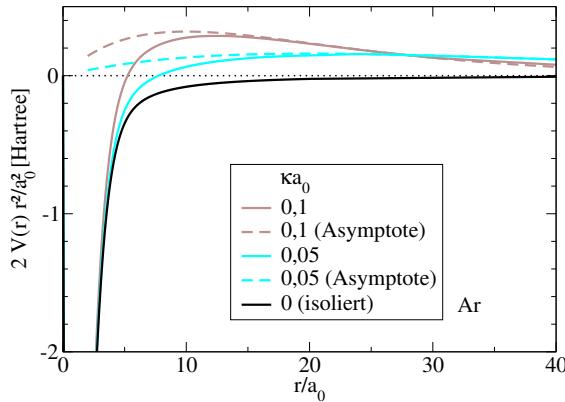


Abb. 5.2: Abgeschirmtes optisches Potential zur Beschreibung der Elektron-Argon Wechselwirkung bei $k = 0$ für die Abschirmparameeter $\kappa a_0 = 0,05$ und $0,1$ im Vergleich mit dem isolierten System. Zusätzlich sind die Asymptoten aus Gl. (5.25) angegeben.

Der Einfluss der Abschirmung auf die Transportquerschnitte wird in den Abb. 5.3 (a)-(f) für alle Edelgase gezeigt. Dabei wurden Streuphasenrechnungen für das abgeschirmte optische Potential Gl. (5.14) bei verschiedenen Abschirmparametern κ durchgeführt. Grundsätzlich fällt auf, dass wie bei den Elektron-Ion Stößen die Abschirmung einen großen Einfluss auf die langsamten Elektronen und einen geringen Einfluss auf die schnellen Elektronen hat.

Genauer wird zunächst Argon diskutiert, Abb. 5.3 (c) und (d). Bereits schwache Abschirmungen führen dazu, dass der Transportquerschnitt bei langsamten Elektronen stark abnimmt. Das für das isolierte System deutlich ausgeprägte Ramsauer-Minimum löst sich nach und nach auf, bis es bei $\kappa a_0 \approx 0,025$ komplett verschwindet. Die Ursache dafür ist die Reduktion der nullten Streuphase δ_0 verglichen mit der des isolierten Systems. Für höhere Wellenzahlen $ka_0 \geq 0,2$ gehen die Transportquerschnitte ineinander über, Abschirmeffekte spielen hier keine Rolle. Das unterstreicht die Korrespondenz, dass das Potential für kleine Abstände die Streuquerschnitte hoher Energien beeinflussen.

Für dichtere Plasmen $\kappa a_0 > 0,025$ wirkt der repulsive Anteil des optischen Potentials derart, dass $\delta_0(k) < 3\pi$. Das Ramsauer-Minimum ist verschwunden und der Transportquerschnitt steigt. Ein neues Minimum im Transportquerschnitt bildet sich nun aufgrund der ersten Streuphase δ_1 und ist daher keine Folge des Ramsauer-Effekts. Die Position und Tiefe des Minimums steigen bei wachsender Abschirmung κ , die Position des Maximums verschiebt sich zu höheren Energien bei abnehmender Höhe. Für Krypton und Xenon lässt sich ein analoges Verhalten beobachten.

Betrachtet man Helium Abb. 5.3 (a) ergeben sich leichte Unterschiede. Da es in den Streuphasen der Elektron-Helium Stöße keinen π -Durchlauf der nullten Streuphasen δ_0 gibt, führen die durch die Abschirmung abgeschwächten Streuphasen bereits bei kleinen Abschirmparametern κ zu einer Erhöhung des Transportquerschnitts. Ein Minimum bildet sich aufgrund der ersten Streuphase δ_1 heraus. Ähnlich wie bei Argon verschiebt sich das steigende Minimum bei stärkeren Abschirmparameters zu höheren Energien, das Maximum bleibt allerdings unverändert. Minimum und Maximum nähern sich an und treffen sich bei $\kappa a_0 \approx 0,1$, ein Sattelpunkt entsteht und geht bei dichten Plasmen $\kappa a_0 \approx 0,2$ in einen Wendepunkt über. Für Neon lässt sich ein analoges Verhalten zu Helium beobachten.

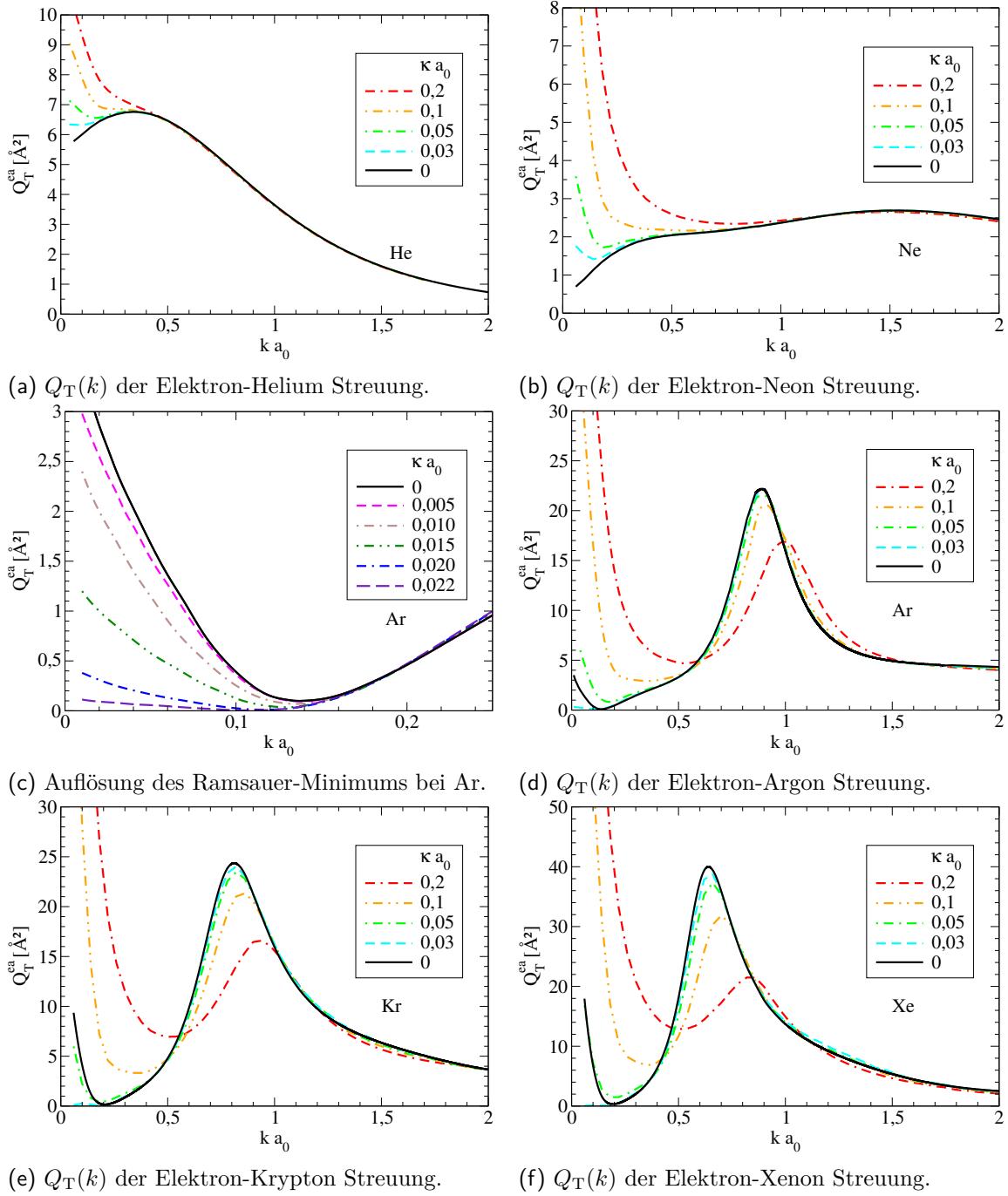


Abb. 5.3: Transportquerschnitte der Elektronenstreuung an Edelgasen im Plasma. Streuphasenrechnungen aus dem abgeschirmten optischen Potential, Gl. (5.14), sind für verschiedene Abschirmparameter κa_0 angegeben.

5.2 Analyse der Elektron-Atom Korrelationsfunktionen

Elektron-Atom Korrelationen lassen sich analog zu den Elektron-Ion Korrelationen, siehe Abs. 3.4.3, berechnen. Bei klassischer Behandlung der Atome und nach Durchführung des

adiabatischen Grenzfalls folgt für die Elektron-Atom Korrelationsfunktionen entsprechend zu Gl. (3.116)

$$d_{ll'}^{\text{ea}} = \frac{\hbar^3}{3\pi^2 m} n_a \Omega_0 \int_0^\infty dk k^5 (\beta E_k^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} f_k^e (1 - f_k^e) Q_T^{\text{ea}}(k), \quad (5.27)$$

mit der Teilchendichte der Atome n_a . Ist das Elektronensystem aufgrund niedriger Ionisationsgrade ($\alpha_{\text{ion}} \ll 1$) nichtentartet ($\Theta \gg 1$), folgt

$$d_{ll'}^{\text{ea}} = \frac{\hbar^3}{3\pi^2 m} n_a \Omega_0 \frac{n_e \Lambda_e^3}{2} \int_0^\infty dk k^5 (\beta E_k^e)^{\frac{l+l'}{2}-1} e^{-\beta E_k^e} Q_T^{\text{ea}}(k). \quad (5.28)$$

Verhältnismäßig zum Elektron-Ion Transportquerschnitt Q_T^{ei} beeinflusst die Plasmaumgebung den Elektron-Atom Transportquerschnitt Q_T^{ea} nur schwach. Das Stoßintegral der Elektron-Atom Korrelationsfunktion ist praktisch allein von der Temperatur abhängig. Die Dichtearabhängigkeit der Elektron-Atom Korrelationsfunktion ist im Gegensatz zu den Elektron-Ion Korrelationsfunktionen trivial.

Für die Vergleichbarkeit der Edelgase untereinander wird anstelle der Massendichte ρ die schwere Teilchendichte $n_{\text{heavy}} = \rho N_A / M$ zur Darstellung der Ergebnisse verwendet (N_A ist die Avogadro-Konstante und M ist die molare Masse). Schwere Teilchen sind Ionen und Atome. Der Beitrag der Elektronen zur Massendichte ρ ist vernachlässigbar. In den betrachteten Parameterbereichen ist der Anteil mehrfach geladener Ionen gering, es wird $n_{\text{heavy}} = n_a + n_i$ gesetzt, wobei $n_i = n_e$ die Teilchendichte einfach geladener Ionen ist.

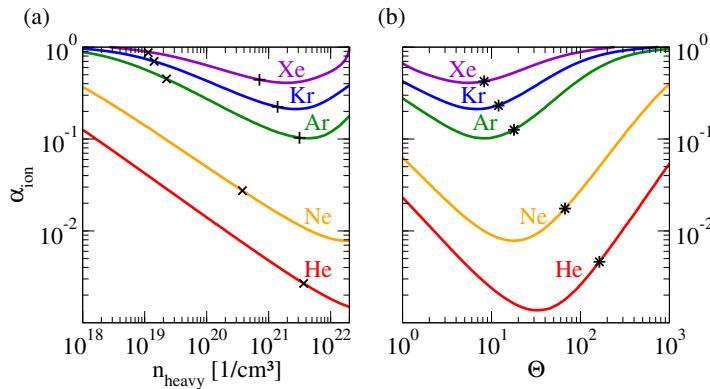
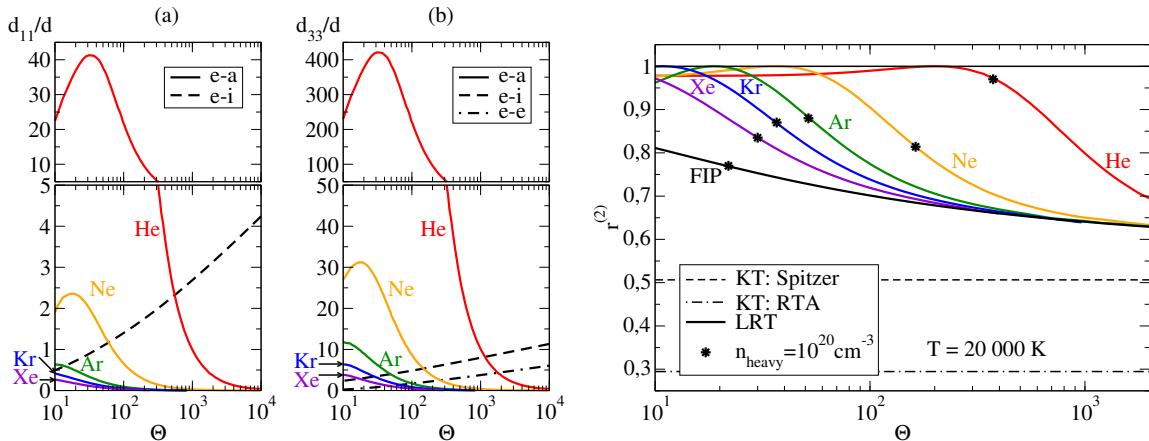


Abb. 5.4: Ionisationsgrade partiell ionisierter Edelgase bei $T = 20\,000$ K, entsprechend [KHR05], aufgetragen in Abhängigkeit von: (a) n_{heavy} , \times geben den entsprechenden Wert für $\Theta = 100$, $+$ für $\Theta = 10$ an; und (b) Θ , $*$ gibt den Wert für $n_{\text{heavy}} = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ an.

In Abb. 5.4 ist für die Isotherme $T = 20\,000$ K der Ionisationsgrad $\alpha_{\text{ion}} = n_e / n_{\text{heavy}}$ der Edelgase über die schwere Teilchendichte n_{heavy} und den Entartungsparameter Θ aufgetragen. Die Zusammensetzung wurde dabei mit dem Programm Paket COMPTRA04 [KHR05] berechnet. Bei niedrigen Dichten lässt sich das Edelgasplasma durch ein einfache vollständig ionisiertes Plasmamodell beschreiben. Für mittelstarke Dichten bilden sich Bindungszustände

aus, der Ionisationsgrad nimmt ab und bildet ein Minimum. Beispielsweise sind im partiell ionisierten Neon mit 10^{22} schwere Teilchen je Kubikzentimeter lediglich 1% geladen. Aufgrund der Druckionisation (Mott-Effekt) steigt der Ionisationsgrad für hohe Dichten rapide an. Für Dichten höher der Mott-Dichte $n_{\text{Mott}} \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ verschwinden die Bindungszustände, $n_a = 0$.

Dieser Verlauf des Ionisationsgrades ist charakteristisch und auch für andere Temperaturen beobachtbar. Quantitativ verändert sich die Lage und Tiefe des Minimums abhängig von der Temperatur. So steigt beispielweise der Anteil der Atome bei niedrigeren Temperaturen, siehe [RRN95].



(a) Korrelationsfunktionen: (a) d_{11} und (b) d_{33} in Einheiten von d aus Gl. (3.56). Die verschiedenen Beiträge $e-a$ (durchgezogen), $e-i$ (gestrichelt) und $e-e$ (Strich-Punkt-Linie) sind dargestellt.

(b) Renormierungsfunktion, Gl. (4.57), des PIP-Modells (durchgezogen farbig) im Vergleich zum FIP-Modell (durchgezogen schwarz). Grenzfälle von Spitzer (gestrichelt) und RTA (Strich-Punkt-Linie) sind angegeben.

Abb. 5.5: Korrelationsfunktionen und der Einfluss höherer Momente auf die Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit partiell ionisierter Edelgase bei $T = 20\,000 \text{ K}$.

Mit Hilfe der Zusammensetzung und der Streuquerschnitte können die verallgemeinerten Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen, Gl. (5.27), berechnet werden. In Einheiten von d , Gl. (3.56), sind die Korrelationsfunktionen vergleichbar.

Für d_{11} und d_{33} sind Isotherme bei $T = 20\,000 \text{ K}$ in Abb. 5.5 (a) gezeigt. Die verschiedenen Beiträge sind separat über den Entartungsparameter Θ gezeigt. In Θ sind sowohl die $e-i$ als auch die $e-e$ Beiträge zu den Korrelationsfunktionen für alle Edelgase gleich. Wie in den Korrelationsfunktionen, Gl. (5.27), angedeutet, ist der atomare Beitrag dort maximal, wo der Ionisationsgrad minimal ist, vgl. Abb. 5.5 (a) mit Abb. 5.4. Allerdings ist festzustellen, dass selbst bei einem signifikant größeren Anteil der Atome ($\approx 90\%$), siehe Ionisationsgrad in Abb. 5.4, der Beitrag der Ionen dominant ist. Das verdeutlicht die Stärke der geladenen Teilchenwechselwirkungen gegenüber der $e-a$ Wechselwirkung.

Bei dem Vergleich mit den Korrelationsfunktionen höherer Momente fällt auf, dass der Anteil der Elektron-Atom Stöße deutlich stärker ansteigt, als der Elektron-Ion Anteil. Im betrachteten Beispiel sind $d_{33}^{\text{ea}}/d_{11}^{\text{ea}} \approx 10$ und $d_{33}^{\text{ei}}/d_{11}^{\text{ei}} \approx 2.5$. Verglichen mit dem FIP-Modell bei $Z = 1$ folgt entsprechend Gl. (4.57), dass der Einfluss der höheren Momente gering ist (Renormierung ≈ 1), grafisch verdeutlicht in Abb. 5.5 (b). Physikalisch bedeutet dies, dass

die Elektronen bei kleinen Ionisationsgraden ($\alpha_{\text{ion}} < 1$) der Fermi-Statistik folgen. Deformationen der Verteilungsfunktion werden durch Elektron-Elektron Stöße praktisch vollständig ausgeglichen. Dieser Fakt wurde bereits im Rahmen des FIP-Modells mit der effektiven Ionenladung ($Z \hat{=} \alpha_{\text{ion}}$), Abs. 4.2.1, diskutiert, und wird im Rahmen des PIP-Modells bestätigt.

Abb. 5.5 (b) zeigt, dass die Ein-Moment Näherung bei Teilchendichten größer 10^{20} cm^{-3} für alle Edelgase anwendbar ist. Die inverse elektrische Leitfähigkeit (spezifischer Widerstand) setzt sich dann additiv aus Elektron-Ion und Elektron-Atom Beiträgen zusammen $\sigma^{-1} = \sigma_{\text{ei}}^{-1} + \sigma_{\text{ea}}^{-1} \propto d_{11}^{\text{ei}} + d_{11}^{\text{ea}}$. Dieses Verhalten ist als Matthiessen Regel [Mat58] bekannt, siehe [ZOR⁺16, DSB⁺17], und wird in der kinetischen Theorie häufig zur Berechnung von Relaxationszeiten $\tau^{-1} = \tau_{\text{ei}}^{-1} + \tau_{\text{ea}}^{-1}$ verwendet, siehe [LM84, FR17].

5.3 Leitfähigkeit realer Systeme II: Edelgasplasmen

In diesem Abschnitt wird die elektrische Leitfähigkeit von Edelgasplasmen untersucht. Nach Auswertung der Korrelationsfunktionen in T-Matrix Näherung wird die Leitfähigkeit analog zu Abs. 4.2.3 in einer Zwei-Momenten Näherung berechnet. Die Ergebnisse werden im Unterabschnitt 5.3.1 mit den Leitfähigkeitsmessungen aus Schockwellenexperimenten verglichen.

Die Renormierungsfunktion Abb. 5.5 (b) deutet darauf hin, dass insbesondere für Helium und Neon bereits eine Ein-Moment Näherung zur Beschreibung der elektrischen Leitfähigkeit bei mittleren Dichten ausreicht. Eine Fitformel zur Berechnung der Leitfähigkeit wird in Abs. 5.3.2 vorgeschlagen und anhand von numerischen Berechnungen diskutiert.

Im Bereich hoher Dichten $n_{\text{heavy}} \sim 10^{22} - 10^{23} / \text{cm}^3$ ist die Thermodynamik zu hinterfragen. Berechnete Zusammensetzungen weichen bei verschiedenen thermodynamischen Zugängen erheblich ab. Die Zusammensetzung beeinflusst jedoch Berechnungen von Transportgrößen erheblich. In Abs. 5.3.3 werden die Schockwellenexperimente dichten Kryptons untersucht. Die Leitfähigkeitsmessungen werden dazu dienen, den Ionisationsgrad abzuschätzen. Temperaturabhängig werden diese Ergebnisse mit thermodynamischen Zugängen verglichen.

5.3.1 Vergleich mit experimentellen Daten

Abb. 5.6 zeigt den Einfluss der Atome bei $T = 20\,000 \text{ K}$. Ähnlich wie bei partiell ionisiertem Wasserstoff, siehe [RRN95], weist die Leitfähigkeit für alle Edelgase ein charakteristisches Minimum auf, dessen Position in der Nähe des Tiefpunktes von α_{ion} liegt, vgl. Abb. 5.4, da bei kleinen Ionisationsgraden deutlich weniger Elektronen für den Transport bereit stehen. Abb. 5.6 (a) stellt den Vergleich zwischen vollständig ionisiertem (Strich-Punkt-Linie $\alpha_{\text{ion}} \hat{=} Z = 1$) und partiell ionisiertem Plasma ($\alpha_{\text{ion}} < 1$) her. Da im PIP-Modell ein Teil der Ladungsträger gebunden sind und dem Transport nicht zur Verfügung stehen, wird selbst ohne die Berücksichtigung der Elektron-Atom Stöße (gestrichelte Linie $V_{\text{ea}} = 0$) die Leitfähigkeit gesenkt. Eine drastischere Reduktion erfährt der Elektronenstrom durch Stöße mit den Atomen (durchgezogene Linie). Der Effekt ist für die leichteren Edelgase stärker. Der systematische Trend zu schwereren Edelgasen aus Abb. 5.4 setzt sich fort. Insgesamt liegt der Effekt für Argon bei etwa einer Größenordnung und für Helium bei bis zu zwei Größenordnungen. Die gemessenen Leitfähigkeitswerte für Helium, Neon und Argon können durch das PIP-Modell mit dem optischen Potential zur Beschreibung der Elektron-Atom Wechselwirkung sehr gut beschrieben werden, siehe Abb. 5.6 (b). Ähnlich gute Ergebnisse erhielt Adams *et al.* [ARR⁺07], der die Elektron-Atom Korrelationsfunktionen über die gemessenen Transportquerschnitte ausgewertet hat. Anzumerken ist dabei, dass die Abschirmung im betrachteten

Parameterbereich klein ist $\kappa a_0 \leq 0,1$. Die Plasmaumgebung wirkt sich anders als bei den Elektron-Ion Stößen nur unwesentlich auf den Elektron-Atom Transportquerschnitt aus. Der Einfluss auf die Leitfähigkeit liegt unterhalb von 5%.

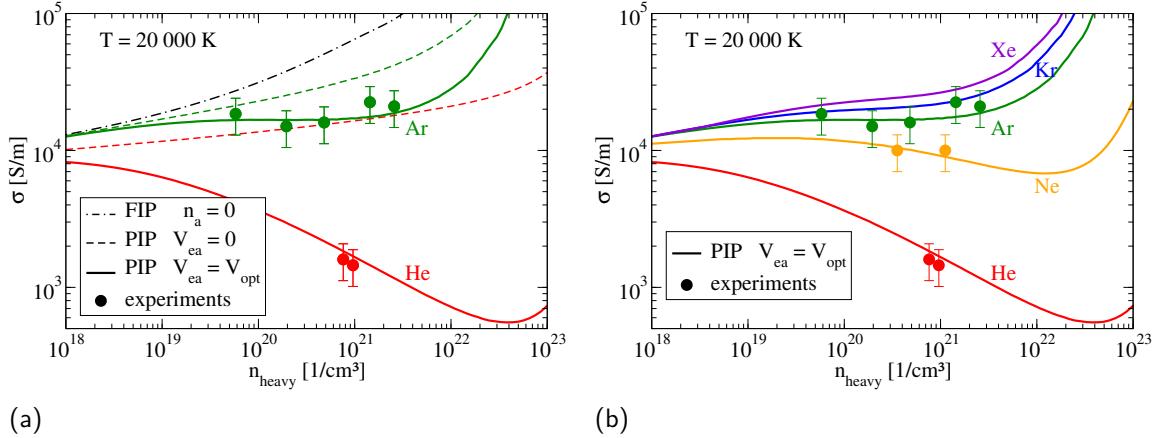


Abb. 5.6: Leitfähigkeit partiell ionisierter Edelgase (PIP) bei $T = 20\,000$ K unter Verwendung des optischen Potentials zur Beschreibung der Elektron-Atom Wechselwirkung (durchgezogen): (a) für Helium (rot) und Argon (grün) im Vergleich mit experimentellen Daten (\bullet : [DFG⁺98, FTZ⁺03, IMFD76]), dem FIP-Modell $n_a = 0$ (Strich-Punkt-Linien) und bei Vernachlässigung der Elektron-Atom Wechselwirkung $V_{ea} = 0$ (gestrichelt); sowie (b) für Helium (rot), Neon (orange), Argon (grün), Krypton (blau) und Xenon (violett) verglichen mit experimentellen Daten (\bullet [DFG⁺98, FTZ⁺03, IMFD76]).

Für die schweren Edelgase Argon und Xenon sind verschiedene Isothermen der elektrischen Leitfähigkeit in Abb. 5.7 gezeigt. Durch die farbige Darstellung wurden die gemessenen Daten von Ivanov *et al.* [IMFD76], Shilkin *et al.* [SDG⁺03] sowie von Mintsev und Fortov [MF79] gruppiert, und können den Isothermen zugeordnet werden. Für einen genaueren Vergleich mit den Experimenten wurde die Leitfähigkeit an den konkreten experimentellen Bedingungen berechnet.

Durch die Beschreibung der Elektron-Atom Wechselwirkung mit dem optischen Potential können die Experimente durch das PIP-Modell für verschiedene Temperaturen sehr gut verstanden werden. Speziell bei Argon, Abb. 5.7 (a), sind gute Übereinstimmungen sowohl bei tiefen als auch bei höheren Temperaturen zu finden.

Alternativ zum optischen Potential sind in Abb. 5.7 (b) Berechnungen von Kuhlbrod et al. [KRR⁺05] mit dem Polarisationspotential dargestellt. Wie in [ARR⁺07] gezeigt, können wesentliche Eigenschaften wie der Transportquerschnitt des Elektron-Atom Streuprozesses durch das Polarisationspotential selbst nicht reproduziert werden. Für die Leitfähigkeit ergeben sich somit Abweichungen von bis zu zwei Größenordnungen. Trotzdem können qualitative Charakteristika wie beispielsweise das Leitfähigkeitsminimum bei tiefen Temperaturen beobachtet werden. Die zentrale Rolle spielt dabei der Ionisationsgrad.

Der Einfluss des Ionisationsgrades auf Transportgrößen kann mitunter sehr stark werden. In Abs. 5.3.2 wurde dies bereits für die Korrelationsfunktionen diskutiert. Auswirkungen auf die Leitfähigkeit werden im nächsten Abschnitt erläutert. Dabei wird insbesondere für die leichteren Edelgase Helium und Neon ein direkter Zusammenhang zwischen elektrischer

Leitfähigkeit und Ionisationsgrad gefunden.

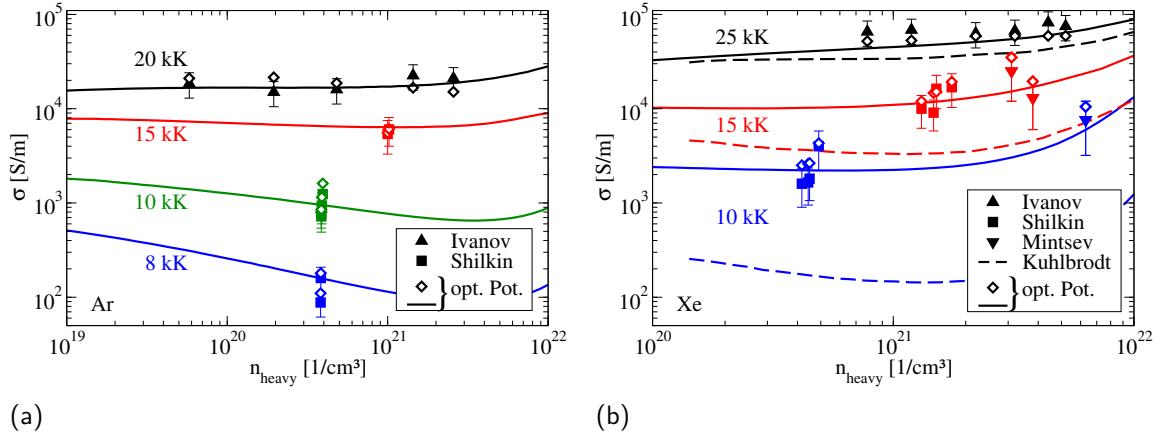


Abb. 5.7: Leitfähigkeit der schweren Edelgasplasmen (a) Argon bei $T = 8000 \text{ K}$ (blau), 10000 K (grün), 15000 K (rot) und 20000 K (schwarz) im Vergleich mit experimentellen Daten (\blacktriangle : [IMFD76]; \blacksquare : [SDG⁺03]; \diamond : Berechnungen bei experimentellen Bedingungen), und (b) Xenon bei $T = 10000 \text{ K}$ (blau), 15000 K (rot) und 25000 K (schwarz) im Vergleich mit experimentellen Daten (\blacktriangle : [IMFD76]; \blacksquare : [SDG⁺03]; \blacktriangledown : [MF79]; \diamond : Berechnungen bei experimentellen Bedingungen) und Berechnungen von Kuhlbrodt *et al.* [KRR⁺05] mit Polarisationspotential (gestrichelt).

5.3.2 Fitformeln für die Leitfähigkeit von Helium und Neon

Die Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit partiell ionisierter Plasmen erweist sich als deutlich aufwendiger als bei vollständig ionisierten Plasmen, da einerseits im chemischen Bild die Zusammensetzung des Plasmas und andererseits entsprechende Transportquerschnitte für die Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen berechnet werden müssen. Letzteres wurde in den vorigen Abschnitten dieses Kapitels detailliert beschrieben. Eine einfache Formel zur Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit partiell ionisierter Plasmen ist daher wünschenswert. In diesem Abschnitt werden speziell die leichteren Edelgase Helium und Neon untersucht.

Helium und Neon weisen bishin zu einigen 10^4 K schwache Ionisationsgrade $\alpha_{\text{ion}} \ll 1$ auf. Der Einfluss höherer Momente ist gering, über einen Dichtebereich von einigen Größenordnungen kann für die Renormierung $r \approx 1$ angenommen werden, siehe Abb 5.5 (b). In diesem Bereich ist weiterhin die Elektron-Atom Korrelationsfunktion gegenüber der Elektron-Ion Korrelationsfunktion dominant $d_{11}^{\text{ea}} \gg d_{11}^{\text{ei}}$, siehe Abb. 5.5 (a). Für die elektrische Leitfähigkeit partiell ionisierten Heliums und Neons kann demnach

$$\sigma = \frac{e^2 n_e^2}{\beta} \frac{\Omega_0}{d_{11}^{\text{ea}}}, \quad (5.29)$$

angenommen werden. Aufgrund der niedrigen Ionisationsgrade $\alpha_{\text{ion}} = n_e/(n_a + n_i) \approx n_e/n_a$ ist das Plasma nichtentartet und Abschirmeffekte in Q_T^{ea} werden vernachlässigt. Mit Gl. (5.28)

folgt ($x = ka_0$)

$$\sigma(n, T) = 3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{(4\pi\epsilon_0)^4 \hbar^2}{e^6 m^{3/2} \beta^{5/2}} \alpha_{\text{ion}} \left[\int_0^\infty dx x^5 e^{-\xi(T)x^2} Q_T^{\text{ea}}(x/a_0) a_0^{-2} \right]^{-1} \quad (5.30)$$

$$= 3,09 \cdot 10^{-7} \alpha_{\text{ion}} T^{5/2} f(\xi) \text{ Sm}^{-1} \text{K}^{-5/2}, \quad (5.31)$$

mit $\xi(T) = \beta \hbar^2 / (2ma_0^2)$ und $f(\xi) = 1 / \left[\int_0^\infty dx x^5 e^{-\xi(T)x^2} Q_T^{\text{ea}}(x/a_0) a_0^{-2} \right]$. Für Helium und Neon werden folgende Fitfunktionen mit Temperaturbereich angegeben

$$f_{\text{He}}(\xi) = 13,3 \xi^{-2,8}, \quad 7000 \text{ K} < T < 30000 \text{ K} \quad (5.32)$$

$$f_{\text{Ne}}(\xi) = 8,8 \xi^{-3,1}, \quad 5000 \text{ K} < T < 20000 \text{ K}. \quad (5.33)$$

Eingesetzt in Gl. (5.31) folgt ein einfacher Zusammenhang zwischen der elektrischen Leitfähigkeit und dem Ionisationsgrad.

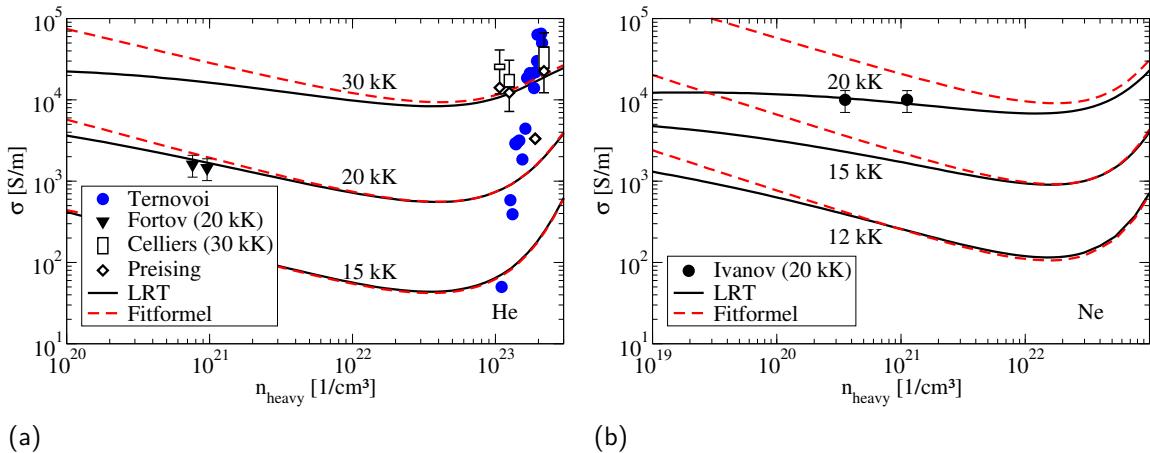


Abb. 5.8: Leitfähigkeit der leichten Edelgasplasmen (a) Helium bei $T = 15000 \text{ K}$, 20000 K und 30000 K (schwarz durchgezogen: PIP-Modell, rot gestrichelt: Fitformel, Gl. (5.31)) im Vergleich mit experimentellen Daten (\blacktriangledown : [DFG⁺98, FTZ⁺03]; \bullet : [TFP⁰²]; \square : [CLE¹⁰, SMWC12]) und DFT-MD Rechnungen (\diamond) von Preising *et al.* [PLB¹⁸] und (b) Neon bei $T = 12000 \text{ K}$, 15000 K und 20000 K (schwarz durchgezogen: PIP-Modell, rot gestrichelt: Fitformel Gl. (5.31)) im Vergleich mit experimentellen Daten (\bullet) von Ivanov *et al.* [IMFD76].

Die Güte der Formel wird in Abb. 5.8 überprüft. Es ist deutlich sichtbar, dass die Übereinstimmung bei kleinen Ionisationsgraden etwa bei kleinen Temperaturen am größten ist. Für den Niederdichtegrenzfall verliert die Fitformel an Gültigkeit, da das Plasma dort stärker ionisiert vorliegt und Elektron-Ion Stöße relevant werden. Analytische Fitformeln des FIP-Modells, wie beispielsweise die Spitzer-Formel, ist dann zu empfehlen.

Für Helium, Abb. 5.8 (a), werden zudem die Experimente von Ternovoi [TFP⁰²] bei $1 - 3 \cdot 10^4 \text{ K}$ und Celliers [CLE¹⁰] bei $3 \cdot 10^4 \text{ K}$ angezeigt. Celliers *et al.* [CLE¹⁰] maßen dabei die Reflektivität, die elektrische Leitfähigkeit wurde über verschiedene Drude-Fits von Celliers *et al.* [CLE¹⁰] und Soubiran *et al.* [SMWC12] gewonnen. In Abb. 5.8 (a) werden diese Daten zu entsprechenden Boxen gruppiert. Es wurden ausschließlich die Daten gewählt,

bei denen die Abweichung aufgrund der verschiedenen Drude-Fits weniger als einen Faktor 2 beträgt. Weitere Maximalunsicherheiten von 50% wurden angenommen.

Auch bei relativ hohen Dichten 10^{23} cm^{-3} ist die Übereinstimmung mit dem vorgestellten PIP-Modell gut. Ähnlich gute Ergebnisse werden speziell bei 30 000 K durch kürzlich veröffentlichte Daten aus DFT-MD Simulationen von Preising *et al.* [PLB⁺18], in denen das HSE-Austauschfunktional verwendet wurde, erhalten. Die Daten schließen an das PIP-Modell an. Größere Abweichungen mit den DFT-MD Simulationen (etwa Faktor 2) liegen bei 20 000 K vor. Ursachen könnten hierbei einerseits bei der schwierigen Beschreibung der Bindungszustände durch ebene Wellen im Rahmen der DFT (physikalisches Bild) und andererseits bei der Behandlung des Mott-Übergangs im PIP-Modell (chemisches Bild) liegen. Um diese Abweichungen allerdings genauer zu analysieren sind weitere Berechnungen notwendig.

Die Fitformel, Gl. (5.31), ist nach Abb. 5.8 selbst bei höheren Teilchendichten $\propto 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ anwendbar, da speziell für die leichteren Edelgase Helium und Neon die Ionisationsgrade niedrig sind und somit das Elektronensystem im Rahmen des PIP-Modells als nichtentartet ($\Theta > 1$) und ideal ($\Gamma < 1$) aufgefasst werden kann. Über die Analysen mit dem Drude-Modell von Celliers und Soubiran kann zudem eine Verbindung zur Reflektivität geschlossen werden. Damit kann die elektrische Leitfähigkeit ausgehend vom chemischen Modell im weiteren Sinne als Bindeglied zwischen den Messungen der Reflektivität und dem Ionisationsgrad verstanden werden. Detailliertere Untersuchungen sowie die Übertragung auf weitere Edelgase oder gar auf andere Elementklassen ist Gegenstand weiterer Arbeiten. Im nächsten Abschnitt wird am Beispiel dichten Kryptons der Zusammenhang zwischen der elektrischen Leitfähigkeit und dem Ionisationsgrad untersucht und mit Ergebnissen aus thermodynamischen Modellen verglichen.

5.3.3 Zusammensetzung dichten Kryptons

In diesem Abschnitt wird partiell ionisiertes und dichtes Krypton untersucht. Erstmals werden dabei Abschirmeffekte durch das Plasma im optischen Potential einbezogen.

Während die Zusammensetzung im Bereich niedriger Dichten durch den Debye-Grenzfall ermittelt werden kann, muss der Wechselwirkungsanteil des chemischen Potentials im Bereich des Mott-Übergangs genähert werden. Die entsprechenden Ionisationsgrade weichen für verschiedene Näherungen mit steigender Dichte stark ab, siehe [ARR⁺07]. Von Chen *et al.* [CZGL15] wurde der Ionisationsgrad mit dem SFVT-Modell (self-consistent fluid variational theory) berechnet und mit dem Programm Paket COMPTRA04 [KHR05] verglichen. Es wurden im Bereich von einigen g/cm^3 bei niedrigeren Temperaturen Abweichungen von bis zu zwei Größenordnungen festgestellt. Der Einfluss auf die Transportgrößen wie der elektrischen Leitfähigkeit ist daher enorm, dargestellt in Abb. 5.9 (a). Neben den Berechnungen sind die gemessenen Daten von Glukhodedov *et al.* [GLM99] für verschiedene Temperaturen bei $\rho = 5,5 \text{ g/cm}^3$ gezeigt. Grundsätzlich ist festzustellen, dass mittels der Zusammensetzung nach COMPTRA04 die Leitfähigkeit überschätzt und nach dem SFVT-Modell unterschätzt wird. Diese starken Abweichungen lassen sich auf den Ionisationsgrad zurückführen. Abschirmeffekte sind zwar nicht vernachlässigbar, allerdings verhältnismäßig klein.

In Abb. 5.9 (b) werden aus den experimentellen Daten zur Leitfähigkeit entsprechende Ionisationsgrade bestimmt. Da das Modell des abgeschirmten optischen Potentials bereits im Bereich mittlerer Dichten sehr gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten liefert, wird über dieses Modell der Ionisationsgrad gesucht, der auf die experimentellten Werte der Leitfähigkeit führt. Wie zu erwarten ist, liegt auch der über die Experimente

bestimmte Ionisationsgrad zwischen den Berechnungen von COMPTRA04 und SFVT. Sogar im Bereich niedriger Temperaturen ist eine Extraktion des Ionisationsgrades möglich.

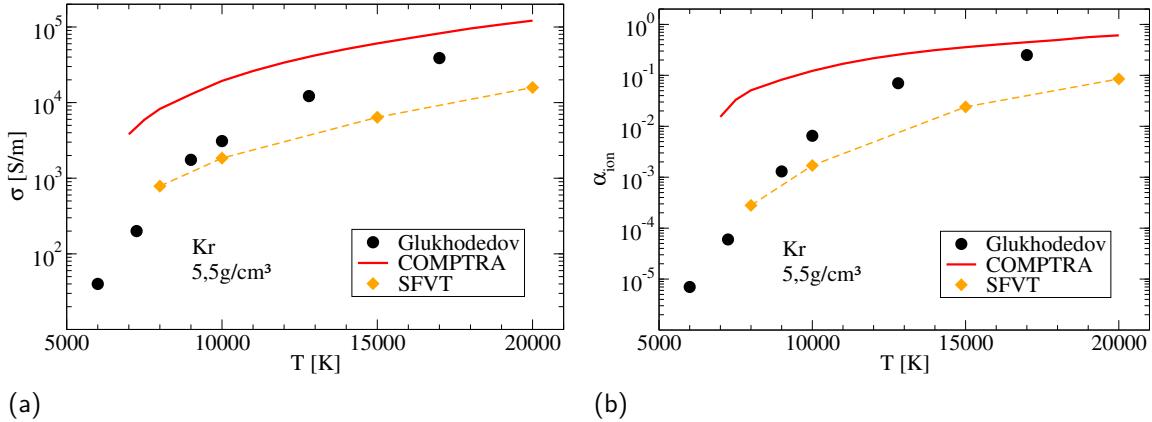


Abb. 5.9: Elektrische Leitfähigkeit (a) und Ionisationsgrad (b) dichten Kryptons bei $\rho = 5,5 \text{ g/cm}^3$ ($n_{\text{heavy}} = 4 \cdot 10^{28} / \text{cm}^3$) in Abhängigkeit von der Temperatur T . Experimentelle Daten der elektrischen Leitfähigkeit von Glukhodedov *et al.* [GLM99] und die aus ihnen extrahierten Ionisationsgrade (\bullet) werden mit Berechnungen unter Verwendung der Zusammensetzung nach COMPTRA [KHR05] (durchgezogen) und SFVT [CZGL15] (\diamond) verglichen.

Sofern experimentelle Daten der Leitfähigkeit im Bereich niedriger Temperaturen $T < 20\,000 \text{ K}$ vorliegen, kann dieses Verfahren verwendet werden, um Ionisationsgrade von Edelgasen zu bestimmen. Dies bietet die Möglichkeit thermodynamische Modelle im Bereich hoher Dichten zu überprüfen.

6. ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK

In der vorliegenden Arbeit wurde ein quantenstatistischer Zugang genutzt, um neue Ergebnisse im Bereich der Transporteigenschaften nichtidealer und partiell ionisierter Plasmasysteme zu erhalten.

Der Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf Transporteigenschaften wurde untersucht. Elektron-Elektron Stöße liefern keinen Beitrag zum Gesamtimpuls, wirken aber der Deformation der Verteilungsfunktion durch Elektron-Ion Stöße entgegen. Erstmals gelingt die konsistente Erweiterung des Niederdichtegrenzfalls auf Elektron-Elektron Kraft-Kraft Korrelationsfunktionen mit geradzahligen Momenten des Energietransports $\mathbf{P}_2, \mathbf{P}_4, \mathbf{P}_6$. Jenseits des vollständig ionisierten Wasserstoffs wurden die Vorfaktoren der thermoelektrischen Transportgrößen im Niederdichtegrenzfall bestimmt. Für das Lorentz-Plasma werden exakte Werte aus der kinetischen Theorie durch die Mehr-Momenten Näherung der Linearen-Response Theorie reproduziert.

Durch Abschätzen der Fermi-Funktionen gelingt es, Quanteneffekte wie Entartung und Austauschteme in den Elektron-Elektron Stößen zu berücksichtigen und die Korrelationsfunktionen in einem Intervall anzugeben. Der Korrekturfaktor wurde für das Modell des vollständig ionisierten Plasmas in einem großen Dichte- und Temperaturbereich angegeben. Einflüsse der Ionenladung wurden berücksichtigt. Bei niedrigen Temperaturen $T < 10^5$ K ist der Korrekturfaktor durch den Kopplungsparameter Γ darstellbar. Eine Fitformel wurde in dieser Arbeit angegeben.

Durch Einführen dichteabhängiger Abschirmfaktoren besteht die Möglichkeit, T-Matrix Rechnungen und dynamische Abschirmeffekte zu verbinden. Neue MD-Simulationen weisen darauf hin, dass dieses Konzept bei nichtidealen Plasmen mit Kopplungsparametern bis zu $\Gamma \approx 3$ anwendbar ist. Bei stark gekoppelten Systemen ist die Einbeziehung von Strukturfaktoren und Pseudopotentialen nötig. Mit ihnen gelingt es, experimentelle Ergebnisse der elektrischen Leitfähigkeit warmen dichten Aluminiums zu beschreiben.

In Verbesserung des bisher benutzten Polarisationspotentials wurde erfolgreich ein einheitliches optisches Potential für die Beschreibung des Elektron-Atom Streuprozesses eingeführt. Effekte wie z.B. das Ramsauer-Minimum werden reproduziert. Plasmaeffekte wurden berücksichtigt, indem die Bestandteile des optischen Potentials abgeschirmt wurden.

In typischen Dichtebereichen partiell ionisierter Plasmen $0 < \kappa a_0 < 1$ konvergiert das abgeschirmte optische Potential für große Abstände nicht wie im isolierten Fall ($\kappa = 0$) gegen das (attraktive) Polarisationspotential, sondern wird repulsiv. Im Unterschied zu Elektron-Ion Wechselwirkung führen Abschirmeffekte in der Elektron-Atom Wechselwirkung zu einer Reduktion der elektrischen Leitfähigkeit. Es ist festzustellen, dass Abschirmeffekte der Elektron-Atom Wechselwirkung erst bei Teilchendichten $n_{\text{heavy}} > 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ wirksam werden. Ab dann beeinflussen sie die elektrischen Leitfähigkeit um bis zu einer Größenordnung.

Bei kleinen Ionisationsgraden ist die Ein-Moment Näherung zur Berechnung der elektrischen Leitfähigkeit ausreichend. In diesem Bereich wird die Matthiesen-Regel bestätigt. Ist der Ionisationsgrad sehr gering, $\alpha_{\text{ion}} < 10^{-2}$, so ist er direkt mit der elektrischen Leitfähigkeit

verbunden.

Verbesserungen des verwendeten quantenstatistischen Zugangs sind möglich. So erlaubt die Green-Funktionstechnik grundsätzlich eine konsistente Berücksichtigung der dynamischen Abschirmung und der starken Stößen im Rahmen einer Störungstheorie. Beispiele weiterer Verbesserungen sind die Berücksichtigung von Stößen in der dielektrischen Funktion (jenseits der RPA) und die mikroskopische Behandlung von Mehrteilchenstößen.

Durch die neuen experimentellen Methoden wird es in naher Zukunft möglich sein, weitere Experimente zur warmen dichten Materie durchzuführen. Neben Aluminium, können analoge Betrachtungen zu anderen Elementen durchgeführt werden. Weiterführende Betrachtungen zum temperatur- und dichteabhängigen Pseudopotential sowie eine verbesserte Behandlung des Ion-Ion Strukurfaktors durch DFT-MD oder HNC Rechnungen sind denkbar.

In dieser Arbeit wurde der Korrekturfaktor für die statische elektrische Leitfähigkeit dichte- und temperaturabhängig bestimmt. Eine Übertragung auf die dynamische Leitfähigkeit ist Aufgabe weiterer Forschung. Analog zum Korrekturfaktor der elektrischen Leitfähigkeit können auch Korrekturfaktoren für die Thermokraft und die Wärmeleitfähigkeit bestimmt werden. Allerdings ist die Zwei-Momenten Näherung bereits im klassischen Grenzfall nicht ausreichend, siehe Abb. 4.5. In einer Drei-Momenten Näherung sollten allerdings gute Ergebnisse erzielbar sein. Speziell für die Wärmeleitfähigkeit könnte die Berücksichtigung des sechsten Moments zu einer schnellen Konvergenz der Mehr-Momenten Methode führen. Nachdem die Elektron-Elektron Korrelationsfunktionen mit geradzahligen Momenten des Energie- transports im Niederdichtegrenzfall berechnet wurden, ist dafür jedoch die Übertragung auf beliebige Dichten nötig.

In der Beschreibung partiell ionisierter Plasmen gibt es einige Punkte, die für zukünftige Betrachtungen von Interesse sind. So wurden in den letzten Jahren verstärkt optische Eigenchaften wie die Reflektivität partiell ionisierten Xenons untersucht. Mit Hilfe des optischen Potentials können neue Berechnungen durchgeführt werden, die entgegen empirischen Annahmen auf einer mikroskopische Beschreibung basieren. Bislang wird für das optische Potential in dieser Arbeit ein Fitparameter benötigt. Es wäre wünschenswert, auch diesen Parameter durch weitere fundierte Analysen zu fixieren, sodass das Modell ohne experimentelle Daten als Input auskommt. Ein fernes Ziel könnte zudem sein, das vorgestellte optische Potentialmodell auf andere Elementklassen zu übertragen. Bei einer Übertragung auf Alkalimetalle ist ein stärkerer Einfluss des Polarisationspotentials zu erwarten, da die Polarisierbarkeit etwa eine Größenordnung höher als bei den Edelgasen ist. Damit ist auch zu erwarten, dass dann die Energieabhängigkeit des Polarisationspotentials nicht vernachlässigbar ist.

ANHANG

Abkürzungsverzeichnis

$\alpha \dots$	Thermokraft oder Logarithmus der Fugazität,
$\alpha_{\text{ion}} \dots$	Ionisationsgrad,
$\alpha_{\text{P}} \dots$	Polarisierbarkeit,
$a \dots$	Vorfaktor der Thermokraft oder Abschwächungsparameter,
$a_0 \dots$	Bohr'scher Radius,
$b \dots$	Stoßparameter,
$\delta_\ell \dots$	Streuphase zur Drehimpulsquantenzahl ℓ ,
$\epsilon \dots$	dielektrische Funktion,
$\epsilon_0 \dots$	elektrische Feldkonstante,
$e \dots$	Elementarladung,
$E_k^c \dots$	kinetische Energie des Teilchens der Sorte c mit Impuls $\hbar \mathbf{k}$,
$f_k^c \dots$	Verteilungsfunktion eines Teilchens der Sorte c mit Impuls $\hbar \mathbf{k}$,
\hbar	reduziertes Planck'sches Wirkungsquantum,
$k_B \dots$	Boltzmann-Konstante,
$k \dots$	Wellenzahl,
$\kappa \dots$	Wärmeleitfähigkeit (phänomenologisch) oder Abschirmparameter,
$\lambda \dots$	Wärmeleitfähigkeit unter experimentellen Bedingungen,
$L \dots$	Vorfaktor der Wärmeleitfähigkeit (Lorentz-Zahl),
$\mathcal{L} \dots$	Coulomb-Logarithmus,
$m \dots$	Masse des Elektrons,
$m_c \dots$	Masse des Teilchens der Sorte c ,
$m_{cd} \dots$	reduzierte Masse,
$n_c \dots$	Teilchendichte der Sorte c ,
$\mathbf{P}_n \dots$	n -tes Moment des Energietransports,
$q \dots$	Impulsübertrag geteilt durch \hbar ,
$Q_T \dots$	Transportquerschnitt,
$Q_v \dots$	Viskositätsquerschnitt,
$\rho \dots$	Massendichte,
$\hat{\rho} \dots$	statistischer Operator des Nichtgleichgewichts,
$\hat{\rho}_0 \dots$	statistischer Operator des Gleichgewichts,
$\hat{\rho}_{\text{rel}} \dots$	relevanter statistischer Operator,
$R_{ee} \dots$	Korrekturfaktor,
$r \dots$	Renormierungsfaktor,
$r_0 \dots$	klassischer Umkehrpunkt oder Cut-off Parameter,
$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) \dots$	differentieller Wirkungsquerschnitt,
$\sigma \dots$	elektrische Leitfähigkeit,
$\sigma^* \dots$	reduzierte (elektrische) Leitfähigkeit,
$\varsigma \dots$	Spin,
$s \dots$	Vorfaktor der elektrischen Leitfähigkeit,
$S_{ii} \dots$	statischer Ion-Ion Strukturfaktor,
$T \dots$	Temperatur,
$\vartheta \dots$	Streuwinkel,
$V \dots$	Potential,
$\Omega_0 \dots$	Normierungsvolumen,
$Z \dots$	Ladungszahl der Ionen.

Formelsammlung

Die verwendeten mathematischen Funktionen wurden aus der mathematischen Formelsammlung entnommen.

Fermi-Integrale:

$$I_\nu(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} \int_0^\infty dy \frac{y^\nu}{e^{y-x} + 1},$$

Komplementäre Fehlerfunktion:

$$\text{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty dt e^{-t^2},$$

Integral-exponentialfunktion:

$$\text{Ei}(x) = - \int_{-x}^\infty dt \frac{e^{-t}}{t},$$

Verallgemeinerte harmonische Zahlen:

$$H_t = \int_0^1 \frac{1 - x^t}{1 - x} dx,$$

Sphärische Bessel-Funktionen:

$$j_m(x) = (-x)^m \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^m \frac{\sin(x)}{x},$$

Sphärische Neumann-Funktionen:

$$n_m(x) = -(-x)^m \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^m \frac{\cos(x)}{x},$$

Modifizierte Bessel-Funktionen zweiter Art:

$$K_\nu(x) = \frac{\sqrt{\pi} z^\nu}{2^\nu \Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} \int_1^\infty dt e^{-xt} (t^2 - 1)^{\nu - \frac{1}{2}},$$

inverse thermische Energie:

$$\beta = (k_B T)^{-1},$$

Thermische Wellenlänge:

$$\Lambda_e = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m} \right)^{1/2},$$

Chemisches Potential (ideal):

$$\mu = \frac{1}{\beta} I_{1/2}^{-1} \left(\frac{n_e \Lambda_e^3}{2} \right),$$

Enthalpie pro Teilchen (ideal):

$$h = \frac{1}{\beta} \frac{5}{2} \frac{I_{3/2}(\beta\mu)}{I_{1/2}(\beta\mu)},$$

Abschirmparameter:

$$\kappa_c^2 = \frac{\beta e^2 n_c}{\epsilon_0} \frac{I_{-1/2}(\beta\mu_c)}{I_{1/2}(\beta\mu_c)},$$

Abschirmparameter (Debye):

$$\kappa_{c,D}^2 = \frac{\beta e^2 n_c}{\epsilon_0},$$

Abschirmparameter (Thomas-Fermi):

$$\kappa_{c,TF}^2 = \frac{e^2 m_c}{\pi \epsilon_0 \hbar^2} \left(\frac{3}{\pi} n_c \right)^{1/3},$$

Kopplungsparameter:

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4\pi}{3} n_e \right)^{1/3},$$

Entartungsparameter:

$$\Theta = \frac{2m}{\beta\hbar^2} \left(3\pi^2 n_e \right)^{-2/3},$$

Born-Parameter:

$$\zeta = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{e^2}{2\epsilon_0} \beta^2 n_e = \left(\frac{2}{3\pi^2} \right)^{1/3} \frac{\Gamma}{\Theta},$$

Logarithmus der Fugazität:

$$\alpha = \beta\mu.$$

LITERATURVERZEICHNIS

- [AB84] N. Arista und W. Brandt, Phys. Rev. A 29, 1471 (1984).
- [ACC⁺75] M. Ya. Amus'ya, L. V. Cherepkov, L. V. Chernysheva, S. G. Shapiro und A. Tan-chich, Sov. Phys. JETP 41, 1012 (1975).
- [AL66] N. W. Ashcroft und J. Lekner, Phys. Rev. 145, 83 (1966).
- [AM76] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, Philadelphia, 1976).
- [App61] J. Appel, Phys. Rev. 122, 1760 (1961).
- [ARR⁺07] J. R. Adams, H. Reinholz, R. Redmer, V. B. Mintsev, N. S. Shilkin und V. K. Gryaznov, Phys. Rev. E 76, 036405 (2007).
- [AT05] M. Adibzadeh und C. E. Theodosiou, At. Data Nucl. Data Tables 91, 8 (2005).
- [BBK⁺15] R. Bredow, T. Bornath, W.-D. Kraeft, M. W. C. Dharmawardana und R. Red-mer, Contrib. Plasma Phys. 55, 222 (2015).
- [BdD58] C. Bloch und C. de Dominicis, Nucl. Phys. 7, 459 (1958).
- [BH24] M. Born und W. Heisenberg, Z. Phys. 23, 388 (1924).
- [Bla57] F. J. Blatt, Solid State Phys. 4, 199 (1957).
- [Bog46] N. N. Bogoliubov, *Problems of Dynamic Theory in Statistical Physics* (Gostek-hisdat, Moskau, 1946).
- [Bor72] M. Born, *Optik. Ein Lehrbuch der elektromagnetischen Lichttheorie* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1972).
- [Bro51] H. Brooks, Phys. Rev. 83, 868 (1951).
- [Cal67] F. Calogero, *Variable phase approach to potential scattering* (Academic Press, New York, 1967).
- [CC53] S. Chapman und T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases* (Cambridge University Press, Cambridge, 1953).
- [CER70] R. W. Crompton, M. T. Elford und A. G. Robertson, Aust. J. Phys. 23, 667 (1970).

- [CLE⁺10] P. M. Celliers, P. Loubeyre, J. H. Eggert, S. Brygoo, R. S. McWilliams, D. G. Hicks, T. R. Boehly, R. Jeanloz und G. W. Collins, Phys. Rev. Lett. 104, 184503 (2010).
- [CR74] E. Clementi und C. Roetti, At. Data Nucl. Data Tables 14, 177 (1974).
- [CSR50] R. S. Cohen, J. L. Spitzer und P. McR. Routly, Phys. Rev. 80, 230 (1950).
- [CZGL15] Q. F. Chen, J. Zheng, Y. J. Gu und Z. G. Li, Phys. Plasmas 22, 122706 (2015).
- [Dan88] A. Danjo, J. Phys. B 21, 3759 (1988).
- [DFG⁺98] S. V. Dudin, V. E. Fortov, V. K. Gryaznov, V. B. Mintsev und A. E. Ushnurtsev, AIP Conf. Proc. 429, 793 (1998).
- [DK98] A. W. DeSilva und J. D. Katsouros, Phys. Rev. E 57, 5945 (1998).
- [DKC02] M. P. Desjarlais, J. D. Kress und L. A. Collins, Phys. Rev. E 66, 025401(R) (2002).
- [DPL71] W. M. Duxler, R. T. Poe und R. W. LaBahn, Phys. Rev. A 4, 1935 (1971).
- [DSB⁺17] M. P. Desjarlais, C. R. Scullard, L. X. Benedict, H. D. Whitley und R. Redmer, Phys. Rev. E 95, 033203 (2017).
- [Dw16] M. W. C. Dharmawardana, Phys. Rev. E 93, 063205 (2016).
- [EE88] J. P. England und M. T. Elford, Aust. J. Phys. 41, 701 (1988).
- [Fab72] T. E. Faber, *Introduction to the Theory of Liquid Metals* (Cambridge University Press, Cambridge, 1972).
- [FI76] E. Flowers und N. Itoh, Astrophys. J. 206, 218 (1976).
- [FM73] J. B. Furness und I. E. McCarthy, J. Phys. B 6, 2280 (1973).
- [FR17] M. French und R. Redmer, Phys. Plasmas 24, 092306 (2017).
- [FTZ⁺03] V. E. Fortov, V. Y. Ternovoi, M. V. Zhernokletov, M. A. Mochalov, A. L. Mikhailov, A. S. Filimonov, A. A. Pyalling, V. B. Mintsev, V. K. Gryaznov, und I. L. Iosilevski, JETP 97, 259 (2003).
- [Gat83] G. R. Gathers, Int. J. Thermophys. 4, 209 (1983).
- [GD67] H. A. Gould und H. E. DeWitt, Phys. Rev. 155, 68 (1967).
- [GGS⁺96] J. C. Gibson, R. J. Gulley, P. S. Sullivan, S. J. Buckman, V. Chan und P. D. Burrow, J. Phys. B 29, 3177 (1996).
- [GLA⁺98] J. C. Gibson, D. R. Lun, L. J. Allen, R. P. McEachran, L. A. Parcell und S. J. Buckman, J. Phys. B 31, 3949 (1998).
- [GLM99] S. I. Glukhodedov, V. D. Kirshanov, T. S. Lebedeva und M. A. Mochalov, JETP 89, 292 (1999).

- [Gra58] H. Grad, *Principles of the kinetic theory of gases* in: Handbuch für Physik Bd. XII, ed. S. Flügge, (Springer, Berlin, 1958).
- [Gü96] S. Günter, *Optische Eigenschaften dichter Plasmen* Habilitationsschrift, (Universität Rostock, 1996).
- [Har67] S. Hara, J. Phys. Soc. Japan 22, 710 (1967).
- [HMS71] H. Hahn, E. A. Mason und F. I. Smith, Phys. Fluids 14, 278 (1971).
- [HRRW84] F. E. Höhne, R. Redmer, G. Röpke und H. Wegener, Physica A 128, 643 (1984).
- [Hub61] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A 262, 371 (1961).
- [IMFD76] Y. V. Ivanov, V. B. Mintsev, V. E. Fortov und A. N. Dremin, Sov. Phys. JETP 44, 112 (1976).
- [Joa75] C. Joachain, *Quantum Collision Theory* (North Holland, Amsterdam, 1975).
- [Kar06] V. S. Karakhtanov, Plasma Phys. Rep. 33, 232 (2006).
- [Kar16] V. S. Karakhtanov, Contrib. Plasma Phys. 56, 343 (2016).
- [KHR05] S. Kuhlbrodt, B. Holst und R. Redmer, Contrib. Plasma Phys. 45, 73 (2005).
- [Kih59] T. Kihara, Phys. Soc. Japan 14, 402 (1959).
- [KKER86] W.-D. Kraeft, D. Kremp, W. Ebeling und G. Röpke, *Quantum Statistics of Charged Particle Systems* (Akademie-Verlag, Berlin, 1986).
- [KR00] S. Kuhlbrodt und R. Redmer, Phys. Rev. E 62, 7191 (2000).
- [KRR⁺05] S. Kuhlbrodt, R. Redmer, H. Reinholtz, G. Röpke, B. Holst, V. B. Mintsev, V. K. Gryaznov, N. S. Shilkin und V. E. Fortov, Contrib. Plasma Phys. 45, 61 (2005).
- [KRRR13] V. S. Karakhtanov, R. Redmer, H. Reinholtz und G. Röpke, Contrib. Plasma Phys. 53, 639 (2013).
- [KSK05] D. Kremp, M. Schlanges und W.-D. Kraeft, *Quantum Statistics of Charged Particle Systems* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2005).
- [KSO86] T. Koizumi, E. Shirakawa und I. Ogawa, J. Phys. B 19, 2331 (1986).
- [Kub57] R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957).
- [Lan37] R. E. Langer, Phys. Rev. 51, 669 (1937).
- [Lav17] Y. Lavrinenko, *Private Mitteilung* (2017).
- [Lib59] R. L. Liboff, Phys. Fluids 2, 40 (1959).
- [Lid01] D. R. Lide, *Handbook of Chemistry and Physics* 82. Auflage, (CRC Press Inc., Boca Raton, 2001).
- [LL76] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Mechanics, Course of Theoretical Physics vol. I* (Pergamon Press, Oxford, 1976).

- [LL77] L. D. Landau und E. M. Lifshitz, *Quantum mechanics, Course of Theoretical Physics vol. III* (Pergamon Press, Oxford, 1977).
- [LM84] Y. T. Lee und R. M. More, Phys. Fluids 27, 1273 (1984).
- [Mat58] A. Matthiessen, Philos. Trans. R. Soc. London 148, 383 (1858).
- [MC77] H. B. Milloy und R. W. Crompton, Phys. Rev. A 15, 1847 (1977).
- [MCRR77] H. B. Milloy, R. W. Crompton, J. A. Rees und A. G. Robertson, Aust. J. Phys. 30, 61 (1977).
- [Mes65] A. Messiah, *Quantum mechanics vol. II* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1965).
- [Mes67] A. Messiah, *Quantum mechanics vol. I* (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1967).
- [MF79] V. B. Mintsev und V. E. Fortov, JETP Lett. 30, 375 (1979).
- [MFDM88] H. M. Milchberg, R. R. Freeman, S. C. Davey und R. M. More, Phys. Rev. Lett. 61, 2364 (1988).
- [MM65] N. F. Mott und H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Clarendon Press, Oxford, 1965).
- [MR82] C.-V. Meister und G. Röpke, Ann. Phys. (Leipzig) 494, 133 (1982).
- [MW59] M. H. Mittleman und K. M. Watson, Phys. Rev. 113, 198 (1959).
- [MW60] M. H. Mittleman und K. M. Watson, Ann. Phys. (NY) 10, 268 (1960).
- [OL83] J. K. O'Connell und N. F. Lane, Phys. Rev. A 27, 1893 (1983).
- [Ons31] L. Onsager, Phys. Rev. 37, 405 (1931).
- [ORD62] C. Oberman, A. Ron und J. Dawson, Phys. Fluids 5, 1514 (1962).
- [Pai76] J. M. Paikeday, J. Chem. Phys. 65, 397 (1976).
- [Pai00] J. M. Paikeday, Int. J. Quantum Chem. 80, 989 (2000).
- [PFP⁺97] R. Panajotović, D. Filipović, V. Pejčev, M. Kurepa, and L. Vušković, J. Phys. B 30, 5877 (1997).
- [PK74] M. S. Pindzola und H. P. Kelly, Phys. Rev. A 9, 323 (1974).
- [PLB⁺18] M. Preising, W. Lorenzen, A. Becker, R. Redmer, M. D. Knudson und M. P. Desjarlais, Phys. Plasmas 25, 012706 (2018).
- [PS89] A. W. Pangantiwar und R. Srivastava, Phys. Rev. A 40, 2346 (1989).
- [Red97] R. Redmer, Phys. Rep. 35, 282 (1997).
- [Red99] R. Redmer, Phys. Rev. E 59, 1073 (1999).

- [Rei89] H. Reinholtz, *Zur Theorie der Thermokraft in Coulombsystemen* Dissertation, (Universität Rostock, 1989).
- [Rei05] H. Reinholtz, Ann. Phys. 30, 1 (2005).
- [RK29] C. Ramsauer und R. Kollath, Ann. Phys. 395, 536 (1929).
- [Rob72] A. G. Robertson, J. Phys. B 5, 648 (1972).
- [Ros14] S. Rosmej, *Einfluss der Elektron-Elektron Stöße auf die dielektrische Response in warmer dichter Materie* Masterarbeit, (Universität Rostock, 2014).
- [RR85] R. Redmer und G. Röpke, Physica A 130, 523 (1985).
- [RR89] G. Röpke und R. Redmer, Phys. Rev. A 39, 907 (1989).
- [RRMK90] R. Redmer, G. Röpke, F. Morales und K. Kilimann, Phys. Fluids B 2, 390 (1990).
- [RRN95] H. Reinholtz, R. Redmer und S. Nagel, Phys. Rev. E 52, 5368 (1995).
- [RRR⁺92] R. Redmer, H. Reinholtz, G. Röpke, R. Winter, F. Noll und F. Hensel, J. Phys. Condens. Matter 4, 1659 (1992).
- [RRRR15] H. Reinholtz, G. Röpke, S. Rosmej und R. Redmer, Phys. Rev. E 91, 043105 (2015).
- [RRT89] H. Reinholtz, R. Redmer und D. Tamme, Contrib. Plasma Phys. 29, 395 (1989).
- [RRZ87] R. Redmer, G. Röpke und R. Zimmermann, J. Phys. B 20, 4069 (1987).
- [RT75] M. E. Riley und D. G. Truhlar, J. Chem. Phys. 63, 2182 (1975).
- [RT84] D. F. Register und S. Trajmar, Phys. Rev. A 29, 1785 (1984).
- [RTS80] D. F. Register, S. Trajmar und S. K. Srivastava, Phys. Rev. A 21, 1134 (1980).
- [RVT84] D. F. Register, L. Vušković und S. Trajmar, Phys. Rev. A 29, 1785 (1984).
- [Rö87] G. Röpke, *Statistische Mechanik für das Nichtgleichgewicht* (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1987).
- [Rö88] G. Röpke, Phys. Rev. A 38, 3001 (1988).
- [Rö13] G. Röpke, *Nonequilibrium Statistical Physics* (Wiley, Weinheim, 2013).
- [SAR⁺88] F. Sigeneger, S. Arndt, R. Redmer, M. Luft, D. Tamme, W.-D. Kraeft, G. Röpke und T. Meyer, Physica A 152, 365 (1988).
- [Sch79] D. M. Schrader, Phys. Rev. A 20, 918 (1979).
- [SD73] J. M. Stellard und C. Jr. Davis, Phys. Rev. A 8, 368 (1973).
- [SD15] T. Sjostrom und J. Daligault, Phys. Rev. E 92, 063304 (2015).
- [SDG⁺03] N. S. Shilkin, S. V. Dudin, V. K. Gryaznov, V. B. Mintsev und V. E. Fortov, JETP 97, 922 (2003).

- [SF58] H. Schirmer und J. Friedrich, Z. Physik 151, 174;375 (1958).
- [SG82] S. Sur und A. S. Ghosh, Phys. Rev. A 25, 2519 (1982).
- [SGF02] A. A. Stygar, G. A. Gerdin und D. L. Fehl, Phys. Rev. E 66, 046417 (2002).
- [SGL⁺15] P. Sperling, E. J. Gamboa, H. J. Lee, H. K. Chung, E. Galtier, Y. Omarbakiyeva, H. Reinholtz, G. Röpke, U. Zastrau, J. Hastings, L. B. Fletcher und S. H. Glenzer, Phys. Rev. Lett. 115, 115001 (2015).
- [SH53] J. L. Spitzer und R. Härm, Phys. Rev. 89, 977 (1953).
- [SMWC12] F. Soubiran, S. Mazevert, C. Winisdoerffer und G. Chabrier, Phys. Rev. B 86, 115102 (2012).
- [Spi67] J. L. Spitzer, *Physics of Fully Ionized Gases* (Interscience, New York, 1967).
- [SRB⁺17] P. Sperling, S. Rosmej, L. B. Bredow, R. and Fletcher, E. Galtier, H. J. Gamboa, E. J. Lee, H. Reinholtz, G. Röpke, U. Zastrau und S. H. Glenzer, J. Phys. B 50, 134002 (2017).
- [SS66] T. Schneider und E. Stoll, Phys. kondens. Materie 5, 331 (1966).
- [STCT81] S. K. Srivastava, H. Tanaka, A. Chutjian und S. Trajmar, Phys. Rev. A 23, 2156 (1981).
- [TB22] J. Townsend und V. Bailey, Philos. Mag. 43, 593 (1922).
- [TFP⁺02] V. Y. Ternovoi, A. S. Filimonov, A. A. Pyalling, V. B. Mintsev und V. E. Fortov, AIP Conf. Proc. 620, 107 (2002).
- [Tho66] D. G. Thompson, Proc. Roy. Soc. London, Ser. A 294, 160 (1966).
- [Van75] R. Vanderpoorten, J. Phys. B 8, 926 (1975).
- [Was80] Y. Waseda, *The Structure of Non-Crystalline Materials, Liquids and Amorphous Solids* (McGraw-Hill, New York, 1980).
- [Wer63] M. S. Wertheim, Phys. Rev. Lett. 10, 321 (1963).
- [WF53] G. Wiedemann und R. Franz, Ann. Phys. 165, 497 (1853).
- [Wil79] J. F. Williams, J. Phys. B 12, 265 (1979).
- [YMS78] A. W. Yau, R. P. McEachran und A. D. Stauffer, J. Phys. B 11, 2907 (1978).
- [Zim61] J. M. Ziman, Philos. Mag. 6, 1013 (1961).
- [ZMR96] D. N. Zubarev, V. G. Morozov und G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes* (Akademie-Verlag, Berlin, 1996).
- [ZOR⁺16] Y. B. Zaporozhets, Y. A. Omarbakiyeva, H. Reinholtz, G. Röpke, V. B. Mintsev und V. K. Gryaznov, Contrib. Plasma Phys. 56, 467 (2016).

WISSENSCHAFTLICHER LEBENSLAUF

Persönliche Daten

Name	Sebastian Rosmej
Geburtsdatum	22.05.1991
Geburtsort	Güstrow
Familienstand	ledig
Wohnort	Rostock
Anschrift	Hundsburgallee 7, 18106 Rostock
E-Mail Adresse	sebastian.rosmej@gmail.com

Bildungsweg

- 1997 - 2004 5. Regionalschule mit Grundschule „Schule am Inselsee“, Güstrow
2004 - 2009 Ernst-Barlach-Gymnasium, Güstrow;
Abschluss: Allgemeine Hochschulreife
2009 - 2012 Bachelor-Studium Physik an der Universität Rostock;
Abschluss: Bachelor of Science
2012 - 2014 Master-Studium Physik an der Universität Rostock;
Abschluss: Master of Science
seit Okt. 2014 Promotionsstudium Theoretische Physik an der Universität Rostock;
angestrebter Abschluss: Dr. rer. nat.

Wissenschaftliche Tätigkeiten

- 2011 - 2012 studentische Hilfskraft am
Institut für Physik der Universität Rostock
2013 - 2014 wissenschaftliche Hilfskraft am
Institut für Physik und am Institut für Chemie der Universität Rostock
2014 - 2017 wissenschaftlicher Mitarbeiter
am Institut für Physik der Universität Rostock

Rostock, 22.02.2018

LISTE DER VERÖFFENTLICHUNGEN UND FACHVORTRÄGE AUF TAGUNGEN

Wissenschaftliche Veröffentlichungen

1. H. Reinholtz, G. Röpke, S. Rosmej und R. Redmer, *Conductivity of warm dense matter including electron-electron collisions*, Phys. Rev. E 91, 043105 (2015).
2. S. Rosmej, *Ion Contribution to Hydrogen Plasma Conductivity Beyond Born Approximation*, Contrib. Plasma Phys. 56, 327 (2016).
3. H. Reinholtz, N. Bedida, M. Difallah, C. Lin, G. Röpke, S. Rosmej und A. Sengebusch, *Transport and optical response of dense plasmas*, GSI Plasma Physics Annual Report 2017-2, 55 (2017).
4. S. Rosmej, H. Reinholtz und G. Röpke, *Contribution of electron-atom collisions to the plasma conductivity of noble gases*, Phys. Rev. E 95, 063208 (2017).
5. P. Sperling, S. Rosmej, R. Bredow, L. B. Fletcher, E. Galtier, E. J. Gamboa, H. J. Lee, H. Reinholtz, G. Röpke, U. Zastrau und S. H. Glenzer, *Electrical conductivity calculations in isochorically heated warm dense aluminum*, J. Phys. B 50, 134002 (2017).
6. E. Shalenov, S. Rosmej, H. Reinholtz, G. Röpke, K. N. Dzhumagulova und T. S. Ramanov, *Optical reflectivity based on the effective interaction potentials of xenon plasma*, Contrib. Plasma Phys. 57, 486 (2017).

Fachvorträge auf Tagungen

1. 3. März 2015, *Die Rolle der Elektron-Elektron-Stöße für Transporteigenschaften warmer dichter Materie*, DPG-Frühjahrstagung, Bochum (Deutschland).
2. 1. September 2015, *Transport coefficients of warm dense matter including ee-collisions*, 15th International Conference on Physics of Non-Ideal Plasmas, Almaty (Kasachstan).
3. 27. November 2015, *T matrix effects on the static conductivity in warm dense matter*, Scientific-Coordination Workshop on Non-Ideal Plasma Physics, Moskau (Russland).
4. 30. Januar 2017, *Transport properties of partially ionized noble gases*, 37th International Workshop on High Energy Density Physics with Intense Ion and Laser Beams, Hirschegg (Österreich).
5. 14. März 2017, *Electrical conductivity of partially ionized noble gases*, DPG-Frühjahrtagung, Bremen (Deutschland).

Posterpräsentationen auf Tagungen

1. 18. März 2014, *Einfluss der Elektron-Elektron-Stöße auf die Leitfähigkeit warmer dicker Materie*, DPG-Frühjahrstagung, Berlin (Deutschland).
2. 28. Januar 2015, *Conductivity of warm dense matter: influence of ee-collisions*, 35th International Workshop on High Energy Density Physics with Intense Ion and Laser Beams, Hirschegg (Österreich).
3. 3. Februar 2016, *Transport phenomena in warm dense matter including T matrix effects*, 36th International Workshop on High Energy Density Physics with Intense Ion and Laser Beams, Hirschegg (Österreich).
4. 3. März 2016, *Transport properties of dense plasma beyond Born approximation*, DPG-Frühjahrstagung, Hannover (Deutschland).
5. 1. August 2017, *Collision processes in partially ionized plasmas*, International Conference on Strongly Coupled Coulomb Systems, Kiel (Deutschland).

SELBSTSTÄNDIGKEITSERKLÄRUNG

Ich gebe folgende Erklärung ab:

1. Die Gelegenheit zum vorliegenden Promotionsvorhaben ist mir nicht kommerziell vermittelt worden. Insbesondere habe ich keine Organisation eingeschaltet, die gegen Entgelt Betreuerinnen/Betreuer für die Anfertigung von Dissertationen sucht oder die mir obliegenden Pflichten hinsichtlich der Prüfungsleistungen für mich ganz oder teilweise erledigt.
2. Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt und ohne fremde Hilfe verfasst habe. Dazu habe ich keine außer den von mir angegebenen Hilfsmitteln und Quellen verwendet und die den benutzten Werken inhaltlich und wörtlich entnommenen Stellen habe ich als solche kenntlich gemacht.

Rostock, 22.02.2018

.....

(Unterschrift)

DANKSAGUNG

An dieser Stelle möchte ich die Gelegenheit nutzen, mich bei allen Menschen zu bedanken, die mich beim Verfassen dieser Arbeit unterstützt haben.

Zunächst gilt mein außerordentlicher Dank meiner Betreuerin Frau Priv.-Doz. Dr. Heidi Reinholtz, die mir die Möglichkeit zum Promotionsstudium der Theoretischen Physik gab. Ich bedanke mich bei ihr sehr für ihre fachliche und fremdsprachliche Unterstützung beim Verfassen von Publikationen sowie für eine Vielzahl zielführender Diskussionen, die diese Arbeit stets vorangetrieben haben. Durch sie konnte ich auch mit internationalen Gruppen zusammenarbeiten. Erwähnen möchte ich dabei die Personen Y. Lavrinenco (Moskau), E. Shalenov (Almaty), Dr. V. Karakhtanov (Chernogolovka) und Prof. Dr. V. Mintsev (Chernogolovka).

Im gleichen Atemzug gilt mein großer Dank Herrn Prof. Dr. Gerd Röpke, der mich in den Fachgebieten zur Quantenfeldtheorie und zur Nichtgleichgewichtsstatistik unterrichtete. Auch er begeisterte mich sehr für das Thema dieser Arbeit und stand mir häufig mit gutem Rat und seinem riesigen Erfahrungsschatz zur Seite.

Weiterhin möchte ich Frau Dr. Andrea Sengebusch danken, die mir über die Jahre nicht nur eine Kollegin war sondern nun auch eine sehr gute Freundin geworden ist. Lange Spaziergänge mit ihr brachten mich oft dazu, den einen oder anderen noch so klar erscheinenden Gedanken zu überdenken und kritisch zu hinterfragen. Danken möchte ich auch ganz besonders meinem Kollegen auf der Arbeit, Kumpel in der Freizeit und Kompagnon bei Dienstreisen Herrn Chengliang Lin. Auf ihn kann ich mich seit Jahren verlassen.

Ein besonderer Dank geht an Herrn Priv.-Doz. Dr. Reinhard Mahnke, bei dem ich meine Bachelor-Arbeit anfertigen durfte. Durch seine langjährige Erfahrung als Hochschullehrer konnte ich stets beim Leiten von Übungsgruppen auf seine Hinweise und Ratschläge zählen. Gleichzeitig möchte ich auch allen anderen Kollegen der Arbeitsgruppe *Quantentheorie und Vielteilchensysteme* insbesondere Herrn Prof. Dr. Dieter Bauer und Frau Marina Hertzfeldt für die angenehme Atmosphäre danken. Die entspannenden und anregenden Kaffeerunden stärkten mich bei der Arbeit und halfen mir oft meine Gedanken zu sortieren. Nennen möchte ich auch die Helfer bei technischen Fragen Dr. Martins Brics, Volker Mosert und Adrian Hanusch.

Nicht zu vergessen danke ich von ganzem Herzen meiner Familie und meinen Freunden, die immer an mich geglaubt, mich unterstützt und inspiriert haben. Seite an Seite begleiteten sie mich durch gute aber auch durch steinige Zeiten und ermutigten mich immer, nach vorne zu schauen.

Herzliches Dankeschön.