

Diplomarbeit

Lösung der Feldgleichung einer durch Randbedingungen fixierten kritischen Grenzfläche

Florian König

Januar 2012



Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
2. Grundlagen	8
2.1. Beschreibung von Grenzflächen durch Ordnungsparameter	8
2.1.1. Stetige Grenzflächenprofile	8
2.1.2. Landau-Theorie der Phasenübergänge	9
2.2. Statistische Feldtheorie	12
2.2.1. Von klassischer statistischer Physik zur Feldtheorie	12
2.2.2. Erzeugende Funktionale und Feynman-Diagramme	15
3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen	22
3.1. Das Grenzflächenprofil der Mean-Field-Näherung	22
3.2. Kapillarwellentheorie und Faltungsnäherung	24
3.2.1. Kapillarwellen	24
3.2.2. Faltungsnäherung	27
3.3. Feldtheoretisches Profil	28
3.3.1. Die Feldtheorie des Systems mit Grenzfläche	29
3.3.2. Ein-Schleifen-Korrektur des mittleren Profils	31
3.3.3. Periodische transversale Randbedingungen	32
4. Die fixierte Grenzfläche	41
4.1. Randbedingungen	41
4.2. Die Feldgleichung	43
4.2.1. Die Feldgleichung in der Systemmitte	47
4.2.2. Die transversal entkoppelte Feldgleichung	47
4.2.3. Lösungen der homogenen entkoppelten Feldgleichung	49
4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung	52
4.3.1. Separation der Mean-Field-Korrektur	53
4.3.2. Regularisierung der Entwicklungskoeffizienten	58
4.3.3. Lösung der Feldgleichung	63
5. Zusammenfassung und Ausblick	69
5.1. Zusammenfassung und Vergleich mit der Graphenberechnung	69
5.2. Ausblick	70
A. Häufig verwendete Größen	71

Inhaltsverzeichnis

B. Massendimension	73
C. Berechnungen mittels Residuensatz	75
C.1. Integrale in den Koeffizienten $M_{\vec{n}}^{(i)}$	75
C.2. Integrale zur Entwicklung des Tangens Hyperbolicus	78
C.3. Integral in der Lösung der Feldgleichung	84
Literaturverzeichnis	87

1. Einleitung

Es gehört zu den alltäglichen Beobachtungen, dass sich manche Stoffe, wenn sie zusammengebracht werden, unter dem Einfluss der Schwerkraft entmischen und durch eine Grenzfläche klar trennbar voneinander abgrenzen. Der Begriff der Grenzfläche ist damit zuerst in den Bereich der für uns sichtbaren, makroskopischen Phänomene einzuordnen. Wie jedoch sieht eine Grenzfläche zwischen zwei Stoffen aus, wenn sie von Näherem betrachtet wird? Das Wort „Grenzfläche“ selbst suggeriert ja ein in den Raum eingebettetes zweidimensionales Gebilde, das eine klare Trennung der Stoffe erlaubt. Gibt es also eine Grenze, bei deren Überschreitung ein Sprung von dem einen in den anderen Stoff bzw. von einer in die andere Phase stattfindet? Oder ist das, was mit Grenzfläche bezeichnet wird, nicht eher ein diffuser Übergang?

Nach Aufkommen der Thermodynamik und der mathematischen Formulierung der Wärmebewegung der mikroskopischen Konstituenten makroskopischer Systeme ließen sich diese Fragen durch Modelle der theoretischen Physik beantworten. Die Beschreibung der Grenzfläche erfolgt dabei durch ein Feld, das z.B. die räumliche Verteilung der Teilchenkonzentrationen angibt. Sobald ein thermodynamisches Potential in Abhängigkeit dieses Feldes formuliert werden kann, lassen sich, durch Ausnutzung von Gleichgewichtsbedingungen an das Potential, Gesetzmäßigkeiten finden, denen die mittlere Verteilung der Komponenten in dem betrachteten Modell folgen muss. Mit anderen Worten ließen und lassen sich also aus der Thermodynamik Feldgleichungen herleiten, deren Lösungen Vorhersagen über die Übergänge zwischen verschiedenen Stoffen machen. So formulierte Diderik van der Waals am Ende des 19. Jahrhunderts die freie Energie eines zweikomponentigen Systems als Funktional der Stoffdichte [vdW79], aus dem sich mit Mitteln der Variationsrechnung eine Feldgleichung der Dichtefunktion herleiten lässt. In Reaktion auf eine Veröffentlichung von Josiah Gibbs (und Arbeiten von Gauß, Laplace und anderen) verstand er die Grenzfläche dabei ausdrücklich als kontinuierlichen Übergang zwischen zwei Phasen. In den 1930er Jahren konnte dann Lew Landau, von Symmetrieüberlegungen geleitet, eine allgemeine mathematische Formulierung von thermodynamischen Potentialen in Abhängigkeit sogenannter Ordnungsparameter finden, um kontinuierliche Phasenübergänge zu beschreiben [Lan36]. Als Ordnungsparameter – dem Namen nach ein Maß für die Ordnung, also Symmetrie einer Phase – lässt sich beispielsweise die Konzentrationsverteilung von Stoffen in einem System, dargestellt durch Felder, wählen. Landau fand damit einen weiteren, allgemeineren Zugang zu dem von van der Waals gefundenen Ausdruck für die freie Energie. Zusammengenommen stellen beide Ansätze die Grundlage für die Beschreibung von Grenzflächen in beliebigen mehrkomponentigen Systemen dar. In Abschnitt 2.1 werden diese beiden sich ergänzenden Zugänge zur Formulierung der freien Energie in Abhängigkeit eines Ordnungsparameters rekapituliert.

1. Einleitung

Die Anwendbarkeit von Landaus Theorie sollte aber auf einen kleinen Bereich des Parameterraums beschränkt sein, nämlich auf die Umgebung des von Thomas Andrews Mitte des 19. Jahrhunderts experimentell nachgewiesenen kritischen Punkts [And69]. Andrews beobachtete, dass flüssiges Kohlendioxid bei Erhitzung in einem geschlossenen Gefäß in einen Zustand überging, in dem keine Unterscheidung mehr zwischen Flüssigkeit und Gas möglich war und nannte den Punkt des Parameterraums, an dem dies geschah, den kritischen Punkt. An diesem Punkt kommt es zu einem Phänomen, das als kritische Opaleszenz bezeichnet wird, bei dem Fluktuationen der Dichte zu starker Lichtstreuung führen und so den Stoff undurchsichtig werden lassen. Aber gerade diese Fluktuationen, die offenbar in makroskopischen Größenordnungen auftreten, finden in Landaus Theorie keine Berücksichtigung. Stattdessen hält die in der Beschreibung der Elementarteilchenphysik zur Anwendung kommende Quantenfeldtheorie in ihrer Pfadintegralformulierung Methoden bereit, die sich zur Beschreibung thermodynamischer Systeme in der Nähe des kritischen Punkts eignen. Im Rahmen der statistischen Feldtheorie lässt sich dann zeigen, dass Landaus Theorie die erste Ordnung in einer Reihenentwicklung nach dem Parameter β^{-1} darstellt, die sich analog in der Quantenfeldtheorie als Entwicklung nach dem Planckschen Wirkungsquant \hbar ergibt. Landaus Theorie entspricht damit der klassischen Näherung der Quantenfeldtheorie. Diese bemerkenswerte formale Übereinstimmung von thermischen Fluktuationen und Quantenfluktuationen findet sich in der gesamten Methodik der statistischen Feldtheorie wieder.

Sobald die Theorie jedoch lediglich einen Bereich beschreibt, in dem Phasenunterschiede aufhören zu existieren, befindet sich natürlich auch die Grenzfläche zwischen diesen Phasen in der Auflösung. Die statistische Feldtheorie kann somit nur zur Beschreibung einer stark fluktuierenden, kritischen Grenzfläche unterhalb des kritischen Punktes dienen. Tatsächlich birgt dies jedoch einen weiteren Vorteil: Landaus Theorie, abstrakt durch Ordnungsparameter, also ohne Bezug auf bestimmte physikalische Größen, wie z.B. die Teilchendichte oder die Magnetisierung, formuliert, geht in der statistischen Feldtheorie in eine allgemeingültige Beschreibung von kategorisierbaren Systemen über. Denn mit Kenneth Wilsons Formulierung der Renormierungsgruppe [WK74] in den 1970er Jahren lassen sich thermodynamische Systeme in Universalitätsklassen einteilen; dabei sind alle Systeme einer Universalitätsklasse am kritischen Punkt durch dasselbe Modell beschreibbar. In der hier vorliegenden Arbeit wird die Grenzfläche in einem System der Ising-Universalitätsklasse beschrieben, dessen statistische Feldtheorie aus dem Ising-Modell hervorgeht und auch als ϕ^4 -Theorie bezeichnet wird. Einige grundlegende Methoden der Störungstheorie der ϕ^4 -Theorie werden in Abschnitt 2.2 beschrieben.

Das Ordnungsparameterfeld ϕ kann in einem System mit zwei Phasen so definiert werden, dass positive und negative Werte des Feldes je einer der Phasen zugeordnet werden können. Die klassische Feldgleichung der ϕ^4 -Theorie, d.h. die Feldgleichung der Landau-Theorie, stellt dann den Startpunkt der Grenzflächenbeschreibung dar, wenn sie unter Randbedingungen gelöst wird, die die Existenz einer Grenzfläche erzwingen. So ist es gleichbedeutend mit dem Auftreten einer Grenzfläche, wenn in einer Raumrichtung antisymmetrische Randbedingungen gefordert werden und damit ein Nulldurchgang des stetigen Feldes erzwungen wird. Die zugehörige Lösung ist auch als Kink-Lösung bekannt und wurde Mitte des 20. Jahrhunderts von Cahn und Hilliard [CH58]

in die Grenzflächenphysik eingeführt. Als Lösung der klassischen Feldgleichung ist das Cahn-Hilliard-Profil zugleich auch die erste Näherung an den Erwartungswert des Grenzflächenprofils. Korrekturen zu dieser Näherung lassen sich einerseits in der heuristisch motivierten Kapillarwellentheorie berechnen. Dort wird die Grenzfläche durch ein Drum-Head-Modell, also als schwingende Membran endlicher Ausdehnung modelliert, deren intrinsische Struktur durch das Cahn-Hilliard-Profil gegeben ist. Das Kapillarwellenmodell wird in Abschnitt 3.2 beschrieben. Andererseits lässt sich in der ϕ^4 -Theorie auch die Entwicklung nach dem Parameter β^{-1} als Sattelpunktsentwicklung um das Cahn-Hilliard-Profil fortsetzen. Die formale Entsprechung einer solchen Entwicklung in der Quantenfeldtheorie ist eine Theorie vor Instanton-Hintergrundfeldern, in denen nichttriviale Vakua beschrieben werden [Raj82]. Die Grundlagen der für die Grenzflächenbeschreibung relevanten Entwicklung werden in Abschnitt 3.3 beschrieben. Dabei wird ein System betrachtet, dessen Ausdehnung nur in Richtung des Übergangs von einer zur anderen Phase unbeschränkt ist und sonst auf die Seitenlänge L beschränkt ist. Auf den Systemrändern lassen sich nun unterschiedlich geartete Randbedingungen fordern. Das Grenzflächenprofil, das sich aus der Wahl von periodischen Randbedingungen ergibt, wird ebenfalls in diesem Abschnitt zitiert.

Wie sich dann zeigt, ist ein Problem bei der Wahl periodischer Randbedingungen, dass die Grenzflächenposition über die gesamte unbeschränkte Raumrichtung wandert. Diesem „interface wandering“ [Jas84] ist unter anderem durch die Wahl geeigneter Randbedingungen beizukommen. Die zentrale Problemstellung dieser Arbeit ist dementsprechend die Bestimmung des Grenzflächenprofils einer auf dem Rand fixierten Grenzfläche. Dazu muss die Feldtheorie für die besagten Randbedingungen formuliert werden und die effektive Feldgleichung für die Korrekturen der Landau-Theorie gelöst werden. Dies wird in Kapitel 4 für die Ein-Schleifen-Ordnung beschrieben, wobei mit dieser Arbeit nur ein erster Schritt in Richtung einer physikalisch verwertbaren Lösung des Problems getan werden kann.

2. Grundlagen

2.1. Beschreibung von Grenzflächen durch Ordnungsparameter

2.1.1. Stetige Grenzflächenprofile

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, ist unter bestimmten Bedingungen zu beobachten, dass in einem makroskopischen System, das aus unterschiedlichen Komponenten zusammengesetzt ist oder bei festen äußeren Parametern unterscheidbare Phasen bildet, diese Phasen räumlich getrennt voneinander auftreten. So wird beispielsweise bei Phasen verschiedener Dichte im Gravitationsfeld eine Trennung der Phasen in Richtung der Feldlinien erzwungen. Der Ansatz, der in der statistischen Feldtheorie und damit im Folgenden zur Beschreibung des als Grenzfläche bezeichneten Übergangs zwischen den Phasen verfolgt wird, fußt noch auf Ideen von van der Waals [vdW79], die er zur Beschreibung von Grenzflächen zwischen Phasen unterschiedlicher Dichte zu Papier brachte. Die freie Energie eines Systems, das eine Grenzfläche ausbildet, wird dabei unter der Voraussetzung berechnet, dass die Grenzfläche als ein diffuser Übergang entlang eines Dichtegradienten zwischen zwei nahezu homogenen Phasen (wie in Abb. 2.1) zu verstehen ist.

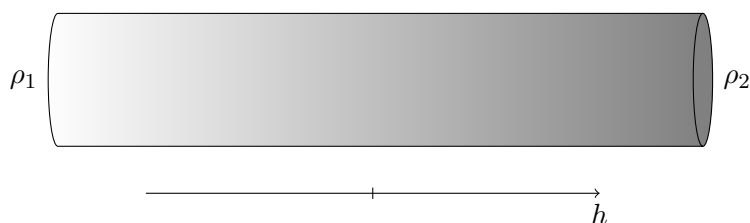


Abbildung 2.1.: Übergang zwischen zwei Phasen der Dichten ρ_1 , ρ_2 ; Abstand h von der „Grenzfläche“ in Richtung des Dichtegradienten

Um diesen Übergang quantitativ zu erfassen, wird eine Abhängigkeit der freien Energiedichte eines Systempunktes von der Dichte (oder Konzentration einer Komponente) $\rho(x)$ in diesem Punkt und der nächsten Umgebung angenommen. Letzteres bedeutet nichts anderes als die Einbeziehung der Ableitungen der Dichte in den Ausdruck für die freie Energiedichte. In van der Waals Modell ist der Übergang zwischen den Phasen eine Stapelung von Schichten konstanter Dichte und die Mitte der Grenzfläche mit der Mittleren dieser Schichten zu identifizieren. Durch Betrachtung der Arbeit, die verrichtet werden muss, um eine Masseneinheit senkrecht im Abstand h zur Grenzfläche zu verschieben, findet van der Waals einen Ausdruck für die freie Energie in der folgenden

2.1. Beschreibung von Grenzflächen durch Ordnungsparameter

Form:

$$F[\rho] = \int dh \rho(h) \left[f(\rho(h)) - \frac{1}{2}c \frac{d^2\rho}{dh^2}(h) \right]. \quad (2.1)$$

Dabei ist die Funktion $f(\rho)$ aus der Zustandsfunktion des Systems abzuleiten und trägt den mikroskopischen Eigenschaften des Systems, wie z.B. Kräften zwischen den Molekülen, Rechnung. c ist eine Konstante.

Die freie Energie F ist also ein Funktional der Dichte ρ des Systems und wird dementsprechend mit $F[\rho]$ notiert. Da das System im Gleichgewicht den Zustand niedrigster Energie einnimmt, ist zur Bestimmung des Grenzflächenprofils $\rho(h)$ die freie Energie $F[\rho]$ mit Mitteln der Variationsrechnung zu minimieren. Einen weiteren, allgemeineren Zugang zur Darstellung thermodynamischer Potentiale in Form von Funktionalen wie (2.1) bietet die Landau-Theorie.

2.1.2. Landau-Theorie der Phasenübergänge

Übergänge zwischen verschiedenen Phasen eines Systems lassen sich in diskontinuierliche und kontinuierliche Phasenübergänge unterteilen. Diskontinuierliche Phasenübergänge (oder nach Ehrenfestscher Kategorisierung: Phasenübergänge erster Ordnung) sind durch eine Diskontinuität der ersten Ableitungen der thermodynamischen Potentiale gekennzeichnet, insbesondere durch das Auftreten latenter Wärme. Ein Beispiel dafür ist der Übergang zwischen Gas und Flüssigkeit bei Wasser unterhalb der kritischen Temperatur T_c . Beim Erhitzen von Wasser bei Atmosphärendruck und $T = 100^\circ\text{C}$ steigt die Temperatur nicht weiter an, bis die Flüssigkeit in den gasförmigen Zustand übergegangen ist. Die zugeführte Wärme wird demnach zum Aufbrechen der Molekülbande genutzt. Ein weiteres Beispiel ist ein Ferromagnet bei $T < T_c$, ohne äußeres Magnetfeld H , bei dem sich Domänen unterschiedlicher Magnetisierung (z.B. $\pm M_0$) ausbilden, also eine Diskontinuität in der Magnetisierung besteht.

Kontinuierliche Phasenübergänge (nach Ehrenfest: Übergänge zweiter oder höherer Ordnung) weisen dagegen einen Sprung in den höheren Ableitungen auf. Im Falle von Wasser ist der Übergang von $T < T_c$ nach $T > T_c$ (oder umgekehrt) bei kritischem Druck p_c ein kontinuierlicher Phasenübergang. Ähnlich verhält es sich beim Ferromagneten, wobei die Bedingung $p = p_c$ durch $H = 0$ zu ersetzen ist. Die Phasen sind dabei durch unterschiedliche Symmetrien bestimmt – wobei die Symmetriegruppe der Phase höherer Ordnung eine Untergruppe der Symmetriegruppe der ungeordneteren Phase ist. Wasser in der überkritischen Phase (d.h. $T > T_c$) lässt keine Unterscheidung zwischen gasförmig und flüssig mehr zu. Es stellt sich also eine homogene und isotrope Phase ein, während bei $T < T_c$ die Koexistenz von gasförmigem und flüssigem Zustand möglich ist und bei Vorhandensein einer Grenzfläche die Translationsinvarianz gebrochen ist. Noch deutlicher werden die Symmetrieeigenschaften der Phasen bei Betrachtung eines Ferromagneten. Für Temperaturen $T > T_c$ verhält sich der Ferromagnet paramagnetisch, d.h. ohne äußeres Magnetfeld liegt keine Vorzugsrichtung der Magnetisierung vor: Das System ist rotationssymmetrisch, also invariant unter der Wirkung der Gruppe $O(N)$ auf den Vektor der Magnetisierung, wenn N die Dimension des Systems ist. Ist aber $T < T_c$, so liegt innerhalb der Domänen eine Vorzugsrichtung der Magnetisierung vor

2. Grundlagen

und das System besitzt nun noch eine reduzierte Rotationssymmetrie mit der Magnetisierungsrichtung als Symmetrieachse, also unter Wirkung der $O(N - 1)$. Diese Art des Verlusts an Symmetrie wird auch als spontane Symmetriebrechung bezeichnet. Denn im Unterschied zur expliziten Symmetriebrechung ist die Wahl der Magnetisierungsrichtung in den Domänen nicht erzwungen, sondern findet spontan statt (beispielsweise durch geringe Fluktuationen äußerer Felder).

Die Landau-Theorie der Phasenübergänge beschäftigt sich mit kontinuierlichen Phasenübergängen und wurde von L. D. Landau in [Lan36] auf Grundlage von Symmetrieüberlegungen formuliert (siehe auch [LL66]). Er argumentiert, dass die thermodynamischen Potentiale analytische Funktionen von sogenannten Ordnungsparametern sein sollten, die in der Nähe des kritischen Punkts klein sind und ein Maß für die Symmetrie des Systems darstellen. Diese Parameter müssen in der Phase höherer Symmetrie identisch Null sein und in der Phase gebrochener Symmetrie einen endlichen Wert annehmen. Im Bereich des kritischen Punktes mit $T \approx T_c$ sind die thermodynamischen Potentiale dann in den Ordnungsparametern entwickelbar. Dabei ist zu beachten, dass in der Entwicklung nur Kombinationen der Ordnungsparameter auftreten, die invariant unter Wirkung der Symmetriegruppe der Phase geringerer Symmetrie sind. In den oben genannten Beispielen dienen die Magnetisierung im Fall des Ferromagneten und die Differenz von Gas- und Flüssigkeitsdichte im Fall der Wassers als Ordnungsparameter.

Ist ϕ ein Ordnungsparameter, so liefert die Landau-Theorie also z.B. die freie Energie

$$F = F_0 + A\phi^2 + B\phi^4 \quad (2.2)$$

für ein System, das invariant unter Vorzeichenwechsel des Ordnungsparameters ist. Die Koeffizienten A und B müssen dabei so gewählt sein, dass der Ordnungsparameter die freie Energie minimiert. Ist z.B. ϕ die Magnetisierung eines Ferromagneten, so muss $\phi = 0$ für $T > T_c$ und $\phi \neq 0$ für $T < T_c$ gelten. Da ϕ reell ist, bedeutet das, dass $A \propto T - T_c$ ist und $B > 0$ gilt. Würden in der Entwicklung von F noch höhere Ordnungen von ϕ mit einbezogen, so müsste allgemein der Koeffizient der höchsten Ordnung positiv sein, um F nach unten zu beschränken.

In einem inhomogenen System unterhalb der kritischen Temperatur, in dem mehrere Phasen durch Grenzflächen getrennt vorliegen, wird der Ordnungsparameter durch ein Ordnungsparameterfeld $\phi(x)$ ersetzt. Die freie Energie des Systems ist dann als Funktional von $\phi(x)$ zu formulieren und wird im Allgemeinen auch von den Ableitungen des Ordnungsparameters abhängen. Für ein Zwei-Phasen-System ist die freie Energiedichte dann lokal von der Form (2.2) mit negativem Koeffizienten von ϕ^2 , so dass entsprechend den zwei Phasen zwei Werte von ϕ existieren, die F minimieren. Somit lässt sich zur Beschreibung eines Systems mit der Symmetrie $\phi \rightarrow -\phi$ in D Dimensionen eine freie Energie der Form

$$F = \int d^D x \left(\frac{1}{2} (\nabla \phi(x))^2 - \frac{m^2}{4} \phi(x)^2 + \frac{g}{4!} \phi(x)^4 \right) \quad (2.3)$$

ansetzen. Die Bezeichnung der Koeffizienten folgt hier den im Folgenden verwendeten Konventionen der Quantenfeldtheorie. So ist aus der Landau-Theorie heraus die Form

2.1. Beschreibung von Grenzflächen durch Ordnungsparameter

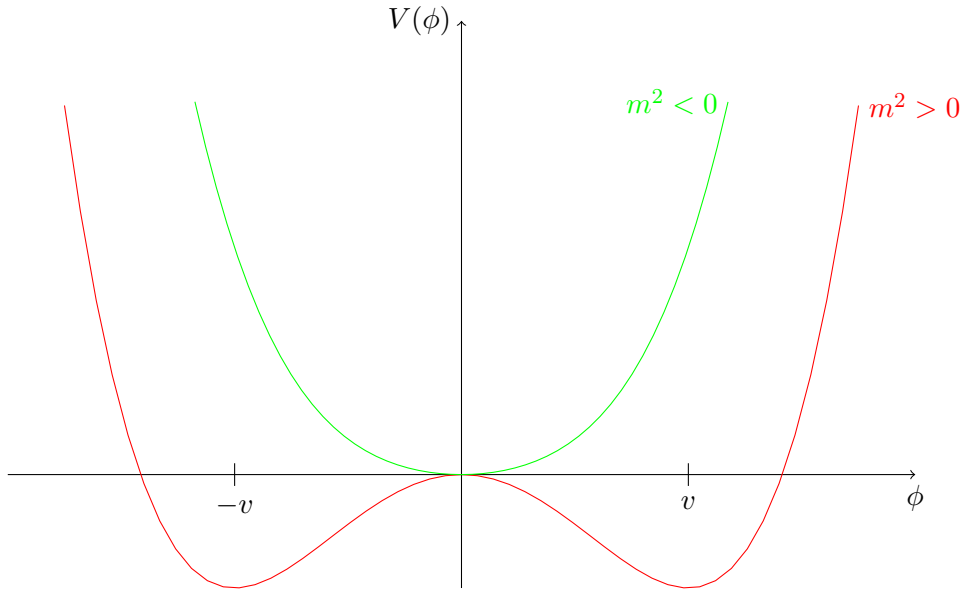


Abbildung 2.2.: Potential des Ordnungsparameters für verschiedene Vorzeichen des quadratischen Terms

der Gleichung (2.1) zumindest heuristisch erklärbar. Abb. 2.2 zeigt den Potentialterm

$$V(\phi) = -\frac{m^2}{4}\phi(x)^2 + \frac{g}{4!}\phi(x)^4$$

für verschiedene Vorzeichen von m^2 . Falls $m^2 > 0$ ist, wird (2.3) von einer von zwei stabilen homogenen Phasen mit räumlich konstantem Ordnungsparameterfeld

$$\phi = \pm v = \pm \sqrt{\frac{3m^2}{g}}$$

minimiert. Ist hingegen $m^2 < 0$, so ist $\phi = 0$ das einzige Minimum.

Die Tatsache, dass die freie Energie ihre Symmetriegruppe beim Vorzeichenwechsel von m^2 beibehält, während die physikalisch realisierten Zustände, d.h. die Felder niedrigster Energie, an Symmetrie verlieren, spiegelt das Auftreten der spontanen Symmetriebrechung in der mathematischen Formulierung wieder.

Die Anwendung der reinen Landau-Theorie zur Berechnung physikalischer Systeme ist problematisch, da ihr Gültigkeitsbereich auf kritische Systeme, d.h. Systeme in der Nähe des kritischen Punktes mit $T \approx T_c$, beschränkt ist. Dies ist ja die Voraussetzung für den Abbruch der Entwicklung (2.2) nach nur wenigen Ordnungen von ϕ . Gerade kritische Systeme zeigen allerdings extreme Fluktuationen, die von der Landau-Theorie nicht berücksichtigt werden, da, wie sich im Rahmen der statistischen Physik zeigt, diese ihrer Natur nach eine Mean-Field-Theorie ist. Durch die Interpretation von (2.3)

2. Grundlagen

als Hamiltonian einer Feldtheorie (Landau-Ginzburg-Theorie), lässt sich aber ein Formalismus analog zur Quantenfeldtheorie verwenden, der die Fluktuationen des Systems berücksichtigt.

2.2. Statistische Feldtheorie

Da es unmöglich ist, der ungeheuren Zahl von mikroskopischen Freiheitsgraden eines makroskopischen Systems Herr zu werden, bedient sich die Physik der Methoden der Statistik und beschreibt die zu untersuchenden Systeme durch Erwartungswerte charakteristischer Größen. In der statistischen Physik werden dabei meist diskrete Systeme betrachtet. Am kritischen Punkt eines Systems lässt sich jedoch eine Brücke zur Landau-Theorie und zur Pfadintegralformulierung der QFT schlagen.

2.2.1. Von klassischer statistischer Physik zur Feldtheorie

Es gibt verschiedene Möglichkeiten den Übergang von diskreten Systemen, wie dem Ising-Modell, zur kontinuierlichen Feldtheorie zu vollziehen. Diese werden z.B. in [NO11] aufgeführt. Im Allgemeinen ist dieser Übergang nicht durch eine algebraische Abbildung zu erreichen (eine Ausnahme ist die Hubbard-Stratanovich-Transformation des Ising-Modells). Vielmehr handelt es sich um eine Äquivalenz von Systemen derselben Universalitätsklasse, d.h. von Systemen, die dasselbe kritische Verhalten aufweisen.

Um im Folgenden den Zusammenhang zwischen Landau-Theorie und statistischer Physik zu verdeutlichen, ist es instruktiv, mit dem Ising-Modell zu beginnen und das diskrete System durch einen „Grobkörnungsprozess“ („coarse graining“) in ein kontinuierliches zu überführen. Die dadurch abgeleitete Feldtheorie – das Landau-Ginzburg-Modell – gehört damit zur Ising-Universalitätsklasse.

Dem Ising-Modell liegt die Annahme eines Gitters zugrunde, auf dessen Gitterpunkten Spins (bzw. magnetische Momente) S_i sitzen, die jeweils die Werte ± 1 annehmen können und in nächster Umgebung miteinander wechselwirken. Der Hamiltonian des Ising-Modells ist durch

$$H[S_i] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (2.4)$$

gegeben. Die Klammern \langle , \rangle zeigen an, dass nur über die nächsten Nachbarn eines Gitterpunktes i summiert wird; J ist die Kopplung zwischen den Spins und h_i ein äußeres Feld. Im kanonischen Ensemble ist

$$Z = \sum_{[S_i]} \exp(-\beta H[S_i]) \quad (2.5)$$

die Zustandssumme des Systems, mit $\beta^{-1} = kT$. $\sum_{[S_i]}$ notiert die Summe über alle Konfigurationen der Gitterspins. Für zwei- oder höherdimensionale Gitter weist das Ising Modell einen Phasenübergang auf und ist daher als einfaches Modell des Ferromagnetismus geeignet [Bel92].

In der Nähe des kritischen Punktes divergiert die Korrelationslänge ξ und langwellige kritische Fluktuationen (d.h. Korrelationen über Abstände makroskopischer Größenordnung) bestimmen das System. Daher ist zu hoffen, dass eine Beschreibung des Systems hier auf die Berücksichtigung der mikroskopischen Freiheitsgrade verzichten kann. Es reicht also aus, das System auf einer Längenskala zu betrachten, auf der das ursprüngliche System nahezu kontinuierlich erscheint. Das Zusammenfassen der mikroskopischen Freiheitsgrade in einem stetigen Ordnungsparameterfeld $\phi(x)$ lässt sich z.B. durch eine gewichtete Mittelung der Spins um einen Gitterpunkt herum erreichen. Wichtig ist hier die Grobkörnung auf Längenskalen $\delta \ll \xi$ zu beschränken. Würde dies nicht getan, entstünde ein triviales System ohne Wechselwirkung. In [Par88] wird dazu mit Hilfe der Gaußfunktion gewichtet:

$$\phi(x) \sim \sum_i \exp\left(-\frac{(x-x_i)^2}{2\delta^2}\right) S_i. \quad (2.6)$$

Der effektive Hamiltonian (nach Grobkörnung) ist dann durch das Ausintegrieren der jeweiligen Freiheitsgrade, die zu einer gegebenen Konfiguration des Feldes $\phi(x)$ beitragen, gegeben. Dazu muss das statistische Gewicht des kanonischen Ensembles nach der Mittelung zu den Gewichten des ursprünglichen Systems via

$$\exp(-\beta H_{\text{eff}}[\phi]) = \int d^D x \sum_{[S_i]} \delta^{(D)}(\phi(x) - f(x, \{S_i\})) \exp(-\beta H[S_i]) \quad (2.7)$$

in Beziehung gesetzt werden (s. [Bel92]). Mit $f(x, \{S_i\})$ ist die Abbildung gemeint, die die Spins $\{S_i\}$ in der Umgebung des Ortes x zu der neuen Feldgröße ϕ zusammenfasst (wie z.B. (2.6)). In der Literatur wird obige Transformation oft unter Auslassen des Faktors β auf der linken Seite angegeben, um zu verdeutlichen, dass H_{eff} die Temperaturabhängigkeit des ursprünglichen Systems enthält. Im Folgenden ist β deshalb als ein beliebiger Entwicklungsparameter zu verstehen, der nicht der physikalischen Temperatur $\beta^{-1} = kT$ entsprechen muss (gleichwohl er sich so definieren ließe) und im Laufe der Arbeit meist gleich Eins gesetzt wird.

Im Allgemeinen ist die Form des effektiven Hamiltonians kompliziert. Die grundlegenden Eigenschaften des Systems lassen sich aber durch die einfachste Form eines so gewonnenen Hamiltonians berechnen, solange dieser den Wechselwirkungen des Systems nahe dem kritischen Punkt und den Symmetrieeigenschaften Rechnung trägt. Die Definition des Ginzburg-Landau-Hamiltonians

$$H[\phi] = \int d^D x \left(\frac{1}{2} (\nabla\phi(x))^2 + \frac{\mu^2}{2} \phi(x)^2 + \frac{g}{4!} \phi(x)^4 \right) \quad (2.8)$$

ist so durch den beschriebenen Grobkörnungsprozess motiviert und bildet den Ausgangspunkt der im Folgenden beschriebenen statistischen Feldtheorie (SFT). Die Wechselwirkung der Gitterpunkte wird durch den ersten Term beschrieben, wie sich leicht durch Betrachtung der Ableitung auf dem Gitter erkennen lässt. Diese ist ein Differenzenquotient von Feldwerten auf benachbarten Gitterpunkten und die Quadrierung dieser Differenz

2. Grundlagen

generiert Wechselwirkungsterme $\propto \phi(x_i)\phi(x_j)$ wie im ursprünglichen Ising-Modell. Am zweiten und dritten Term sind die homogenen Phasen des Systems abzulesen: Nämlich die konstanten Felder, für die (2.8) minimiert wird. Mit Hilfe eines zusätzlichen Terms

$$\int d^D x J(x)\phi(x)$$

wird die Kopplung an ein äußeres Feld $J(x)$ beschrieben.

Der Übergang von diskreten Variablen auf Gitterpunkten zu einem kontinuierlichen Feld hat zur Folge, dass die Zustandssumme in ein Funktionalintegral bzw. Pfadintegral übergeht, in dem über alle Feldkonfigurationen integriert wird. Das Feld ϕ in (2.8) ist reellwertig, so dass die Summe über alle Konfigurationen der Gitterspins formal übergeht in ein Produkt aus Integralen über den Wertebereich des Feldes bei verschwindendem Gitterabstand a (bei konstant gehaltener Systemgröße):

$$\sum_{[S_i]} = \prod_i \sum_{S_i=\pm 1} \rightarrow \lim_{a \rightarrow 0} \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} d\phi(x_i) =: \int \mathcal{D}\phi.$$

Demnach wird die Zustandssumme zu

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp(-\beta H[\phi]), \quad (2.9)$$

wobei bestimmte, systemspezifische Randbedingungen implizit gegeben sind. Die Existenz dieses Integrationsmaßes ist im Allgemeinen nicht streng beweisbar, weshalb das Pfadintegral symbolisch zu verstehen ist und im Zweifelsfall wieder auf ein diskretes System zurückgeführt werden kann.

Die Form von (2.8) stimmt mit der von (2.3) überein und im Rahmen einer Mean-Field-Näherung (MFA: „mean-field-approximation“) wird jetzt der Zusammenhang zwischen der freien Energie der Landau-Theorie und dem Hamiltonian der statistischen Feldtheorie ersichtlich. Im kanonischen Ensemble lautet die freie Energie

$$F = -\beta^{-1} \ln(Z). \quad (2.10)$$

Durch die MFA werden Fluktuationen um die klassische Feldkonfiguration vernachlässigt, d.h. in die Zustandssumme geht nur die Feldkonfiguration ein, für die das statistische Gewicht maximal und damit der Hamiltonian minimal ist. Dementsprechend wird nicht über alle möglichen Feldkonfigurationen integriert, sondern

$$Z_{\text{MFA}} = \exp(-\beta H[\phi])$$

gesetzt. Mit (2.10) folgt dann $F[\phi] = H[\phi]$. Die freie Energie der Landau-Theorie lässt sich also als Mean-Field-Näherung der statistischen Feldtheorie rekonstruieren.

2.2.2. Erzeugende Funktionale und Feynman-Diagramme

Die Beziehungen (2.9) und (2.8) sind die Grundlagen einer euklidischen, skalaren Quantenfeldtheorie (QFT) mit ϕ^4 -Wechselwirkung, auch als ϕ^4 -Theorie bezeichnet. Zu den Methoden der QFT gehören die Störungsentwicklung in Potenzen der Kopplungskonstanten g und die Darstellung der zugehörigen Terme durch Feynman-Diagramme, sowie die Renormierung divergenter Anteile. Da die Theorie in dieser Arbeit nicht renormiert wird, wird auf eine Darstellung des letzten Punktes verzichtet. Die im Folgenden zusammengefassten Grundlagen finden sich in allen Standardwerken der QFT/SFT (z.B. [Bel92], [AMM05], [ZJ02]).

Von größter Wichtigkeit ist die Berechnung von Erwartungswerten und Korrelationsfunktionen aus der Zustandssumme. Der Erwartungswert von n Feldern ist durch

$$\langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \exp(-\beta H[\phi]) \quad (2.11)$$

gegeben. Korrelationsfunktionen sind nichts anderes als eben solche Erwartungswerte von n Feldern. Im Rahmen der QFT wird auch von n -Punkt-Greensfunktionen gesprochen. Diese unterscheiden sich nur durch β -Faktoren von den Erwartungswerten/Korrelationsfunktionen; wird $\beta = 1$ gesetzt fällt der Unterschied weg. Die Begriffe Korrelationsfunktionen, Erwartungswerte und Greensfunktionen sind deswegen im Folgenden austauschbar.

Um die Berechnung von Erwartungswerten zu vereinfachen, führt man ein äußeres Hilfsfeld $J(x)$ ein, dem in der physikalischen Situation des Systems kein Feld entsprechen muss. In den Ergebnissen der Rechnungen wird einfach $J = 0$ gesetzt. Dann ist

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta H[\phi] + \beta \int d^D x J(x) \phi(x) \right\} \quad (2.12)$$

das erzeugende Funktional der Korrelationsfunktionen (oder auch erzeugendes Funktional der Momente), da diese sich nun durch Funktionalableitung nach J gewinnen lassen:

$$\langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle = \beta^{-n} \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^n Z}{\delta J(x_1) \cdots \delta J(x_n)} \Big|_{J=0}. \quad (2.13)$$

Funktionalableitungen

Ist $F[\phi]$ ein Funktional, so ist die Funktionalableitung ähnlich der Richtungsableitung eines Feldes definiert. Die Ableitung von $F[\phi]$ „in Richtung“ einer Funktion $h(x)$ ist definiert als

$$\frac{\delta F}{\delta \phi}[h] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F[\phi + \varepsilon h] - F[\phi]}{\varepsilon}. \quad (2.14)$$

Desweiteren gilt

$$\frac{\delta F}{\delta \phi}[h] = \int dx \frac{\delta F}{\delta \phi(x)} h(x), \quad (2.15)$$

so dass sich für $h(x) = \delta(x - x_0)$ direkt die Regel zur Berechnung von $\frac{\delta F}{\delta \phi(x_0)}$ ergibt.

2. Grundlagen

Störungstheorie

Die Zustandssumme (2.12) ist im Allgemeinen nicht exakt berechenbar, weshalb Z und daraus abgeleitete Größen in Störungstheorie berechnet werden. Die Hamiltoniandichte \mathcal{H} (mit dieser gilt $H = \int d^D x \mathcal{H}$) wird dazu aufgeteilt: Einerseits in einen „freien“ Anteil \mathcal{H}_0 , der aus den Termen besteht, die quadratisch in den Feldern sind – also dem kinetischen Term $\propto (\nabla\phi(x))^2$ und dem Massenterm $\propto \phi(x)^2$ – und in der QFT ein Feld ohne Wechselwirkungen beschreiben würde, und andererseits den Wechselwirkungsterm $\mathcal{V}(\phi(x))$. Mit Hilfe einer äußeren Quelle lässt sich dann das erzeugende Funktional umschreiben in

$$Z[J] = \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{V} \left(\beta^{-1} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \cdot \underbrace{\int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta H_0[\phi] + \beta \int d^D x J(x)\phi(x) \right\}}_{Z_0[J]}. \quad (2.16)$$

Das erzeugende Funktional der freien Theorie mit $\mathcal{V} = 0$ ist ein Gaußsches Integral und damit exakt berechenbar. Insbesondere lässt sich

$$Z_0[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^D x \left(\frac{1}{2} (\nabla\phi(x))^2 + \frac{\mu^2}{2} \phi(x)^2 - J(x)\phi(x) \right) \right\} \quad (2.17)$$

in eine leichter handhabbare Form bringen. Definiert man die Fouriertransformation der Felder durch

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^D} \int d^D k \tilde{\phi}(k) e^{-ikx} \quad (2.18)$$

$$\tilde{\phi}(k) = \int d^D x \phi(x) e^{ikx}, \quad (2.19)$$

kann der Exponent in (2.17), nach Ausnutzen der durch die Integration der Exponentialfunktionen entstandenen Delta-Distribution, umgeschrieben werden in

$$\frac{-\beta}{(2\pi)^D} \int d^D k \left[\frac{1}{2} \tilde{\phi}(-k) (k^2 + \mu^2) \tilde{\phi}(k) - \tilde{J}(-k) \tilde{\phi}(k) \right].$$

Unter der Annahme, dass bei Übergang in den Fourierraum keine Komplikationen bei Ausführung des Pfadintegrals mit dem Maß $\mathcal{D}\tilde{\phi}$ statt $\mathcal{D}\phi$ entstehen, lässt sich dessen Translationsinvarianz durch eine Transformation des Feldes ausnutzen:

$$\tilde{\phi}(k) \longrightarrow \tilde{\phi}(k) + (k^2 + \mu^2)^{-1} \tilde{J}(k). \quad (2.20)$$

Damit ist

$$Z_0[J] = \int \mathcal{D}\tilde{\phi} \exp \left\{ -\frac{\beta}{(2\pi)^D} \int d^D k \left[\frac{1}{2} \tilde{\phi}(-k) (k^2 + \mu^2) \tilde{\phi}(k) - \frac{1}{2} \tilde{J}(-k) (k^2 + \mu^2)^{-1} \tilde{J}(k) \right] \right\} \quad (2.21)$$

und nach der Fourier-Rücktransformation

$$Z_0[J] = Z_0[0] \exp \left\{ \frac{\beta}{2} \int d^D x d^D y J(x) \left(\frac{1}{(2\pi)^D} \int d^D k \frac{e^{-ik(x-y)}}{k^2 + \mu^2} \right) J(y) \right\}. \quad (2.22)$$

An dieser Form ist der Propagator, d.h. die 2-Punkt-Greensfunktion der Skalarfeldtheorie einfach ablesbar:

$$G_0(x_1, x_2) = \beta \langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle_0 = \frac{1}{(2\pi)^D} \int d^D k \frac{e^{-ik(x_1-x_2)}}{k^2 + \mu^2}. \quad (2.23)$$

$\langle \dots \rangle_0$ kennzeichnet hier die Erwartungswerte in der freien Feldtheorie. Der Faktor β vor dem Erwartungswert stammt daher, dass die klassische Feldgleichung des freien Feldes, deren Greensfunktion $G_0(x_1, x_2)$ ist, durch $\delta H / \delta \phi = 0$ gegeben ist und damit nicht von β abhängt. Es sei noch erwähnt, dass sich für große Abstände $|x_1 - x_2| \rightarrow \infty$ am Propagator der formale Zusammenhang zwischen der Masse μ einer euklidischen QFT und der Korrelationslänge ξ ablesen lässt [WK74]. Letztere ist dadurch definiert, dass die Korrelationsfunktion für große Abstände $|x_1 - x_2|$ wie $\exp(-|x_1 - x_2|/\xi)$ abfällt; also gilt mit (2.23):

$$\mu = \xi^{-1}.$$

Die störungstheoretische Berechnung von Erwartungswerten greift nun bei der Reihendarstellung der Exponentialfunktion vor dem Pfadintegral in (2.16) an. In der ϕ^4 -Theorie ist

$$\mathcal{V} \left(\frac{\delta}{\delta J(x)} \right) = \frac{g}{4!} \left(\frac{\delta}{\delta J(x)} \right)^4$$

und damit

$$Z[J] = \sum_k \frac{(-\beta \frac{g}{4!})^k}{k!} \int d^D x_1 \dots d^D x_k \beta^{-4k} \frac{\delta^{4k}}{\delta J(x_1)^4 \dots \delta J(x_k)^4} Z_0[J]. \quad (2.24)$$

Dies ist eine Entwicklung in Ordnungen der Kopplungskonstanten g . An der Form von (2.24) ist abzulesen, dass Erwartungswerte der Feldtheorie mit Wechselwirkung – Ordnung für Ordnung – durch Erwartungswerte der freien Feldtheorie ausgedrückt werden können.

Die Gleichungen (2.13) und (2.24) liefern dann eine Entwicklung der Erwartungswerte in Ordnungen der Kopplungskonstanten:

$$\begin{aligned} \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta \frac{g}{4!})^k}{k!} \\ &\cdot \int d^D y_1 \dots d^D y_k \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \phi(y_1)^4 \dots \phi(y_k)^4 \rangle_0 \\ &\cdot \left[1 + \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-\beta \frac{g}{4!})^l}{l!} \int d^D z_1 \dots d^D z_l \langle \phi(z_1)^4 \dots \phi(z_l)^4 \rangle_0 \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

2. Grundlagen

Erwartungswerte $\langle \dots \rangle_0$ einer geraden Anzahl von Feldern lassen sich mit Hilfe des Wick-Theorems in Produkte aus 2-Punkt-Greensfunktionen aller möglichen Kombinationen von Feldern zerlegen. Das lässt sich anhand der Darstellung (2.22) der Zustandssumme mit (2.23) zeigen. Damit ist z.B.

$$\begin{aligned} \langle \phi(x_1)\phi(x_2)\phi(x_3)\phi(x_4) \rangle_0 &= \langle \phi(x_1)\phi(x_2) \rangle_0 \langle \phi(x_3)\phi(x_4) \rangle_0 \\ &+ \langle \phi(x_1)\phi(x_3) \rangle_0 \langle \phi(x_2)\phi(x_4) \rangle_0 \\ &+ \langle \phi(x_1)\phi(x_4) \rangle_0 \langle \phi(x_2)\phi(x_3) \rangle_0. \end{aligned}$$

Die einzelnen Kombinationen der Felder in 2-Punkt-Greensfunktionen bezeichnet man als Kontraktionen.

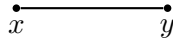


Abbildung 2.3.: Propagator

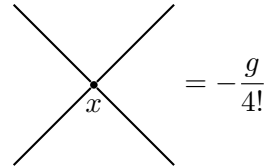


Abbildung 2.4.: Vertex der ϕ^4 -Theorie

Nach der Zerlegung beliebiger Erwartungswerte der freien Theorie in 2-Punkt-Greensfunktionen, lassen sich diese grafisch in Feynmandiagrammen darstellen. Der Propagator $G_0(y, x)$ ist in Abb. 2.3 als einfache Linie zwischen den Punkten x und y dargestellt. Der Erwartungswert mehrerer Felder am selben Ort, wie z.B. $\langle \phi(y)\phi(z)^4\phi(x) \rangle_0$, generiert dann Diagramme, in denen Propagatoren durch Vertizes verknüpft werden. Eine Möglichkeit der Kontraktion der Felder im obigen Beispiel ist $G_0(y, z)G_0(z, z)G_0(z, x)$, was dem Diagramm in Abb. 2.5 entspricht. Im Allgemeinen sind die Feynmandiagramme der ϕ^4 -Theorie aus Linien/Propagatoren und vierarmigen Vertizes (Abb. 2.4) zu konstruieren. Letztere entstammen der Entwicklung (2.24) und entsprechen jeweils einem Faktor $-g/4!$ und einem Integral über die dem Vertex zugeordnete Koordinate. In (2.24) entsprechen im Allgemeinen mehrere Terme demselben Diagramm und damit demselben algebraischen Ausdruck. Der aus dieser Vielfachheit resultierende Faktor und die numerischen Vorfaktoren der Entwicklung ergeben den sogenannten Symmetriefaktor, der an der Symmetrie des Diagramms ablesbar ist. So ist, um zum Beispiel zurückzukehren, in Abb. 2.5 der Symmetriefaktor 2, da sich die Schleife an der vertikalen Achse durch den Punkt z spiegeln lässt, ohne dass sich das Diagramm ändert. Das Integral zu diesem Diagramm lautet dann

$$-\frac{g}{2} \int d^D z G_0(y, z)G_0(z, z)G_0(z, x).$$

Nach diesen Erkenntnissen lässt sich (2.25) als eine Reihe von Feynmandiagrammen auswerten, deren Anzahl an Vertizes jeweils der Ordnung der Störungstheorie entspricht. Die Entwicklung des Nenners in (2.25) führt dabei zum Wegfall bestimmter Diagramme – sogenannter Vakuumdiagramme – die von den äußeren Feldern unabhängig, also in sich geschlossen sind. Damit kann die störungstheoretische Entwicklung in grafischer Form

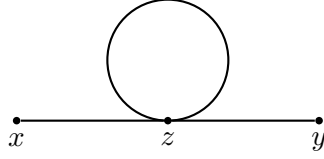


Abbildung 2.5.: Beispiel eines Ein-Schleifen-Diagramms

durch Zeichnen der verschiedenen Diagramme ausgeführt werden: Zur V -ten Ordnung der Berechnung einer E -Punkt-Greensfunktion müssen die Diagramme mit V Vertizes und E externen Armen ausgewertet werden. Dazu wird für jede Linie der zugehörige Propagator und für jeden Vertex die negative Kopplungskonstante niedergeschrieben, dann über die Koordinaten der Vertizes integriert und zuletzt durch den Symmetriefaktor geteilt.

Erzeugendes Funktional der Kumulanten

Der Beziehung (2.10) der freien Energie und der Zustandssumme des kanonischen Ensembles entspricht in der Feldtheorie die folgende Beziehung zwischen dem erzeugenden Funktional der Momente $Z[J]$ und dem erzeugenden Funktional der Kumulanten $W[J]$:

$$W[J] = \beta^{-1} \ln(Z[J]). \quad (2.26)$$

Die mit

$$\langle \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \rangle_c = \beta^{-n} \frac{\delta^n W}{\delta J(x_1) \cdots \delta J(x_n)} \Big|_{J=0} \quad (2.27)$$

erzeugten Erwartungswerte werden auch als zusammenhängende Korrelationsfunktionen bezeichnet. Ihnen entsprechen zusammenhängende Diagramme in denen alle äußeren Arme miteinander verbunden sind. Alle Diagramme der Entwicklung (2.25) lassen sich als Produkte von zusammenhängenden Diagrammen darstellen, so dass die Berechnung der zusammenhängenden Diagramme ausreicht um die Störungsentwicklung durchzuführen.

Effektive Wirkung

Per Legendre-Transformation von $W[J]$ wird ein weiteres erzeugendes Funktional definiert, dem in der statistischen Mechanik die Gibbsche Energie bzw. freie Enthalpie entspricht:

$$\Gamma[\phi_c] = \sup_J \left\{ \int d^D x \phi_c(x) J(x) - W[J] \right\}. \quad (2.28)$$

Hier ist

$$\phi_c(x) = \langle \phi(x) \rangle_J = \beta^{-1} \frac{\delta W}{\delta J(x)} \quad (2.29)$$

der Erwartungswert des Feldes bei vorhandener äußerer Quelle J . ϕ_c wird im Rahmen der QFT auch als klassisches Feld bezeichnet.

Die Funktionalableitungen dieses Funktionals erlauben eine weitere Vereinfachung der Feynmandiagramme, denn sie liefern die sogenannten eigentlichen Vertizes. Bei 1-Teilchen-reduziblen Diagrammen handelt es sich um Diagramme die durch das Trennen

2. Grundlagen

einer Linie in zwei bereits bekannte Feynmandiagramme niedrigerer Ordnung zerfallen. Im Fourierraum entspricht ein solches Diagramm einem Ausdruck der Form (Integral zu Unterdiagramm 1) $\times (G_0(k)) \times$ (Integral zu Unterdiagramm 2). Ein Diagramm das hingegen nicht durch Trennung einer Linie geteilt werden kann, nennt man 1-Teilchen-irreduzibel (1TI, oder engl. 1PI). Nimmt man ein solches 1-Teilchen-irreduzibles Diagramm und entfernt die äußeren Arme, d.h. die ein- und auslaufenden Propagatoren, so entsteht ein Diagramm, welches als eigentlicher Vertex („proper vertex“) bezeichnet wird. Es genügt nun die eigentlichen Vertizes zu berechnen, da sich die Diagramme aus der Entwicklung von (2.25) im Fourierraum aus Produkten von eigentlichen Vertizes und Propagatoren zusammensetzen.

Γ wird desweiteren auch als effektive Wirkung bezeichnet, da sich durch Variation eine Differentialgleichung ableiten lässt, deren Lösung der Erwartungswert $\langle \phi(x) \rangle$ ist. Das ist hier von besonderem Interesse, da das Grenzflächenprofil durch einen Felderwartungswert $\langle \phi(x) \rangle$ angegeben wird. Mit (2.28) ist

$$\frac{\delta \Gamma}{\delta \phi_c(x)} = J(x). \quad (2.30)$$

Da $\phi_c(x)$ für $J = 0$ in $\langle \phi(x) \rangle$ übergeht, ist durch

$$\left. \frac{\delta \Gamma}{\delta \phi_c(x)} \right|_{\phi_c = \langle \phi \rangle} = 0 \quad (2.31)$$

eine Differentialgleichung gegeben, deren Lösung $\langle \phi(x) \rangle$ ist. Γ ist also für den Erwartungswert des Feldes stationär. Die effektive Wirkung kann damit als Verallgemeinerung der Wirkung der klassischen analytischen Mechanik verstanden werden.

Schleifenentwicklung

Statt die Entwicklung (2.25) nach Ordnungen der Kopplungskonstanten g zu verwenden, kann das erzeugende Funktional auch formal nach β^{-1} entwickelt werden. Üblicherweise wird dazu von

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta H[\phi] + \int d^D x J(x) \phi(x) \right\} \quad (2.32)$$

ausgegangen, was durch Skalierung der Quelle $J \rightarrow \beta^{-1} J$ aus (2.12) hervorgeht. Das erzeugende Funktional, wie es sich aus den Umformungen der freien Theorie (2.22) und der Form (2.16) der wechselwirkenden Theorie ergibt, ermöglicht das Zuweisen von β^{-1} Faktoren zu den Propagatoren und Vertizes eines Diagramms, da nun

$$\begin{aligned} Z[J] = Z_0[0] \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{V} \left(\frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \\ \cdot \exp \left\{ \frac{1}{2} \int d^D x_1 d^D x_2 J(x_1) \beta^{-1} G_0(x_1, x_2) J(x_2) \right\} \end{aligned} \quad (2.33)$$

gilt. Ein Diagramm mit V Vertizes und I internen Linien bringt somit einen Faktor β^{V-I} mit sich. Die Integrationen über die Koordinaten der Vertizes gehen im Fourierraum über in Delta-Distributionen, die (in der Sprache der QFT) der Impulserhaltung

am jeweiligen Vertex Rechnung tragen, und Integrationen über die Impulse der internen Propagatoren. Eine der Delta-Distributionen dient aber der Gesamtimpulserhaltung und führt nicht zum Wegfall eines Integrals, so dass insgesamt noch $L = I - V + 1$ Integrationen ausgeführt werden müssen. Der Größe L entspricht dabei die Anzahl der Schleifen in einem Diagramm. Ein Diagramm mit dem Faktor $\beta^{V-I} = \beta^{1-L}$ enthält also L Schleifen und eine Entwicklung in Ordnungen von β^{-1} ist damit eine Entwicklung in der Anzahl der Schleifen [AMM05]. Die Entsprechung von β^{-1} in der QFT ist \hbar und das Verschwinden dieser Entwicklungsparameter liefert die klassische Theorie/Landau-Theorie bzw. die Baumgraphen-Näherung, in der nur Feynmandiagramme ohne Schleifen ausgewertet werden.

Wie bereits erwähnt, finden sich die hier erwähnten Begriffe sowohl in der QFT, als auch in der SFT wieder; wobei letztere formal mit einer Wick-rotierten und damit euklidischen Formulierung der QFT identisch ist. Einen Überblick über die formalen Überschneidungen von QFT und SFT gibt Tabelle 2.1.

Tabelle 2.1.: Begriffe der QFT und SFT ([Köp08],[Dre10])

Euklidische QFT		SFT	
Skalarfeld	$\phi(x)$	Ordnungsparameterfeld	$\phi(x)$
Vakuumerwartungswert	$\langle \phi \rangle$	Mittleres Ordnungspare- terfeld	$\langle \phi \rangle$
Euklidische Wirkung	$S_E[\phi]$	Hamiltonian	$H[\phi]$
Euklidische Lagrangedichte	$\mathcal{L}_E(\phi)$	Hamiltoniandichte	$\mathcal{H}(\phi)$
Erzeugendes Funktional der n-Punkt-Greensfunktionen	$Z_E[J]$	Zustandssumme, Erzeugendes Funktional der Momente	$Z[J]$
Erzeugendes Funktional der zusammenhängenden Feynmandiagramme	$W_E[J]$	Freie Energie, Erzeugendes Funktional der Kumulanten	$W[J]$
Effektive Wirkung, Erzeugen- des Funktional der eigentli- chen Vertizes	$\Gamma_E[\phi_c]$	Freie Enthalpie	$\Gamma[\phi_c]$
Plancksches Wirkungsquant	\hbar	Temperatur	β^{-1}
Masse	μ bzw. m	Inverse Korrelationslänge	ξ^{-1}
Klassischer Limes	$\hbar \rightarrow 0$	Landau Theorie, Mean-Field-Näherung	$F = H$
Quantenfluktuationen		Thermische Fluktuationen	

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

Nachdem das Handwerkszeug der SFT zur Verfügung steht, ist die Beschreibung von Grenzflächen mit Hilfe dieses Formalismus möglich. Die im folgenden vorgestellten Ansätze bauen dabei alle auf der Beschreibung einer Grenzfläche in der Landau-Theorie auf.

3.1. Das Grenzflächenprofil der Mean-Field-Näherung

Ausgangspunkt für die Beschreibung des Grenzflächenprofils ist der Ginzburg-Landau-Hamiltonian (2.8) mit der Ersetzung $\mu^2/2 \rightarrow -m_0^2/4$ und $m_0^2 > 0$:

$$H[\phi] = \int d^D x \left(\frac{1}{2} (\nabla\phi(x))^2 - \frac{m_0^2}{4} \phi(x)^2 + \frac{g_0}{4!} \phi(x)^4 \right). \quad (3.1)$$

Der Index „0“ an den Parametern des Hamiltonians verdeutlicht, dass es sich um „nackte“ Parameter handelt, die nur in der klassischen Näherung mit den physikalischen Parametern übereinstimmen und im Allgemeinen der Renormierung bedürfen. Wie in Abschnitt 2.1.2 bereits angesprochen, befinden sich konstante Felder in dem durch (3.1) beschriebenen System mit $m_0^2 > 0$ in einem Potential mit zwei separierten Minima $\pm\sqrt{3m_0^2/g_0}$ (s. Abb. 2.2), so dass dementsprechend zwei verschiedene Phasen auftreten können.

In der Mean-Field-Näherung sind der Hamiltonian und die freie Energie (2.3) identisch (s. Abschnitt 2.2.1) und die klassische Feldgleichung, also (2.30) mit der effektiven Wirkung Γ in Baumgraphen-Näherung,

$$\frac{\delta H}{\delta\phi} = 0 \quad (3.2)$$

entspricht einer verallgemeinerten Gleichgewichtsbedingung an die freie Energie. Gleichung (3.2) ist mit (2.14) durch

$$-\Delta\phi(x) - \frac{m_0^2}{2}\phi + \frac{g_0}{3!}\phi^3 = 0 \quad (3.3)$$

gegeben.

Im Folgenden werden die Koordinaten des D -dimensionalen Raumes mit (\vec{x}, z) oder (x_1, \dots, x_{D-1}, z) bezeichnet. Die z -Achse ist unendlich ausgedehnt, $z \in \mathbb{R}$, während die

3.1. Das Grenzflächenprofil der Mean-Field-Näherung

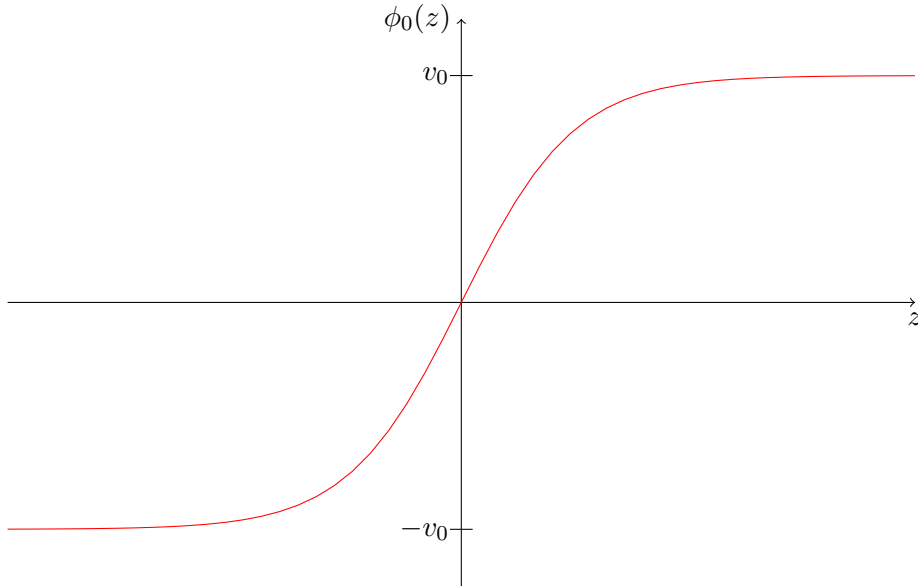


Abbildung 3.1.: Cahn-Hilliard-Profil (3.6)

restlichen Achsen auf die Länge L beschränkt sind, $\vec{x} \in [0, L]^{D-1}$. Gleichung (3.3) soll nun durch ein Profil mit der Eigenschaft

$$\phi(x) \xrightarrow{z \rightarrow \pm\infty} \pm v_0 \quad (3.4)$$

gelöst werden, um das Auftreten zweier separierter Phasen $\pm v_0$ und damit einer Grenzfläche im System zu gewährleisten. Dabei entspricht

$$v_0 = \sqrt{\frac{3m_0^2}{g_0}} \quad (3.5)$$

dem (positiven) Minimum von H . In [CH58] haben Cahn und Hilliard ausgehend von van der Waals Überlegungen zu Grenzflächen eine Lösung dieser Gleichung in Form eines Tangens Hyperbolicus-Profiles angeben können:

$$\phi_0^{(a)}(x) = v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}(z - a)\right). \quad (3.6)$$

Da (3.3) die effektive Feldgleichung des Felderwartungswertes in Baumgraphen-Näherung ist, entspricht $\phi_0^{(a)}(x)$ dem klassischen Erwartungswert des Feldes. Das Ergebnis (3.6) beschreibt damit die Grenzfläche ohne Berücksichtigung von Fluktuationen. Im Rahmen der Schleifenentwicklung lässt sich also schreiben

$$\langle \phi(x) \rangle = \beta^1 \phi_0^{(a)}(x) + \mathcal{O}(\beta^0),$$

wobei die β -Faktoren hier zur Verdeutlichung der Schleifenentwicklung nochmal explizit aufgeführt werden. Der Parameter a gibt den Nulldurchgang des Profils und damit den

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

Mittelpunkt der Grenzfläche an und ist bei periodischen Randbedingungen an die \vec{x} -Koordinaten frei wählbar – insbesondere ist der Hamiltonian (3.1) invariant gegenüber Translationen des Profils.

Das Cahn-Hilliard-Profil (3.6) entspricht einer Instantonlösung der ϕ^4 -Theorie, die aufgrund ihrer Form auch als Kink bezeichnet wird [Raj82]. Zur Herleitung von (3.6) wird benutzt, dass das Profil einzig von der z -Koordinate abhängen kann. Die somit nun noch gewöhnliche Differentialgleichung (3.3) ist dann integrierbar. Dass die Lösung der Feldgleichung mit den gewählten Randbedingungen nur von einer Raumkoordinate abhängt, folgt aus der Forderung nach der Stabilität der Lösung; dass also die Energie $H[\phi]$ des Profils minimal ist. Jede weitere Koordinatenabhängigkeit würde durch den quadratischen Gradiententerm zu einer Erhöhung der Energie führen. Neben dem Profil (3.6) sind weiterhin auch Profile mit einer ungeraden Anzahl an Grenzflächen (also Nulldurchgängen) unter den gegebenen Randbedingungen Lösungen der Feldgleichung. Mit obigem Argument lässt sich aber auch hier einsehen, dass diese Lösungen eine gegenüber (3.6) erhöhte Energie haben müssen (s. [Köp08]).

Korrekturen der Kinklösung, die sich durch Fluktuationen im kritischen Bereich des kontinuierlichen Phasenübergangs ergeben, können einerseits durch die Faltungsnäherung (Abschnitt 3.2), andererseits durch Berechnung in feldtheoretischer Störungstheorie (Abschnitt 3.3 und folgende Abschnitte) gefunden werden.

3.2. Kapillarwellentheorie und Faltungsnäherung

3.2.1. Kapillarwellen

In der sogenannten Kapillarwellentheorie (s. [BLS65], [Jas84]) wird die Grenzfläche als unstetiger Übergang zwischen den Phasen des Systems betrachtet. In Ruhelage entspricht die Feldkonfiguration $\phi(x)$ dann einer Funktion

$$v_0 \operatorname{sgn}(z) = \begin{cases} -v_0, & \text{wenn } z < 0, \\ v_0, & \text{wenn } z \geq 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Die Grenzfläche ist also um $z = 0$ zentriert. In $D = 3$ Dimensionen wird die Auslenkung der Grenzfläche aus dieser Ruhelage am Ort (x_1, x_2) durch die Funktion $h(x_1, x_2)$ beschrieben. Die freie Energie der so verformten Grenzfläche setzt sich zusammen aus einem Beitrag in Abhängigkeit von der Grenzflächenspannung und weiteren Termen bei Anwesenheit äußerer Felder (z.B. Gravitation), die der Arbeit gegen diese Felder Rechnung tragen. Der Flächenzuwachs durch Verformung ist durch

$$\int dx_1 dx_2 \left(\sqrt{1 + (\nabla h)^2} - 1 \right)$$

gegeben, wie sich leicht durch Parametrisierung der Grenzfläche und Berechnung des zugehörigen infinitesimalen Flächenelements finden lässt. Sind ρ_1, ρ_2 die Massendichten der Phasen, die in Ruhelage bei $z > 0$ bzw. $z < 0$ vorzufinden sind, so ist der Massenzuwachs

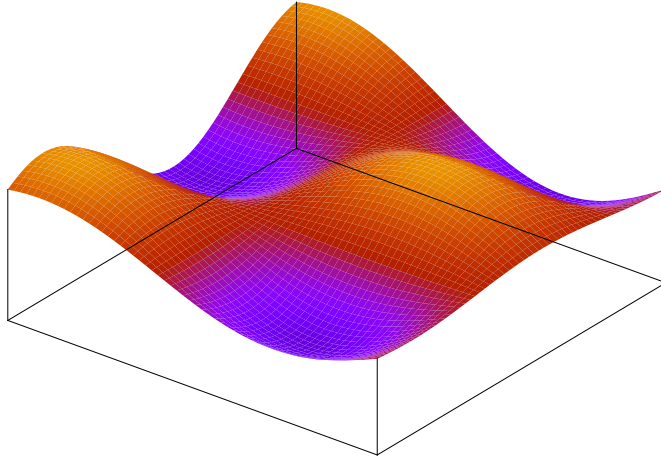


Abbildung 3.2.: Modell einer schwingenden Membran bzw. Kapillarwelle

durch Deformation der Grenzfläche in einem Punkt mit $z \in [0, h]$

$$(\rho_2 - \rho_1) dx_1 dx_2 dz = \Delta\rho dx_1 dx_2 dz.$$

Insgesamt muss also bei einer Deformation der Grenzfläche aus der Ruhelage in die durch $h(x_1, x_2)$ beschriebene Lage im Gravitationsfeld die Arbeit

$$H_{\text{CW}}[h] = \int dx_1 dx_2 \left\{ \sigma \cdot \left(\sqrt{1 + (\nabla h)^2} - 1 \right) + \int_0^{h(x_1, x_2)} dz \Delta\rho g z \right\} \quad (3.8)$$

gegen die Grenzflächenspannung σ und die Gravitation g verrichtet werden.

Im Kontext dieses Modells wird (3.6) als intrinsisches Grenzflächenprofil interpretiert, also als die auf kleinen Skalen relevante Form des Profils, während (3.8) die Grenzfläche auf Skalen beschreibt, auf denen das intrinsische Profil wiederum irrelevant wird. Der Begriff Kapillarwelle ist dann auch als Synonym für langwellige Anregungen der durch (3.8) beschriebenen Membran zu verstehen (s. Abb. 3.2). Eine Abschätzung der Gültigkeitsbereiche der beiden Ansätze ergibt sich durch Betrachtung der 2-Punkt-Korrelationsfunktion der Mean-Field-Theorie: Die Korrelationslänge $\xi = m_0^{-1}$ stellt die charakteristische Längenskala des intrinsischen Profils (3.6) dar. Die Gültigkeit des Drum-Head-Modells (3.8) ist dann auf Fluktuationen der Wellenlängen

$$\lambda \gg \xi$$

beschränkt. Mit dieser Einschränkung ist gesichert, dass der Gradient von h klein ist (da $(\nabla h)^2 \sim (h/\lambda)^2$), was die Entwicklung

$$\sqrt{1 - (\nabla h)^2} - 1 \approx -\frac{1}{2} (\nabla h)^2 \quad (3.9)$$

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

rechtfertigt und damit

$$H_{CW}[h] = \int dx_1 dx_2 \left\{ -\frac{\sigma}{2} (\nabla h)^2 + \int_0^{h(x_1, x_2)} dz \Delta \rho g z \right\}. \quad (3.10)$$

Unter der Voraussetzung, dass das System in x_i -Richtung auf die Länge L beschränkt ist und mit periodischen Randbedingungen

$$h(x_1, 0) = h(x_1, L) = h(0, x_2) = h(L, x_2),$$

liefert die partielle Integration

$$H_{CW}[h] = \frac{1}{2} \int d^2x \{ h(\vec{x}) \sigma \nabla^2 h(\vec{x}) + \Delta \rho g h(\vec{x})^2 \}. \quad (3.11)$$

Im thermischen Mittel werden die verschiedenen Konfigurationen von h jeweils mit dem Faktor

$$\exp \{ -\beta H_{CW}[h] \}$$

gewichtet. Damit ist $H_{CW}[h]$ Ausgangspunkt einer zweidimensionalen freien Feldtheorie.

Analog zu (2.22) lässt sich der Propagator dieser Theorie bestimmen. Mit Hilfe der Fouriertransformation (Vektorpfeile über den Koordinaten sind der Einfachheit halber ausgelassen)

$$h(x) = \sum_k \tilde{h}(k) e^{-ikx} \quad (3.12)$$

$$\tilde{h}(k) = \frac{1}{L^2} \int_{[0, L]^2} d^2x h(x) e^{ikx} \quad (3.13)$$

findet sich

$$\langle h(x) h(y) \rangle = \frac{1}{\beta L^2} \sum_k \frac{e^{-ik(y-x)}}{\sigma k^2 + g'}. \quad (3.14)$$

Dabei ist

$$k = \frac{2\pi}{L} n$$

mit $n \in \mathbb{Z}^2$ und $g' = \Delta \rho g$. Die Standardabweichung eines Punktes der Grenzfläche aus der Ruhelage beträgt also

$$\langle h(x)^2 \rangle = \frac{1}{\beta L^2} \sum_k \frac{1}{\sigma k^2 + g'}. \quad (3.15)$$

Für große Systeme mit

$$\frac{2\pi}{L} \ll 1$$

kann man die Summe in ein Integral übergehen lassen:

$$\frac{1}{(2\pi)^2 \beta} \int d^2k \frac{1}{\sigma k^2 + g'}.$$

3.2. Kapillarwellentheorie und Faltungsnäherung

Dieses Integral ist ultraviolett-divergent, da es sich für $k \rightarrow \infty$ wie $\ln(k)$ verhält. Es wird also ein oberer Cut-Off benötigt, um das Integral zu regularisieren. Auf Grund der oben geführten Diskussion ist dieses Modell aber a priori auf Skalen $l > \xi$ beschränkt, so dass eine Begründung für das Einführen eines physikalischen Cut-Offs $\frac{2\pi}{l}$ gegeben ist – problematisch ist aber der genaue Wert von l und damit die Unterteilung in instrinsisches und kapilläres Profil. Zusätzlich würde im Falle $g' = 0$ auch eine Infrarotdivergenz (d.h. bei $k = 0$) auftreten, die der Translation der Grenzfläche, d.h. Auslenkungen mit konstantem h , entstammt. Wird auch $k = 0$ durch das Verbot von Grenzflächentranslationen, also die Forderung $|k| \geq \frac{2\pi}{L}$, ausgeschlossen, so ist

$$\langle h(x)^2 \rangle \approx \frac{1}{4\pi\sigma\beta} \ln \left[\frac{\sigma \frac{4\pi^2}{l^2} + g'}{\sigma \frac{4\pi^2}{L^2} + g'} \right]. \quad (3.16)$$

Dies ist dank der Stabilisierung durch das Gravitationsfeld mit dem Parameter g' ein endlicher Ausdruck, auch für $L \rightarrow \infty$ bzw. $k = 0$. Wegen dieser regularisierenden Wirkung wird das äußere Feld auch als „pinning field“ bezeichnet [Jas84]. Solange ein solches Feld zugegen ist, ist es nicht nötig Grenzflächentranslationen zu verbieten und die Systemgröße zu beschränken.

Bei Abwesenheit eines äußeren Feldes, $g' = 0$, ist

$$\langle h(x)^2 \rangle = \frac{1}{2\pi\sigma\beta} \ln \left(\frac{L}{l} \right) \quad (3.17)$$

und der Ausdruck divergiert mit $L \rightarrow \infty$. Diese „Rauhigkeit“ der Grenzfläche mit steigender Systemgröße ist charakteristisch für langwellige Fluktuationen in $D = 3$ Dimensionen. Im Gegensatz zum instrinsischen Mean-Field-Profil mit konstanter Grenzflächendicke $\propto m_0^{-1}$ skaliert in der Kapillarwellentheorie die Grenzflächendicke mit der Systemgröße L [BLS65], [MM05]. Die hier gezeigte Berechnung von (3.17) wird ähnlich auch von Köpf in [Köp08] durchgeführt.

3.2.2. Faltungsnäherung

Die ganzheitliche Beschreibung der Grenzfläche erfolgt nach [Mül04], [MM05] (siehe auch [Jas84]) durch eine Faltung von instrinsischem Profil und der Wahrscheinlichkeit $P(h)$, die Grenzfläche der Kapillarwellentheorie um h aus der Ruhelage ausgelenkt vorzufinden; mit

$$P(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp \left[-\frac{h^2}{2s^2} \right] \quad (3.18)$$

und $s^2 = \langle h^2 \rangle$. Das mittlere Gesamtprofil für einen Punkt in der (x_1, x_2) -Ebene des Systems ist also durch

$$\langle \phi_{\text{CA}}(z) \rangle = \int dh \phi_{\text{int}}(z - h) P(h) \quad (3.19)$$

gegeben, wobei $\phi_{\text{int}}(z) = \phi_0^{(0)}(z)$ aus (3.6) mit $v_0 = 1$ ist. Anschaulich bedeutet diese Faltung, dass das instrinsische Grenzflächenprofil als zentriert um die diskontinuierliche Grenzfläche der Kapillarwellentheorie angenommen wird; siehe auch Abbildung 3.3.

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

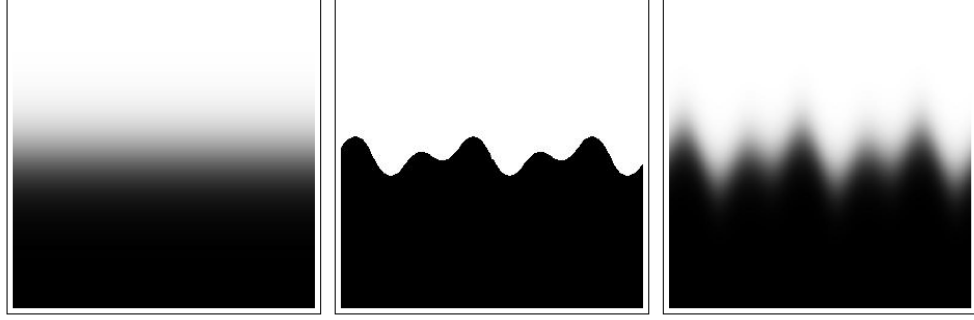


Abbildung 3.3.: Anschauliche Darstellung der Faltungsnäherung. Links: Intrinsisches Profil. Mitte: Kapillarwellen. Rechts: Faltung [Mül04]

Legt man als Definition der Grenzflächendicke

$$w^2 = \langle z^2 \rangle = \frac{1}{2} \int dz z^2 \frac{d\phi(z)}{dz} \quad (3.20)$$

zugrunde, so ist in der Faltungsnäherung

$$w_{\text{CA}}^2 = w_{\text{int}}^2 + w_{\text{CW}}^2 = \frac{\pi^2}{3m_0^2} + \frac{1}{2\pi\sigma\beta} \ln\left(\frac{L}{l}\right).$$

w_{int}^2 ist das zweite Moment der z -Koordinate gewichtet mit ϕ'_{int} , w_{CW}^2 ist das zweite Moment gewichtet mit $d\langle\phi_{\text{CA}}\rangle/dz$. Dieses Ergebnis, sowie eine Diskussion einer ganzen Reihe verschiedener Definitionen der Grenzflächendicke sind bei Müller [Mül04] zu finden. Der Einfluss der beiden komplementären Bilder auf die Grenzflächendicke ist demnach in dieser Näherung und mit dieser Definition der Dicke aufteilbar in intrinsische und kapillare Anteile. Die Kapillarwellen sind offenbar für eine zunehmende Rauigkeit der Grenzfläche mit steigender Systemgröße verantwortlich.

3.3. Feldtheoretisches Profil

Die rein feldtheoretische Beschreibung der Grenzfläche erfolgt anhand der ϕ^4 -Theorie des Ginzburg-Landau-Hamiltonians in der Form (3.1). Mit Hilfe einer Sattelpunktsentwicklung der erzeugenden Funktionale um die exakte Lösung der Mean-Field-Theorie (3.6) ist die mittlere Profilform $\langle\phi(x)\rangle$ zu berechnen. In der QFT spräche man hier von einer Feldtheorie vor einem Instanton-Hintergrundfeld. Die Folge der Entwicklung um ein solches Hintergrundfeld ist eine Modifikation der Theorie, bei der neue Vertizes entstehen und der Propagator im Allgemeinen eine kompliziertere Form annimmt, als in der ursprünglichen ϕ^4 -Theorie. Das Inverse des Propagators wird im Folgenden als Fluktuationsoperator bezeichnet. Da die explizite Form des Fluktuationsoperators von den gewählten Randbedingungen abhängt, werden hier zwei Varianten dargelegt. Einerseits werden von Köpf in [Köp08], [KM08] periodische Randbedingungen in transversaler

Richtung gewählt. Dort wird gezeigt, dass in Ein-Schleifen-Ordnung der Störungstheorie das Verhalten der Grenzfläche mit den Ergebnissen der Faltungsnäherung qualitativ vergleichbar ist. Insbesondere zeigt sich die von Müller gefundene $\ln(L)$ -Abhängigkeit und Rauigkeit der Grenzfläche. Drees hingegen liefert in [Dre10] in Ansätzen die Berechnung des Fluktationsoperators für eine durch Randbedingungen fixierte Grenzfläche, die in der Folge in dieser Arbeit (Kapitel 4) weitergeführt wird.

In Abschnitt 3.3.1 werden die Vertizes der Theorie hergeleitet, um daraufhin in 3.3.2 das Ein-Schleifen-Diagramm und die Feldgleichung für den Felderwartungswert in Ein-Schleifen-Ordnung berechnen zu können. Bis dorthin bilden diese Abschnitte die Grundlage für beide Arten von Randbedingungen. In Abschnitt 3.3.3 werden einige von Köpfs Ergebnissen wiedergegeben, wobei die Herleitung der Spektraldarstellung des Fluktationsoperators auch für Kapitel 4 von höchster Relevanz ist.

3.3.1. Die Feldtheorie des Systems mit Grenzfläche

Die Entwicklung von Feldtheorien um exakte Lösungen der Mean-Field-Theorie wird ausführlich in [Raj75] behandelt. Ausgangspunkte sind das Cahn-Hilliard-Profil (3.6) und das erzeugende Funktional der ϕ^4 -Theorie mit dem Hamiltonian (3.1). Korrekturen zum Cahn-Hilliard-Profil werden im Rahmen der Schleifenentwicklung durch Betrachtung der Fluktuationen um diese Profilform berechnet. Das Feld wird dazu zerlegt in das Mean-Field-Profil $\phi_0^{(a)}(x)$ und die Fluktuationen $\varphi^{(a)}(x)$:

$$\phi(x) = \phi_0^{(a)}(x) + \varphi^{(a)}(x). \quad (3.21)$$

Im Allgemeinen hängen die Fluktuationen φ von der Grenzflächenposition a ab; dieser Index wird aber vorerst weggelassen, was in Abschnitt 3.3.3 für die periodischen Randbedingungen begründet wird. Im Falle der fixierenden Randbedingungen in Kapitel 4 gibt es keine Freiheit bei der Wahl der Grenzflächenposition. Anschaulich entspricht (3.21) einer Translation im Funktionenraum, die das Integrationsmaß invariant lässt, so dass die formale Ersetzung

$$\mathcal{D}\phi \rightarrow \mathcal{D}\varphi$$

im Ausdruck für das erzeugende Funktional vorgenommen wird.

Wie lauten nun die Randbedingungen, die an die Fluktuationen gestellt werden, über die im Pfadintegral integriert wird? Da in der Mean-Field-Näherung an ϕ die Forderung (3.4) gestellt wird, würde man naiv für das Funktionalintegral über die Fluktuationen φ die Randbedingung

$$\varphi(x) \xrightarrow{z \rightarrow \pm\infty} 0$$

annehmen. Jedoch ist zu beachten, dass sich in höheren Ordnungen einer Schleifenentwicklung der Statistischen Feldtheorie eine effektive Wirkung $\Gamma[\phi_c]$ für den Erwartungswert des Feldes ergibt, deren Form sich von der des ursprünglichen Hamiltonians (3.1) unterscheidet. So lässt sich zum Beispiel zeigen, dass die konstanten Felderwartungswerte in höheren Ordnungen nichtmehr zwingend mit $\pm v_0$ übereinstimmen. Dazu lässt sich aus der effektiven Wirkung Γ ein effektives Potential (siehe z.B. [AL73]) ableiten,

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

aus dessen Minimierung sich die konstanten Felderwartungswerte bestimmen lassen. Im Allgemeinen sind die Minima gegenüber denen der Mean-Field-Theorie verschoben. Zur Anschauung lässt sich so vielleicht formulieren, dass das Feld in höheren Ordnungen der Störungstheorie nicht mehr denselben Randbedingungen (3.4) wie in nullter Ordnung unterliegt, da die Phasen nicht mehr durch $\pm v_0$ dargestellt werden. Es genügt aber für die anstehenden Rechnungen, ohne genauere Angabe von Randwerten vorerst anzunehmen, dass die Randbedingungen in $\pm z$ -Richtung auch in höheren Ordnungen antisymmetrisch bleiben. Diese Forderung ist sicherlich sinnvoll, solange die $\phi \rightarrow -\phi$ -Symmetrie des Hamiltonians nicht durch Schleifenkorrekturen gebrochen wird.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden also antisymmetrische Randwerte für die Fluktuationen φ in z -Richtung gefordert. Der Hamiltonian lässt sich nun in Abhängigkeit von φ berechnen:

$$\begin{aligned}
H[\phi_0 + \varphi] &= H[\phi_0] \\
&+ \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi(x))^2 - \frac{m_0^2}{4} \varphi(x)^2 + \frac{g_0}{4} \phi_0^{(a)}(z)^2 \varphi(x)^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{g_0}{3!} \phi_0(x) \varphi(x)^3 + \frac{g_0}{4!} \varphi(x)^4 \right. \\
&\quad \left. + (\nabla \phi_0(x)) (\nabla \varphi(x)) - \frac{m_0^2}{2} \phi_0(x) \varphi(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_0(x)^3 \varphi(x) \right\}.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Unter der Annahme, dass die Fluktuationen in x_i -Richtung auf den Systemgrenzen verschwinden (wie für Kapitel 4 benötigt) bzw. periodisch sind (in diesem Kapitel erforderlich) und, wie oben gefordert, entlang der z -Achse antisymmetrische Grenzwerte anstreben, lässt sich der erste Term in der letzten Zeile von (3.22) partiell integrieren und die Zeile wird zu

$$\varphi(x) \left(-\Delta \phi_0(x) - \frac{m_0^2}{2} \phi_0(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_0(x)^3 \right).$$

Da $\phi_0(x)$ (3.3) löst, verschwindet dieser Ausdruck. Nach partieller Integration des Gradiententerms von φ findet sich die neue Form des Hamiltonians, an der sich der sogenannte Fluktuationsoperator \mathbb{K} – der Operator der in den in φ quadratischen Termen auftritt – direkt ablesen lässt:

$$\begin{aligned}
H[\phi_0 + \varphi] &= H[\phi_0] \\
&+ \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} \varphi(x) \left[-\Delta - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0(x)^2 \right] \varphi(x) \right. \\
&\quad \left. + \frac{g_0}{3!} \phi_0(x) \varphi(x)^3 + \frac{g_0}{4!} \varphi(x)^4 \right\}.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Das Inverse des Fluktuationsoperatorokerns

$$\mathbb{K}_{xy} = \delta(x - y) \left[-\Delta - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0(x)^2 \right] \tag{3.24}$$

stellt, sofern ein Inverses existiert, den Propagator der Theorie dar.

Als Kurzschreibweise wird

$$H[\varphi] = \int d^D x \left\{ \int d^D y \frac{1}{2} \varphi(x) \mathbb{K}_{xy} \varphi(y) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^{(a)}(x) \varphi(x)^3 + \frac{g_0}{4!} \varphi(x)^4 \right\} \quad (3.25)$$

als Hamiltonian der Fluktuationen φ definiert. Denn der Term $H[\phi_0]$ in (3.23) ist eine Konstante und kürzt sich bei der Berechnung von Erwartungswerten raus. Er kann also von vornherein außer Acht gelassen werden. Das erzeugende Funktional der die Grenzflächenfluktuationen beschreibenden Feldtheorie ist dann

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\varphi \exp \left\{ -H[\varphi] + \int d^D x J(x) \varphi(x) \right\} \quad (3.26)$$

mit $H[\varphi]$ aus (3.25). Analog zur Konstruktion der Diagramme in Abschnitt 2.2.2 ist an (3.26) bzw. (3.25) abzulesen, dass es zwei Vertizes, nämlich einen ortsabhängigen 3-Punkt- und einen 4-Punktvertex gibt:



$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \diagdown \\ \diagup \\ \text{\scriptsize } x \end{array} & = -\frac{g_0}{4!} & \begin{array}{c} | \\ \diagdown \\ \diagup \\ \text{\scriptsize } x \end{array} & = -\frac{g_0}{3!} \phi_0(x) \end{array}$$

3.3.2. Ein-Schleifen-Korrektur des mittleren Profils

Die Korrektur des mittleren Grenzflächenprofils

$$\langle \phi(x) \rangle = \phi_0(x) + \langle \varphi(x) \rangle \quad (3.27)$$

ist in erster Ordnung der Schleifenentwicklung nach Potenzen von β^{-1}

$$\langle \varphi \rangle = \bar{\varphi}_1 + \mathcal{O}(\beta^{-1})$$

durch das Diagramm in Abbildung 3.4 gegeben. Andere Diagramme mit nur einer Schleife und einer einlaufenden Linie lassen sich aus den Vertizes der Theorie nicht erzeugen. Unter der noch zu begründenden Annahme, dass der Fluktationsoperator \mathbb{K} ein Inverses besitzt, lautet die Integraldarstellung (mit dem Symmetriefaktor 2) des Diagramms

$$\bar{\varphi}_1(x) = -\frac{g_0}{2} \int d^D x' \mathbb{K}_{xx'}^{-1} \mathbb{K}_{x'x'}^{-1} \phi_0(x'). \quad (3.28)$$

Anwendung des Fluktationsoperators auf diesen Ausdruck liefert eine Differentialgleichung für $\bar{\varphi}_1$:

$$\mathbb{K} \bar{\varphi}_1(x) + \frac{g_0}{2} \mathbb{K}_{xx}^{-1} \phi_0(x) = 0 \quad (3.29)$$

mit

$$\mathbb{K} = -\Delta - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0(x)^2. \quad (3.30)$$

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

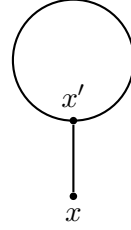


Abbildung 3.4.: Diagramm zu $\langle \varphi \rangle$ in erster Ordnung

Gleichung (3.29) entspricht (2.31) mit der effektiven Wirkung $\Gamma[\varphi]$ in Ein-Schleifen-Ordnung (s. [Köp08]).

Da \mathbb{K} ein hermitescher Operator ist, spannen die zugehörigen (eigentlichen und uneigentlichen) Eigenfunktionen den Hilbertraum der normierbaren Fluktuationen auf. In Spektraldarstellung ist dann

$$\mathbb{K}_{xy} = \sum_{\lambda}^f \lambda \Psi_{\lambda}(x) \Psi_{\lambda}^*(y). \quad (3.31)$$

Hier steht λ für die Eigenwerte des Operators zu den jeweiligen Eigenfunktionen Ψ_{λ} :

$$\mathbb{K} \Psi_{\lambda} = \lambda \Psi_{\lambda}. \quad (3.32)$$

Sind die Eigenwerte und -funktionen bekannt, lässt sich dementsprechend der inverse Fluktuationsoperator bestimmen:

$$\mathbb{K}_{xy}^{-1} = \sum_{\lambda}^f \frac{1}{\lambda} \Psi_{\lambda}(x) \Psi_{\lambda}^*(y). \quad (3.33)$$

Die Antwort auf die Frage nach der Existenz und Darstellung des inversen Fluktuationsoperators \mathbb{K}^{-1} ist dabei von den jeweils gewählten Randbedingungen auf den Systemgrenzen abhängig, da über diese der Raum der betrachteten Funktionen und damit das Spektrum des Operators festgelegt wird.

3.3.3. Periodische transversale Randbedingungen

Wie bereits erläutert, gehorcht das Feld in z -Richtung antiperiodischen Randbedingungen, um die Existenz einer Grenzfläche zu sichern. Diese Richtung wird im weiteren Verlauf auch als longitudinale Ausdehnung des Systems bezeichnet. In x_i -Richtung (dementsprechend als transversale Ausdehnung bezeichnet) hingegen ist das System auf die Seitenlänge L beschränkt. Die Wahl von periodischen Randbedingungen in transversaler Richtung

$$\begin{aligned} \varphi(x_1, \dots, x_{D-1}, z) &= \varphi(x_1 + L, \dots, x_{D-1}, z) = \dots \\ &\dots = \varphi(x_1, \dots, x_{D-1}, z) = \varphi(x_1, \dots, x_{D-1} + L, z) \end{aligned}$$

erlaubt das Auftreten einer Nullmode des Fluktuationsoperators, d.h. Eigenfunktionen zum Eigenwert $\lambda = 0$. Diese Nullmode

$$\Psi_0(x) \propto \frac{\partial \phi_0(z)}{\partial z}$$

entspricht einer infinitesimalen Translation der Grenzfläche in ihrer Gesamtheit, wie Köpf in [Köp08] zeigt. Ihr Auftreten ist bedingt durch die Wahl von Randbedingungen, die eine Translation der Grenzfläche zulassen, wie das bei periodischen Randbedingungen der Fall ist. Das hat zur Folge, dass sich kein Inverses (3.33) bilden lässt. Um dieses Problem zu umgehen, dürfen die Grenzflächentranslationen nicht in die erzeugenden Funktionale der Theorie eingehen.

Separation der Grenzflächentranslationen

In (3.26) wird über alle Fluktuationen integriert, insbesondere auch über die der Nullmode entsprechenden. Das bedeutet insbesondere, dass in einer Theorie, die von (3.26) mit periodischen transversalen Randbedingungen ausgeht, eine ganze Klasse von Grenzflächen betrachtet wird – von Interesse sind aber die Eigenschaften einer einzelnen fluktuierenden Grenzfläche. Aus diesen Gründen wird die Grenzfläche bei einem beliebigen Wert von a , der Einfachheit halber bei $a = 0$, festgesetzt und die Fluktuationen, die der Translation der Grenzfläche entsprechen, werden separiert. Um diese Separation der Translationen zu erreichen wird die Methode der kollektiven Koordinaten angewandt [GS75]. Dieses Verfahren hat einige Ähnlichkeit mit der Eichfixierung in der Quantisierung von Eichtheorien, wie sie z.B. in [AL73] beschrieben wird und ist allgemein von Bedeutung bei der Entwicklung um Lösungen der Feldgleichungen, die kontinuierliche Symmetrien des Hamiltonians brechen [ZJ02].

Um ein Integral über die Position a der Grenzfläche in (3.26) separieren zu können, wird eine Eins konstruiert, die sicherstellt, dass im Pfadintegral nur Fluktuationen

$$\varphi^{(a)} = \phi - \phi_0^{(a)}$$

betrachtet werden, die keinen Translationsanteil besitzen. Für diese „echten“ Fluktuationen gilt (dies entspricht der Eichfixierungsbedingung):

$$\int d^D x \varphi^{(a)}(x) \frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} = 0. \quad (3.34)$$

Die echten Fluktuationen sind also orthogonal zur Nullmode. Diese Bedingung wird forciert durch eine Delta-Distribution in der Eins:

$$1 = \int da \delta \left(\int d^D x \varphi^{(a)}(x) \frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} \right) \Delta^{(a)}(\varphi). \quad (3.35)$$

Damit diese Beziehung erfüllt ist muss $\Delta^{(a)}(\varphi)$ entsprechend als Inverses der Jacobi-Determinante der Substitution

$$\int d^D x \varphi^{(a)}(x) \frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} \rightarrow f(a)$$

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

gewählt werden:

$$\begin{aligned}\Delta^{(a)}(\varphi) &= \frac{df(a)}{da} \\ &= \int d^D x \left(\frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} \right)^2 - \int d^D x \varphi^{(a)}(x) \frac{\partial^2 \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z^2}.\end{aligned}\quad (3.36)$$

Einfügen der Eins in die Zustandssumme ergibt

$$\begin{aligned}Z &= \int \mathcal{D}\varphi e^{-H[\varphi]} \int da \delta \left(\int d^D x \varphi^{(a)}(x) \frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} \right) \\ &\cdot \left[\int d^D x \left(\frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} \right)^2 - \int d^D x \varphi^{(a)}(x) \frac{\partial^2 \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z^2} \right].\end{aligned}\quad (3.37)$$

Der Term

$$\int d^D x \left(\frac{\partial \phi_0^{(a)}(z)}{\partial z} \right)^2$$

ist, aufgrund der Translationsinvarianz des Integrationsmaßes, eine Konstante und insbesondere unabhängig von der Grenzflächenposition a . Das Integrationsmaß $\mathcal{D}\varphi$ und der Hamiltonian $H[\varphi]$ sind ebenfalls jeweils invariant unter Translationen der Grenzfläche, so dass sich das Pfadintegral auch ausgehend von $\varphi^{(-a)}$ ausführen lässt und der Ausdruck in der δ -Distribution zu

$$\int d^D x \varphi^{(0)}(x) \frac{\partial \phi_0^{(0)}(z)}{\partial z}$$

wird. Der Index (0) wird von nun an wieder weggelassen. Der letzte Term in (3.37) wird als Korrektur höherer Ordnung betrachtet und wird in der Ein-Schleifen-Näherung nicht weiter mitgeführt [Hop97]. Nun lässt sich das Integral über die Grenzflächenpositionen separieren, da kein Faktor im Integranden noch von a abhängt:

$$\begin{aligned}Z &= \left[\int d^D x \left(\frac{\partial \phi_0(z)}{\partial z} \right)^2 \right] \int \mathcal{D}\varphi e^{-H[\varphi]} \delta \left(\int d^D x \varphi(x) \frac{\partial \phi_0(z)}{\partial z} \right) \int da \\ &= \left[\int d^D x \left(\frac{\partial \phi_0(z)}{\partial z} \right)^2 \right] \int_{N_\perp} \mathcal{D}\varphi e^{-H[\varphi]} \int da.\end{aligned}\quad (3.38)$$

N_\perp kennzeichnet dabei die Einschränkung des Funktionenraums auf die Fluktuationen um das ortsfeste Cahn-Hilliard-Profil (3.6) mit $a = 0$ ohne Translationsmode. Das divergierende Integral über die Grenzflächenposition und der konstante Vorfaktor sind für die Betrachtung einer Grenzfläche nicht von Interesse (bei Regularisierung des Integrals würden diese Faktoren in der Berechnung von Erwartungswerten rausgekürzt), so dass von nun an die Zustandssumme

$$Z_\perp = \int_{N_\perp} \mathcal{D}\varphi e^{-H[\varphi]} \quad (3.39)$$

betrachtet wird. Die Überlegungen der Abschnitte 3.3.1 und 3.3.2 müssen dann lediglich auf die echten Fluktuationen beschränkt werden. Insbesondere ist der Fluktuationsoperator dann

$$\mathbb{K}' = \mathbb{K}|_{N_\perp}.$$

\mathbb{K}' besitzt per Definition keine Nullmode und ist somit invertierbar.

Das Spektrum des Fluktuationsoperators

Zur Vereinfachung des Eigenwertproblems (3.32) lässt sich der Operator in einen transversalen ($-\Delta^{(D-1)}$) und einen longitudinalen ($\tilde{\mathbb{K}}$) Anteil zerlegen:

$$\mathbb{K} = -\Delta^{(D-1)} - \underbrace{\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0^2(z)}_{\tilde{\mathbb{K}}} \quad (3.40)$$

mit

$$\Delta^{(D-1)} = \sum_{k=1}^{D-1} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2},$$

$$\phi_0^2(z) = v_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad \text{und} \quad v_0^2 = \frac{3m_0^2}{g_0}$$

gemäß (3.6) und (3.5). Per Separationsansatz für die beiden Anteile ergeben sich zwei Eigenwertgleichungen:

$$-\Delta^{(D-1)} f_{\vec{n}}(x_1, \dots, x_{D-1}) = \lambda_{\vec{n}} f_{\vec{n}}(x_1, \dots, x_{D-1}) \quad (3.41)$$

und

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0^2(z) \right] g_\chi(z) = \chi g_\chi(z). \quad (3.42)$$

Die Eigenwertgleichung zur Bestimmung des Spektrums des Fluktuationsoperators

$$\mathbb{K}\Psi_{\vec{n}\chi} = \lambda_{\vec{n}\chi}\Psi_{\vec{n}\chi} \quad (3.43)$$

wird dann durch die Produkte

$$\Psi_{\vec{n}\chi}(x) = f_{\vec{n}}(\vec{x})g_\chi(z)$$

mit Eigenwerten

$$\lambda_{\vec{n}\chi} = \lambda_{\vec{n}} + \chi$$

gelöst.

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

Transversaler Anteil: Die transversalen Randbedingungen betreffen nur das Spektrum in (3.41). Die normierten Lösungen dieser Gleichung bei periodischen Randbedingungen sind wohlbekannt:

$$f_{\vec{n}}(\vec{x}) = L^{\frac{1-D}{2}} \exp\left(-i\frac{2\pi}{L}\vec{n}\cdot\vec{x}\right) \quad (3.44)$$

mit

$$\vec{x} \in [0, L]^{D-1} \quad \text{und} \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}.$$

Die Eigenwerte sind

$$\lambda_{\vec{n}} = \vec{n}^2 \frac{4\pi^2}{L^2}.$$

Für $\vec{n} = 0$ existiert also insbesondere eine Nullmode des transversalen Anteils des Fluktationsoperators.

Longitudinaler Anteil: Um einen Eindruck des Spektrums des longitudinalen Anteils zu gewinnen, wird die Eigenwertgleichung (3.42) in die Form einer Schrödingergleichung gebracht:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\hbar^2 m_0}{4} + \frac{3\hbar^2 m_0}{4} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] g_\chi(z) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \lambda_\chi g_\chi(z) \quad (3.45)$$

oder

$$\left[\frac{p_z^2}{2m_0} + V(z) \right] g_\chi(z) = E_\chi g_\chi(z). \quad (3.46)$$

Letzteres ist die Schrödingergleichung eines Teilchens der Masse m_0 im Potentialtopf $V(z)$. Dieser hat die Eigenschaft

$$V(z) \xrightarrow{z \rightarrow \pm\infty} \frac{\hbar^2 m_0}{2} > V(z) \quad \forall z \in \mathbb{R}$$

und ein absolutes Minimum

$$V(0) = -\frac{\hbar^2 m_0}{4}.$$

Qualitativ ist dieses Problem aus der Quantenmechanik eines Teilchens im endlichen Potentialtopf bekannt. Existieren Eigenwerte $V(0) < E_\chi < \hbar^2 m_0/2$, so entsprechen diese gebundenen Zustände und sind diskret. Für Eigenwerte $E_\chi \geq \hbar^2 m_0/2$ ist ein kontinuierliches Spektrum ungebundener Zustände zu erwarten. $V(z)$ ist auch als Pöschl-Teller-Potential bekannt. Die Auswertung des Eigenwertspektrums ist ursprünglich in [PT33] bzw. in der hier verwendeten Form in [Hop97] betrieben worden.

Die Lösung der Schrödingergleichung führt auf zwei diskrete Eigenwerte χ_i mit den zugehörigen normierten Eigenfunktionen $g_{\chi_i}(z)$

$$\chi_0 = 0, \quad g_{\chi_0}(z) = \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad (3.47a)$$

$$\chi_1 = \frac{3m_0^2}{4}, \quad g_{\chi_1}(z) = \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad (3.47b)$$

und das Kontinuum an Eigenwerten $\chi_{c,p}$ mit den Eigenfunktionen $g_{\chi_{c,p}}(z)$ (der Index c steht für „continuous“)

$$\chi_{c,p} = m_0^2 + p^2 \text{ mit } p \in \mathbb{R},$$

$$g_{\chi_{c,p}}(z) = \mathcal{N}_p e^{ipz} \left[2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2} m_0^2 \tanh^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) + 3im_0 p \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \right] \quad (3.47c)$$

mit der Normierung

$$\mathcal{N}_p = [2\pi (4p^4 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4)]^{-\frac{1}{2}}.$$

Der Sekans Hyperbolicus ist durch

$$\operatorname{sech}(x) = \frac{1}{\cosh(x)}$$

definiert. Das Potential und das Spektrum sind in Abbildung 3.5 angedeutet.

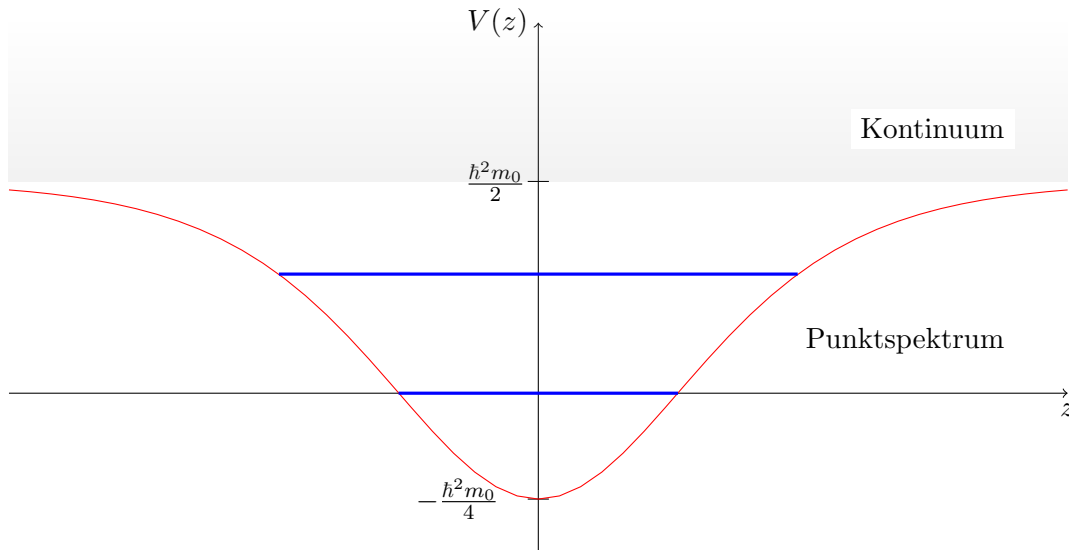


Abbildung 3.5.: Potentialtopf aus (3.46) und das Spektrum aus Kontinuum (schattiert), sowie zwei diskreten Eigenwerten (blau)

Berechnung von \mathbb{K}'^{-1}

Da sowohl das transversale als auch das longitudinale Eigenwertproblem Lösungen zum Eigenwert Null besitzen, lässt sich die Nullmode des Fluktuationsoperators \mathbb{K}

$$\Psi_{\vec{0}\chi_0}(z) = L^{\frac{1-D}{2}} \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right)$$

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

identifizieren. Im Spektrum des Operators \mathbb{K}' ist diese Mode eliminiert. Um den inversen Fluktuationsoperator zu bilden, muss somit

$$\begin{aligned} \mathbb{K}'_{xy}{}^{-1} &= \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1} \setminus \{0\}} \Psi_{\vec{n}\chi_0}(x) \Psi_{\vec{n}\chi_0}^*(y) \frac{1}{\lambda_{\vec{n}\chi_0}} \\ &+ \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \Psi_{\vec{n}\chi_1}(x) \Psi_{\vec{n}\chi_1}^*(y) \frac{1}{\lambda_{\vec{n}\chi_1}} \\ &+ \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \int dp \Psi_{\vec{n}\chi_{c,p}}(x) \Psi_{\vec{n}\chi_{c,p}}^*(y) \frac{1}{\lambda_{\vec{n}\chi_{c,p}}} \end{aligned} \quad (3.48)$$

berechnet werden.

Im Integral zum Ein-Schleifen-Diagramm des Fluktuationserwartungswertes (3.28) tritt $\mathbb{K}'_{xy}{}^{-1}$ mit zwei verschiedenen Parametern x und x' auf. Hoppe gibt in [Hop97] einen geschlossenen Ausdruck für diesen Propagator an und kommentiert, dass aufgrund der Komplexität dieses Ausdrucks die Graphenberechnung denkbar ungeeignet zur Bestimmung des Fluktuationserwartungswertes sei. In der effektiven Feldgleichung (3.29) hingegen tritt nur der Fall $x = y$, also $\mathbb{K}'_{xx}{}^{-1}$ auf, dessen Form wesentlich einfacher zu handhaben ist. Die Berechnung des Erwartungswerts durch Lösung der Differentialgleichung scheint also gegenüber der Graphenberechnung der vielversprechendere Ansatz zu sein.

Sortiert nach Potenzen des z ergibt sich der folgende Ausdruck für $\mathbb{K}'_{xx}{}^{-1}$:

$$\frac{g_0 v_0}{2} \mathbb{K}'_{xx}{}^{-1} = \tilde{C}_0 + \tilde{C}_1 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2} z\right) + \tilde{C}_2 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2} z\right), \quad (3.49)$$

mit den divergierenden und noch zu regularisierenden Koeffizienten

$$\begin{aligned} \frac{2}{g_0 v_0} \tilde{C}_0 &= \frac{1}{2\pi} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \int dp \frac{L^{1-D}}{\vec{n}^2 \frac{4\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2}, \\ \frac{2}{g_0 v_0} \tilde{C}_1 &= \frac{3m_0}{4} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \frac{L^{1-D}}{\vec{n}^2 \frac{4\pi^2}{L^2} + \frac{3m_0^2}{4}} \\ &- 3 \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \int dp (m_0^4 + m_0^2 p^2) \frac{L^{1-D} \mathcal{N}_p^2}{\vec{n}^2 \frac{4\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2}, \\ \frac{2}{g_0 v_0} \tilde{C}_2 &= \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1} \setminus \{0\}} \frac{3m_0 L^{3-D}}{32\pi^2 \vec{n}^2} \\ &- \frac{3m_0}{4} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \frac{L^{1-D}}{\vec{n}^2 \frac{4\pi^2}{L^2} + \frac{3m_0^2}{4}} \\ &+ \frac{9m_0^4}{4} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}} \int dp \frac{L^{1-D} \mathcal{N}_p^2}{\vec{n}^2 \frac{4\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2}. \end{aligned}$$

Die Bezeichnungen und Vorfaktoren sind aus [Köp08] übernommen. Es zeigt sich, dass für $x = x'$ die Abhängigkeiten von den transversalen Koordinaten verschwunden sind. Die Differentialgleichung (3.29) für $\bar{\varphi}_1$ ist dann

$$\mathbb{K}'\bar{\varphi}_1(x) + \left[\tilde{C}_0 + \tilde{C}_1 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \tilde{C}_2 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) = 0. \quad (3.50)$$

Die Lösung dieser inhomogenen, gewöhnlichen Differentialgleichung wurde von Köpf durch Variation der Konstanten gefunden:

$$\begin{aligned} \bar{\varphi}_1(z) = & - \left[\frac{2\tilde{C}_1}{3m_0^2} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \frac{1}{2m_0} (\tilde{C}_0 + \tilde{C}_2) z \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\ & - \frac{\tilde{C}_0}{m_0^2} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right). \end{aligned} \quad (3.51)$$

Der Beitrag der Ein-Schleifen-Rechnung zum Felderwartungswert enthält somit eine Korrektur des Mean-Field-Profiles $\propto \tanh(m_0 z/2)$ und im Unendlichen exponentiell abfallende Terme. In $D = 3$ Dimensionen und nach Anwendung der dimensional Regularisierung findet Köpf für die Koeffizienten folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} \tilde{C}_0 &= -\frac{g_0 v_0}{2} \frac{m_0}{4\pi}, \\ \tilde{C}_1 &= \frac{g_0 v_0}{2} \frac{3}{16\pi} m_0 [\alpha + \ln(m_0 L)] \\ &\text{mit } \alpha = \ln\left(\frac{2\sqrt{\pi}}{3\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right) + \gamma \approx -1,832, \\ \tilde{C}_2 &= \frac{g_0 v_0}{2} 3m_0 \frac{\ln(3)}{16\pi}. \end{aligned}$$

Hier ist $\Gamma(x)$ die Gamma-Funktion und γ die Eulersche Konstante. Um die physikalische Profilform zu erhalten, müssen die nackten Parameter bis zur Ein-Schleifen-Ordnung renormiert werden. Köpf benutzt dazu das Renormierungsschema aus [GKM96] und erhält letztendlich das Profil zur Ein-Schleifen-Ordnung

$$\bar{\phi}(x) = \langle \phi(x) \rangle = \phi_0(z) + \bar{\varphi}_1(z)$$

in renormierten Größen:

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_R(z) = v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \eta \frac{m_R}{2} z \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right. \\ \left. - \frac{u_R}{8\pi} \left[\frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right] \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Dabei ist die dimensionslose (s. Anhang B) Kopplungskonstante u_R durch

$$u_R = \frac{g_R}{m_R}$$

3. Grenzflächenprofil und -dicke bei periodischen Randbedingungen

definiert und

$$\eta = \frac{13}{16} - \frac{3}{4} \ln(3) \approx -0,0115.$$

Analog zur Berechnung der Dicke der Grenzfläche in der Kapillarwellentheorie – in dieser Arbeit nur exemplarisch als zweites Moment nach Definition (3.20) zitiert – ergibt sich für das Profil (3.52)

$$w_{\text{per}}^2 = \int dz z^2 \bar{\phi}'_R(z) = m_R^{-2} \left\{ \frac{\pi^2}{3} + \frac{u_R}{8\pi} \left(2\alpha - \frac{2}{3} \pi^2 \eta \right) + 2 \frac{u_R}{8\pi} \ln(m_R L) \right\}.$$

Bemerkenswert ist die qualitative Übereinstimmung mit Müllers Ergebnis; die so definierte Grenzflächendicke besteht aus einer Konstanten addiert mit einer $\ln(L)$ -Abhängigkeit. Dieses aus der reinen Feldtheorie („first principles“) abgeleitete Ergebnis enthält keine willkürlichen Parameter, wie den Cut-Off l in der Grenzflächendicke nach Müller. Jedoch lässt sich die Form von Müllers Ergebnis rekonstruieren, indem die Terme proportional zu u_R als $\ln(L/l)$ umgeschrieben werden. Qualitativ sind die Aussagen der Kapillarwellentheorie und der ϕ^4 -Theorie also miteinander vereinbar. Letztere bestätigt damit die Ergebnisse der ad hoc durchgeführten Faltung von intrinsischem Profil und Kapillarwellen in der Faltungsnäherung.

4. Die fixierte Grenzfläche

Nach der Beschäftigung mit der Grenzfläche in einem System mit periodischen Randbedingungen, folgen in diesem Kapitel analoge Betrachtungen zu Grenzflächen, die durch Randbedingungen fixiert werden. Ebenso wie bei Köpf wird hier nicht die Graphenberechnung des Ein-Schleifen-Diagramms durchgeführt, da der dort auftretende Propagator bei den hier gewählten Randbedingungen wohl noch unhandlicher als im in [Hop97] beschriebenen Fall wäre. Stattdessen wird versucht, mit ähnlicher Herangehensweise wie in Abschnitt 3.3.3 eine Lösung der effektiven Feldgleichung zu finden. Die Berechnung der Profilform ist in diesem Fall durch die Hoffnung motiviert, die Ergebnisse für einen Vergleich mit Monte-Carlo-Simulationen zugänglicher zu machen. Denn für diese Simulationen muss dem Wandern der Grenzfläche durch Fixierung entgegengewirkt werden, um aussagekräftige Ergebnisse zu bekommen [Mül04].

Die Überlegungen in diesem Abschnitt greifen die Vorarbeit von Drees in [Dre10] auf. Die Bezeichnungen der von nun an auftretenden Größen sind der Einfachheit halber wie in Abschnitt 3.3 gewählt; natürlich handelt es sich aber um Größen der Problemstellung mit fixierenden Randbedingungen. Einen Überblick über die in diesem Kapitel häufig auftretenden Größen erhält man im Anhang A.

4.1. Randbedingungen

Sollen auf allen Seitenflächen des Systems dieselben Randbedingungen erfüllt werden, so lassen sich diese durch die Forderung

$$\begin{aligned}\phi(0, x_2, \dots, x_{D-1}, z) &= \phi(L, x_2, \dots, x_{D-1}, z) = \dots \\ &\dots = \phi(x_1, \dots, x_{D-2}, 0, z) = \phi(x_1, \dots, x_{D-2}, L, z) = \mu(z)\end{aligned}$$

an das Profil ϕ ausdrücken. Es stellt sich dann die Frage, von welcher Form die Funktion $\mu(z)$, die letztendlich die Grenzfläche stabilisieren soll, sein muss. Um die Grenzfläche auf dem Rand zu fixieren und den Nulldurchgang des Profils bei $z = 0$ festzusetzen würde die Forderung

$$\mu(z) = v_0 \operatorname{sgn}(z)$$

genügen. Jedoch hätte diese Wahl einerseits starke Randeffekte zur Folge, die in der Interpretation der Ergebnisse identifiziert und ausgeklammert werden müssten. Andererseits wäre unter diesen Randbedingungen schon die Lösung der Feldgleichung in der Mean-Field-Näherung problematisch, da $\mu(z)$ dann selbst keine Lösung der Feldgleichung darstellt.

4. Die fixierte Grenzfläche

Da die in höheren Ordnungen der Störungstheorie auftretenden Fluktuationen aber gerade vor dem Hintergrund des Mean-Field-Profiles berechnet werden müssen, stellt

$$\mu(z) = \phi_0(z) \quad (4.1)$$

die natürlichste Wahl der Randbedingung dar. $\phi(x) = \phi_0(z)$ ist dann die eindeutige Lösung der Feldgleichung in der MFA (3.3), die trivialerweise auf dem Systemrand gleich $\mu(z)$ ist. Insbesondere tritt dann kein freier Parameter in der Lösung der Feldgleichung auf, dem die Grenzflächenposition entspricht – die Grenzfläche ist in nullter Ordnung bei $z = 0$ fixiert. Daran lässt sich bereits ablesen, dass eine Nullmode des Fluktationsoperators, wie sie bei periodischen Randbedingungen vorkommt, hier nicht auftreten wird. Die damit verbundene Problematik der Grenzflächentranslationen wird also umgangen.

Was jedoch passiert mit den Randbedingungen in höheren Ordnungen der Störungsreihe? Da der Profilverlauf auf dem Rand in diesem Fall der Lösung der MFA entspricht, ließe sich (4.1) als Randbedingung nullter Ordnung verstehen. Denn, wie zu Beginn von Abschnitt 3.3.1 diskutiert, sind die Randbedingungen in z -Richtung in höheren Ordnungen nicht dieselben, wie in der MFA. Dabei stellt sich dann die Frage, ob auch die transversale Randbedingung $\mu(z)$ an die Ordnung der Störungsrechnung angepasst werden soll, damit

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \mu(z)$$

das erwünschte Verhalten aufweist und zum Beispiel gegen die Felderwartungswerte der homogenen Phasen konvergiert. So wäre eine Möglichkeit in nullter Ordnung die Randbedingung

$$\mu_0(z) = \phi_0(z)$$

zur Lösung der Feldgleichung zu nutzen, in höheren Ordnungen jedoch Korrekturen des MFP zuzulassen, so dass dort als Randbedingung beispielsweise

$$\mu_1(z) = \left(1 + \frac{C}{v_0}\right) \phi_0(z)$$

angesetzt wird. Dabei ist C eine Konstante die im Nachhinein durch Selbstkonsistenzgleichungen zu bestimmen wäre. Auch noch komplexere Modifikationen der Randbedingungen durch Hinzunahme weiterer Terme, wie sie beispielsweise in Köpfs Resultat (3.52) auftauchen, sind denkbar. Im Allgemeinen wird aber durch die Wahl komplizierterer Randbedingungen eine Lösung der Feldgleichung erschwert.

In dieser Arbeit wird nun das Szenario beschrieben, in dem die Randbedingungen $\mu(z)$ in allen Ordnungen

$$\mu(z) = \phi_0(z) = v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

lauten. Dann ist

$$\begin{aligned} \phi(0, x_2, \dots, x_{D-1}, z) &= \phi(L, x_2, \dots, x_{D-1}, z) = \dots \\ \dots &= \phi(x_1, \dots, x_{D-2}, 0, z) = \phi(x_1, \dots, x_{D-2}, L, z) = v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \end{aligned}$$

die Randbedingung für das Grenzflächenprofil ϕ . Die Sattelpunktsentwicklung von ϕ um das MFP

$$\phi(x) = \phi_0(z) + \varphi(x)$$

bedingt dann die Forderung

$$\begin{aligned} \varphi(0, x_2, \dots, x_{D-1}, z) &= \varphi(L, x_2, \dots, x_{D-1}, z) = \dots \\ \dots &= \varphi(x_1, \dots, x_{D-2}, 0, z) = \varphi(x_1, \dots, x_{D-2}, L, z) = 0 \end{aligned}$$

an die Fluktuationen $\varphi(x)$. In z -Richtung werden weiterhin antisymmetrische Grenzwerte im Unendlichen angenommen.

4.2. Die Feldgleichung

Die Konstruktion der Feldtheorie der Fluktuationen wurde bereits in den Abschnitten 3.3.1 und 3.3.2 beschrieben. Übersichtshalber werden hier nur die wichtigsten Gleichungen nochmal wiedergegeben – mit der Nummerierung aus diesen Abschnitten. Ziel ist die Berechnung des Felderwartungswertes $\langle \phi(x) \rangle$ vor dem Hintergrund des Mean-Field-Profiles $\phi_0(z)$ in Ein-Schleifen-Ordnung, wobei der Erwartungswert der Fluktuationen $\langle \varphi(x) \rangle$ in dieser Ordnung mit $\bar{\varphi}_1(x)$ bezeichnet wird:

$$\langle \phi(x) \rangle = \phi_0(z) + \bar{\varphi}_1(x). \quad (3.27)$$

Die Voraussetzungen für die Herleitung der effektiven Feldgleichung der Fluktuationen

$$\mathbb{K}\bar{\varphi}_1(x) + \frac{g_0}{2}\mathbb{K}_{xx}^{-1}\phi_0(x) = 0 \quad (3.29)$$

und des Fluktuationsoperators

$$\mathbb{K} = -\Delta - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0(x)^2 \quad (3.30)$$

wurden in 3.3.1 so formuliert, dass diese Gleichungen gleichermaßen die Grundlage für die Beschreibung der fixierten Grenzfläche bilden. Somit stellt (3.29) auch hier die zu lösende Differentialgleichung dar, die die Fluktuationen um das MFP in Ein-Schleifen-Ordnung liefert.

Um nun die Randbedingungen in die Theorie einzubringen, wird die Spektraldarstellung des Fluktuationsoperators \mathbb{K} und seines Inversen \mathbb{K}^{-1} auf dem Raum der den Randbedingungen genügenden Funktionen ermittelt. Dazu ist die Eigenwertgleichung (3.32) unter den gegebenen Randbedingungen zu lösen. Per Separationsansatz werden daraus wieder zwei Eigenwertgleichungen für den transversalen Anteil $-\Delta^{(D-1)}$ und den longitudinalen Anteil \mathbb{K} des Fluktuationsoperators.

Die normierten Lösungen der transversalen Eigenwertgleichung

$$-\Delta^{(D-1)}f_{\vec{n}}(\vec{x}) = \lambda_{\vec{n}}f_{\vec{n}}(\vec{x}) \quad (3.41)$$

4. Die fixierte Grenzfläche

für auf dem Rand verschwindende Fluktuationen sind aus der Quantenmechanik eines Teilchens im unendlich hohen Potentialtopf der Seitenlänge L bekannt:

$$f_{\vec{n}}(\vec{x}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{D-1}{2}} \prod_{i=1}^{D-1} \sin\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right), \quad (4.2)$$

wobei

$$\vec{n} \in \mathbb{N}^{D-1}, n_i \neq 0 \quad \forall i \in \{1, \dots, D-1\}$$

und $\vec{x} \in [0, L]^{D-1}$ mit den zugehörigen Eigenwerten

$$\lambda_{\vec{n}} = \vec{n}^2 \frac{\pi^2}{L^2}.$$

Die Funktionen $f_{\vec{n}}$ werden von nun an als Transversalmoden des Systems bezeichnet. Aufgrund der Tatsache, dass der Eigenwert $\lambda_{\vec{0}} = 0$ nicht existiert, besitzt der Fluktuationsoperator \mathbb{K} keine Nullmode.

Da sich für den longitudinalen Anteil $\tilde{\mathbb{K}}$ des Fluktuationsoperators keine Veränderung zu Abschnitt 3.3.3 ergibt, lässt sich das Spektrum des Fluktuationsoperators direkt durch Produkte der longitudinalen Eigenfunktionen (3.47) und der transversalen Eigenfunktionen (4.2) angeben. Der Index \vec{n} kennzeichnet dabei die Transversal-, χ die Longitudinalmode des Fluktuationsoperators:

$$\Psi_{\vec{n}\chi_0}(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{D-1}{2}} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right) \right] \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right), \quad (4.3a)$$

$$\Psi_{\vec{n}\chi_1}(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{D-1}{2}} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right) \right] \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right), \quad (4.3b)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{\vec{n}\chi_{c,p}}(x) &= \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{D-1}{2}} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right) \right] \mathcal{N}_p e^{ipz} \\ &\cdot \left[2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + 3im_0p \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \end{aligned} \quad (4.3c)$$

mit

$$\mathcal{N}_p = [2\pi(4p^4 + 5m_0^2p^2 + m_0^4)]^{-\frac{1}{2}}$$

und

$$p \in \mathbb{R}.$$

Die zugehörigen Eigenwerte sind

$$\lambda_{\vec{n}\chi_0} = \frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} \quad \text{zu (4.3a),}$$

$$\lambda_{\vec{n}\chi_1} = \frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + \frac{3m_0^2}{4} \quad \text{zu (4.3b),}$$

$$\lambda_{\vec{n}\chi_{c,p}} = \frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2 \quad \text{zu (4.3c).}$$

Damit kann der inverse Fluktuationsoperator in Spektraldarstellung

$$\mathbb{K}_{xy}^{-1} = \sum_{\lambda}^f \frac{1}{\lambda} \Psi_{\lambda}(x) \Psi_{\lambda}^*(y) \quad (3.33)$$

angegeben werden. Da die Feldgleichung (3.29) nur von \mathbb{K}_{xx}^{-1} abhängt, genügt es den Operator für $y = x$ niederzuschreiben:

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{xx}^{-1} &= \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin^2 \left(\frac{n_i \pi}{L} x_i \right) \right] \\ &\cdot \left\{ \frac{L^2}{\bar{n}^2 \pi^2} \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \right. \\ &\quad + \frac{1}{\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2} + \frac{3m_0^2}{4}} \frac{3m_0}{4} \tanh^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \\ &\quad \left. + \int dp \frac{1}{\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} |g_{\chi_{c,p}}(z)|^2 \right\} \end{aligned} \quad (4.4)$$

mit $g_{\chi_{c,p}}(z)$ aus (3.47c). Die Schreibweise $n_i > 0 \forall i$ steht für $n_i > 0 \forall i \in \{1, \dots, D-1\}$. Im Gegensatz zum Fluktuationsoperator \mathbb{K}' bei periodischen Randbedingungen (vgl. (3.49)) sind in diesem Fall noch explizite Abhängigkeiten von den transversalen Koordinaten \vec{x} enthalten. Dies ist eine direkte Folge der Fixierung der Grenzfläche durch Randbedingungen: Je nachdem wie weit vom Systemrand entfernt die Grenzfläche betrachtet wird, sind unterschiedliche Fluktuationen derselbigen zugelassen.

Es bleibt zu bemerken, dass in (4.4) die antisymmetrischen Randbedingungen in longitudinaler Richtung nicht explizit eingegangen sind. Diese könnten nur dann in der Darstellung des Operators berücksichtigt werden, wenn die Eigenwertgleichung des longitudinalen Anteils auf dem Raum der Funktionen, die antisymmetrische Randwerte für $z \rightarrow \pm\infty$ anstreben, gelöst wird. Letztendlich wird sich aber zeigen, dass durch die Inhomogenität der Feldgleichung (3.29) nur in z -Richtung antisymmetrische Lösungen zugelassen werden.

Der Ausdruck in der geschweiften Klammer von (4.4) wird im weiteren Verlauf mit $M_{\vec{n}}(z)$ bezeichnet, also

$$\mathbb{K}_{xx}^{-1} = \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin^2 \left(\frac{n_i \pi}{L} x_i \right) \right] M_{\vec{n}}(z). \quad (4.5)$$

Um den Ausdruck etwas handlicher zu gestalten, wird zuerst $|g_{\chi_{c,p}}(z)|^2$ berechnet:

$$\begin{aligned} |g_{\chi_{c,p}}(z)|^2 &= \mathcal{N}_p^2 \left\{ 4p^4 + 2m_0^2 p^2 + \frac{m_0^4}{4} + \frac{9}{4} m_0^4 \tanh^4 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \right. \\ &\quad \left. + \left[3m_0^2 p^2 - \frac{3}{2} m_0^4 \right] \tanh^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \right\}. \end{aligned}$$

4. Die fixierte Grenzfläche

Nach dem Einsetzen und Ausnutzen der Relation

$$\tanh^2(x) = 1 - \operatorname{sech}^2(x) \quad (4.6)$$

lässt sich $M_{\vec{n}}(z)$ in die übersichtlichere Form

$$M_{\vec{n}}(z) = M_{\vec{n}}^{(0)} + M_{\vec{n}}^{(1)} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + M_{\vec{n}}^{(2)} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad (4.7)$$

bringen. Die Ausdrücke für die Koeffizienten $M_{\vec{n}}^{(i)}$ lassen sich dann ablesen und lauten:

$$\begin{aligned} M_{\vec{n}}^{(0)} &= \int dp \frac{\mathcal{N}_p^2}{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \left[4p^4 + 2m_0^2p^2 + \frac{m_0^4}{4} + \frac{9}{4}m_0^4 + 3m_0^2p^2 - \frac{3}{2}m_0^4 \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dp \frac{1}{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

$$M_{\vec{n}}^{(1)} = \frac{1}{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + \frac{3m_0^2}{4}} \frac{3m_0}{4} - \int dp \frac{\mathcal{N}_p^2}{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} [6m_0^4 + 3m_0^2p^2], \quad (4.9)$$

$$M_{\vec{n}}^{(2)} = \frac{3m_0}{8} \frac{L^2}{n^2\pi^2} - \frac{1}{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + \frac{3m_0^2}{4}} \frac{3m_0}{4} + \int dp \frac{\mathcal{N}_p^2}{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \frac{9}{4}m_0^4. \quad (4.10)$$

Die Berechnung der hier auftretenden Integrale ist der Übersicht halber in den Anhang C.1 verschoben. Die Ergebnisse (C.1), (C.2) und (C.3) lauten:

$$M_{\vec{n}}^{(0)} = \frac{1}{2\sqrt{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2}}, \quad (4.11)$$

$$M_{\vec{n}}^{(1)} = \frac{m_0}{2\left(\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2}\right)} + \frac{1}{4\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \left\{ \frac{3m_0^2}{2\sqrt{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2}} \left[1 - \frac{m_0^2}{\left(\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2}\right)} \right] - 4m_0 \right\}, \quad (4.12)$$

$$M_{\vec{n}}^{(2)} = \frac{1}{4\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \frac{9}{8\sqrt{\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2} + m_0^2}} \frac{m_0^4}{\left(\frac{\vec{n}^2\pi^2}{L^2}\right)}. \quad (4.13)$$

Die Differentialgleichung (3.29) hat mit $M_{\vec{n}}(z)$ die Form

$$\mathbb{K}\bar{\varphi}_1(x) + \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin^2\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right) \right] M_{\vec{n}}(z)\phi_0(z) = 0. \quad (4.14)$$

Im Unterschied zur Feldgleichung bei periodischen Randbedingungen (3.50) ist die Inhomogenität dieser partiellen Differentialgleichung explizit von den transversalen Koordinaten \vec{x} abhängig.

4.2.1. Die Feldgleichung in der Systemmitte

Eine Idee, die Feldgleichung zu vereinfachen, ist die Betrachtung des Grenzflächenprofils auf eine Transversalkoordinate $\vec{x} = \text{const.}$ zu beschränken. Eigenschaften der Grenzfläche, wie die Grenzflächendicke, ließen sich so in Punkten des Systemquerschnitts berechnen, die möglichst unabhängig von Randeffekten sind. Die Mitte des Systemquerschnitts

$$x_i = \frac{L}{2}$$

ist von den Rändern des Systems am weitesten entfernt und eine Lösung der Feldgleichung sollte dort die geringsten Randeffekte aufweisen.

Mit

$$\sin^2\left(\frac{n_i \pi L}{2}\right) = \begin{cases} 0, & \text{falls } n_i \text{ gerade,} \\ 1, & \text{falls } n_i = 2l_i + 1, l_i \in \mathbb{N} \end{cases} \quad (4.15)$$

wird (4.14) zu

$$\mathbb{K}\bar{\varphi}_1(x)|_{x_i=\frac{L}{2}} + \frac{g_0}{2} \sum_{l_i \in \mathbb{N}} M_{(2l_i+1)_i}(z)\phi_0(z) = 0. \quad (4.16)$$

Die Notation $(2l_i + 1)_i$ steht hier für den Vektor \vec{n} mit ausschließlich ungeraden Komponenten. Damit sind zwar die transversalen Koordinaten in der Inhomogenität, d.h. dem zweiten Term, eliminiert. Die Form des ersten Terms

$$\mathbb{K}\bar{\varphi}_1(x)|_{x_i=\frac{L}{2}}$$

muss aber noch bestimmt werden. Die Problematik besteht nun darin, Aussagen über die Ableitungen des Feldes in der Feldmitte

$$\sum_{i=1}^{D-1} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \bar{\varphi}_1(x) \Big|_{x_i=\frac{L}{2}}$$

zu finden, die es ermöglichen das Problem zu vereinfachen. Aus der Tatsache, dass durch die transversalen Randbedingungen vorgegeben ist, dass die Fluktuationen auf dem Rand verschwinden, ließen sich aber keine weiteren Einschränkungen an die Ableitungen des Feldes in der Systemmitte finden. Dieser Ansatz wird daher im Folgenden nicht mehr weiterverfolgt.

4.2.2. Die transversal entkoppelte Feldgleichung

Nach [Dre10] ist ein weiterer Ansatz zur Lösung der Feldgleichung dadurch gegeben, die Fluktuationen $\bar{\varphi}_1(x)$ und die Terme der Inhomogenität in (4.14) nach den Elementen des Orthonormalsystems (4.2) zu entwickeln, um die Feldgleichung in den Transversalmoden zu entkoppeln. Dazu werden die Koeffizienten der Transversalmoden mit $\Phi_{\vec{m}}(z)$ bezeichnet:

$$\bar{\varphi}_1(x) = \sum_{m_i > 0 \forall i} \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{D-1}{2}} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin\left(\frac{m_i \pi}{L} x_i\right) \right] \Phi_{\vec{m}}(z). \quad (4.17)$$

4. Die fixierte Grenzfläche

Außerdem sind noch die Funktionen

$$\sin^2\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right) = \sum_{m_i>0} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m_i\pi}{L}x_i\right) A_{n_i m_i} \quad (4.18)$$

mit Hilfe der Entwicklungskoeffizienten

$$A_{n_i m_i} = \int_0^L dx_i \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m_i\pi}{L}x_i\right) \sin^2\left(\frac{n_i\pi}{L}x_i\right) \quad (4.19)$$

darstellbar. Für die Bestimmung der Koeffizienten $A_{n_i m_i}$ nach (4.19) muss das folgende Integral ausgewertet werden:

$$\begin{aligned} & \int_0^L dx \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \\ &= \int_0^L dx \left[\frac{1}{2} \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) - \frac{1}{4} \sin\left(\frac{m+2n}{L}\pi x\right) - \frac{1}{4} \sin\left(\frac{m-2n}{L}\pi x\right) \right] \\ &= \frac{L}{4\pi} \left\{ -\frac{2}{m} [\cos(m\pi) - 1] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{m+2n} [\cos((m+2n)\pi) - 1] \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{m-2n} [\cos((m-2n)\pi) - 1] \right\}. \end{aligned}$$

Die erste Gleichheit ist schnell mit Hilfe der Exponentialdarstellung des Sinus gezeigt. Damit ist letztendlich

$$A_{n_i m_i} = \begin{cases} 0, & \text{falls } m_i \text{ gerade,} \\ \frac{\sqrt{2L}}{\pi} \frac{4n_i^2}{m_i(4n_i^2 - m_i^2)}, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.20)$$

Somit erhält man die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \mathbb{K} \sum_{m_i>0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sin\left(\frac{m_i\pi}{L}x_i\right) \right] \Phi_{\vec{m}}(z) \\ + \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i>0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} \sum_{m_i>0} \sin\left(\frac{m_i\pi}{L}x_i\right) A_{n_i m_i} \right] M_{\vec{n}}(z) \phi_0(z) = 0. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Nun ist die komplette Differentialgleichung im Orthonormalsystem der transversalen Fluktuationsmoden entwickelt und muss für jede Mode separat erfüllt werden. Nach Einsetzen der Eigenwerte des transversalen Anteils des Fluktuationsoperators ist dann

$$\boxed{\begin{aligned} & \left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i\pi}{L}\right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \Phi_{\vec{m}}(z) \\ & + \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i>0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] M_{\vec{n}}(z) \phi_0(z) = 0. \end{aligned}} \quad (4.22)$$

Die Feldgleichung (4.14) ist also nach Entkoppelung der Transversalmoden in eine gewöhnliche, lineare, inhomogene Differentialgleichung mit variablen Koeffizienten übergegangen. Um nun die Lösung von (4.14) angeben zu können, ist (4.22) für $\Phi_{\vec{m}}(z)$ zu lösen und die Reihe in (4.17) auszuwerten.

4.2.3. Lösungen der homogenen entkoppelten Feldgleichung

Da (4.22) eine lineare, inhomogene Differentialgleichung ist, besteht ihre allgemeine Lösung aus der Summe der allgemeinen Lösung der zugehörigen homogenen Differentialgleichung und einer speziellen Lösung der inhomogenen Differentialgleichung. Die homogene Differentialgleichung

$$\left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \Phi_{\vec{m}}(z) = 0 \quad (4.23)$$

lässt sich aber umschreiben zu

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \Phi_{\vec{m}}(z) = - \sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 \Phi_{\vec{m}}(z). \quad (4.24)$$

Letzteres ist nichts anderes als die Eigenwertgleichung des longitudinalen Operators $\tilde{\mathbb{K}}$ aus (3.42), dessen Spektrum in den Gleichungen (3.47) angegeben ist. Mit

$$- \sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 < 0$$

würde aber ein negativer Eigenwert benötigt werden, der im Spektrum dieses Operators nicht auftritt. Diese Aussage ist äquivalent zu der Tatsache, dass der Fluktationsoperator \mathbb{K} keine Nullmode besitzt:

$$\mathbb{K}\varphi \neq 0;$$

wobei aber gerade

$$\mathbb{K}\bar{\varphi}_1 = 0$$

der noch nicht entkoppelten homogenen Differentialgleichung entspricht.

Obige Überlegungen greifen jedoch nur, wenn $\Phi_{\vec{m}}(z)$ ein Element eines Hilbertraumes, d.h. insbesondere normierbar (bzw. quadratintegrierbar) ist und im Unendlichen hinreichend rasch gegen Null konvergiert. In diesem Fall lässt sich $\Phi_{\vec{m}}(z)$ durch Eigenfunktionen des Fluktationsoperators ausdrücken. Durch die in 3.3.1 formulierten longitudinalen Randbedingungen ist aber nicht gefordert, dass $\bar{\varphi}_1(x)$ und damit auch $\Phi_{\vec{m}}(z)$ für $z \rightarrow \pm\infty$ verschwinden, sondern lediglich gegen antisymmetrische Grenzwerte konvergieren. Falls also derartige nichtnormierbare Lösungen von (4.23) existieren, müssen diese berücksichtigt werden. Problematisch wäre das insofern, als die Berechnung des Erwartungswertes der Fluktationen $\bar{\varphi}_1$ durch das Graphenintegral und durch die Lösung der Feldgleichung äquivalent sein sollten. Durch das Auftreten von zulässigen Lösungen

4. Die fixierte Grenzfläche

der homogenen linearen Differentialgleichung würde aber ein Freiheitsgrad erzeugt werden, der in der Graphenberechnung nicht auftritt. Denn das Integral dort hat prinzipiell – abgesehen von der Wahl eines Renormierungsschemas – ein definitives Ergebnis und lässt kein beliebiges Hinzuaddieren homogener Lösungen der Differentialgleichung zu. Im Allgemeinen ist dann davon auszugehen, dass eine aus dem Profil berechnete Größe wie die Grenzflächendicke mit diesem neuen Freiheitsgrad variieren würde. Eine Berechnung des Grenzflächenprofils anhand der effektiven Feldgleichung hätte dann weniger Vorhersagekraft als die Berechnung des Graphen.

Desweiteren ist auch nicht klar, was die physikalische Interpretation der homogenen Feldgleichung für die Fluktuationen sein soll. Gleichung (4.23) entsteht aus der klassischen Feldgleichung einer Feldtheorie „freier“ Fluktuationen (abgeleitet aus (3.25)) mit dem Hamiltonian

$$H_{\text{ff}}[\varphi] = \int d^D x \int d^D y \frac{1}{2} \varphi(x) \mathbb{K}_{xy} \varphi(y).$$

Nun sind aber die Fluktuationen φ als Fluktuationen um das Mean-Field-Profil ϕ_0 (also das klassische Profil) definiert und treten klassisch garnicht auf. Eine normierbare, nichttriviale Lösung der homogenen Differentialgleichung dürfte es demnach nicht geben.

Nach dem Satz von Peano besitzt die Differentialgleichung aber zumindest lokale Lösungen für jedes Anfangswertproblem und somit nichttriviale Lösungen. Eine weitere Untersuchung ist also unumgänglich. Mit Hilfe des Computer-Algebra-Systems Maple [Map11] lässt sich eine Lösung von (4.23) finden. Mit den Nebenbedingungen

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = -\Phi_{\vec{m}}(-z) \quad \text{und} \quad \Phi_{\vec{m}}(0) = 0,$$

um eine im Ursprung reguläre Lösung zu erhalten, lautet die Lösung

$$\begin{aligned} \Phi_{\vec{m}}^{(\text{hom})}(z) = & \frac{1}{\cosh(m_0 z) + 1} \left[36m_0^4 + 42n_{\vec{m}}m_0^2 + 48n_{\vec{m}} \cosh(m_0 z)m_0^2 \right. \\ & \left. + 6n_{\vec{m}} \cosh(2m_0 z)m_0^2 + 24n_{\vec{m}}^2 + 32n_{\vec{m}}^2 \cosh(m_0 z) + 8n_{\vec{m}}^2 \cosh(2m_0 z) \right] \\ & \cdot \left\{ b \left[\tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) + 1 \right]^{\frac{\sqrt{m_0^2 + n_{\vec{m}}}}{m_0}} \left[\tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) - 1 \right]^{-\frac{\sqrt{m_0^2 + n_{\vec{m}}}}{m_0}} \right. \\ & \cdot \left[3 \tanh^2\left(\frac{m_0 z}{2}\right) m_0^2 + 3m_0^2 - 6\sqrt{m_0^2 + n_{\vec{m}}} \tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) m_0 \right. \\ & \left. \left. + 4n_{\vec{m}} \right] \frac{\sqrt{\frac{n_{\vec{m}}^2}{m_0^2} (9m_0^6 + 33n_{\vec{m}}m_0^4 + 40n_{\vec{m}}^2 m_0^2 + 16n_{\vec{m}}^3)}{m_0^{10}} m_0^4 \sqrt{m_0^4 + n_{\vec{m}}m_0^2}}}{2(n_{\vec{m}}(3m_0^4 + 7n_{\vec{m}}m_0^2 + 4n_{\vec{m}}^2))} \right. \\ & \left. \cdot \left[3 \tanh^2\left(\frac{m_0 z}{2}\right) m_0^2 + 3m_0^2 + 6\sqrt{m_0^2 + n_{\vec{m}}} \tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) m_0 \right. \right. \\ & \left. \left. + 4n_{\vec{m}} \right] \frac{\sqrt{\frac{n_{\vec{m}}^2}{m_0^2} (9m_0^6 + 33n_{\vec{m}}m_0^4 + 40n_{\vec{m}}^2 m_0^2 + 16n_{\vec{m}}^3)}{m_0^{10}} m_0^4 \sqrt{m_0^4 + n_{\vec{m}}m_0^2}}}{2(n_{\vec{m}}(3m_0^4 + 7n_{\vec{m}}m_0^2 + 4n_{\vec{m}}^2))} \right. \\ & \left. + 4n_{\vec{m}} \right] \end{aligned}$$

4.2. Die Feldgleichung

$$\begin{aligned}
& -b(-1)^{-\frac{2\sqrt{m_0^2+n_{\vec{m}}}}{m_0}} (3m_0^2 + 4n_{\vec{m}}) - \sqrt{\frac{\frac{n_{\vec{m}}^2}{m_0^2} (m_0^2+n_{\vec{m}}) (3m_0^2+4n_{\vec{m}})^2}{m_0^{10}} - m_0^4 \sqrt{m_0^2 (m_0^2+n_{\vec{m}})}}}{2(n_{\vec{m}} (m_0^2+n_{\vec{m}}) (3m_0^2+4n_{\vec{m}}))} \\
& \cdot (-3m_0^2 - 4n_{\vec{m}}) \sqrt{\frac{\frac{n_{\vec{m}}^2}{m_0^2} (m_0^2+n_{\vec{m}}) (3m_0^2+4n_{\vec{m}})^2}{m_0^{10}} - m_0^4 \sqrt{m_0^2 (m_0^2+n_{\vec{m}})}}}{2(n_{\vec{m}} (m_0^2+n_{\vec{m}}) (3m_0^2+4n_{\vec{m}}))} \\
& \cdot \left[\tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) - 1 \right]^{\frac{\sqrt{m_0^2+n_{\vec{m}}}}{m_0}} \left[\tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) + 1 \right]^{-\frac{\sqrt{m_0^2+n_{\vec{m}}}}{m_0}} \\
& \cdot \left[6m_0 \sqrt{m_0^2 + n_{\vec{m}}} \tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) - 3m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0 z}{2}\right) - 3m_0^2 \right. \\
& \quad \left. - 4n_{\vec{m}} \right] - \sqrt{\frac{\frac{n_{\vec{m}}^2}{m_0^2} (9m_0^6 + 33n_{\vec{m}} m_0^4 + 40n_{\vec{m}}^2 m_0^2 + 16n_{\vec{m}}^3)}{m_0^{10}} - m_0^4 \sqrt{m_0^4 + n_{\vec{m}} m_0^2}}}{2(n_{\vec{m}} (3m_0^4 + 7n_{\vec{m}} m_0^2 + 4n_{\vec{m}}^2))} \\
& \cdot \left[3 \tanh^2\left(\frac{m_0 z}{2}\right) m_0^2 + 3m_0^2 + 6\sqrt{m_0^2 + n_{\vec{m}}} \tanh\left(\frac{m_0 z}{2}\right) m_0 \right. \\
& \quad \left. + 4n_{\vec{m}} \right] \sqrt{\frac{\frac{n_{\vec{m}}^2}{m_0^2} (9m_0^6 + 33n_{\vec{m}} m_0^4 + 40n_{\vec{m}}^2 m_0^2 + 16n_{\vec{m}}^3)}{m_0^{10}} - m_0^4 \sqrt{m_0^4 + n_{\vec{m}} m_0^2}}}{2(n_{\vec{m}} (3m_0^4 + 7n_{\vec{m}} m_0^2 + 4n_{\vec{m}}^2))} \Bigg\}.
\end{aligned}$$

Dabei ist b ein freier Parameter und

$$n_{\vec{m}} = \sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2$$

eine Abkürzung. In Mathematica [Mat10] wurde das Ergebnis numerisch überprüft. Dazu wurden für die freien Parameter und die Variable z je fünfzig zufallsgenerierte Werte in die linke Seite der Gleichung (4.23) mit der Lösung eingesetzt und so bestätigt, dass dies Null ergibt.

Genauso wurde verfahren, um das Grenzverhalten dieser Lösung für $z \rightarrow \pm\infty$ zu bestimmen. In allen Fällen ist die Lösung unbeschränkt und konvergiert in einer Richtung der komplexen Ebene uneigentlich gegen Unendlich. Im Übrigen zeigt auch die von Maple ohne Nebenbedingungen berechnete, hier nicht wiedergegebene Lösung dieses Verhalten. Letztendlich ist also davon auszugehen, dass die Lösungen der homogenen Differentialgleichung (4.23) nicht gegen endliche Grenzwerte für $z \rightarrow \pm\infty$ konvergieren und damit nicht zu der Klasse Funktionen gehören, die als Fluktuationen zugelassen werden. Die Lösung der homogenen Differentialgleichung ist also unter den geforderten longitudinalen Randbedingungen trivial

$$\Phi_{\vec{m}}^{(\text{hom})}(z) = 0 \tag{4.25}$$

und die Lösung der inhomogenen Feldgleichung somit eindeutig.

4. Die fixierte Grenzfläche

Daraus lässt sich im Übrigen direkt folgern, dass $\Phi_{\vec{m}}$ nur für \vec{m} mit ausschließlich ungeraden Einträgen von Null verschieden ist. Das folgt aus der Tatsache, dass die Inhomogenität der Gleichung (4.22) aufgrund der Faktoren $A_{n_i m_i}$ verschwindet, sobald ein m_i gerade ist.

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

Der Versuch, die Lösung von (4.22) (ähnlich wie bei Köpf) zu raten, indem $\Phi_{\vec{m}}$ als Summe von Produkten aus Sekans Hyperbolicus und Tangens Hyperbolicus angesetzt wird, führt nicht zum Ziel. Um aber dennoch ohne Rückgriff auf numerische Methoden eine Lösung zu finden, besteht die Möglichkeit, die Differentialgleichung auch in den longitudinalen Moden zu entkoppeln: Denn in (4.22) entspricht

$$-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) = \tilde{\mathbb{K}}$$

dem longitudinalen Anteil des Fluktationsoperators \mathbb{K} , dessen Spektrum (3.47) bekannt ist. Werden nun alle auftretenden Funktionen von z als Summe und Integral der Eigenfunktionen g_{χ_i} dargestellt, kann die Gleichung mittels der Orthogonalität dieser Funktionen entkoppelt werden. Genau das wurde ja schon für die Herleitung von (4.22) aus (4.14) mit Hilfe des Orthonormalsystems der Transversalmoden getan. Da zudem der Differentialoperator $\tilde{\mathbb{K}}$ in der Spektraldarstellung betrachtet wird, geht die Differentialgleichung in eine algebraische Gleichung für die Entwicklungskoeffizienten über.

Dabei ist aber zu bedenken, dass der Spektralsatz (nach [Mün06]), der dieser Entwicklung zugrunde liegt, nur eine Aussage über die Entwickelbarkeit quadratintegrierbarer Funktionen nach den (eigentlichen und uneigentlichen) Eigenfunktionen eines selbstadjungierten Operators macht. In der Inhomogenität von (4.22) tritt mit dem Mean-Field-Profil ϕ_0 im Term $\propto M_{\vec{n}}^{(0)} \phi_0$ aber eine Funktion auf, welche explizit nicht quadratintegrierbar ist:

$$\phi_0 \notin L^2.$$

Außerdem sind die Randbedingungen für $z \rightarrow \pm\infty$ so gewählt, dass auch $\Phi_{\vec{m}}(z)$ im Allgemeinen nicht gegen Null konvergiert und damit ebenfalls nicht integrierbar ist. Eine vollständige Entwicklung der Feldgleichung nach den longitudinalen Moden des Fluktationsoperators ist also nicht ohne weiteres gerechtfertigt.

Das Problem der Nichtintegrierbarkeit dieser Funktionen wird bei der Berechnung der Entwicklungskoeffizienten offensichtlich. Denn die Koeffizienten c_n der Entwicklung einer Funktion $f(z)$,

$$f(z) = \sum_n c_n g_n(z),$$

sind durch das Skalarprodukt (\cdot, \cdot) der Funktion f und einer Funktion g_n des vollständigen Orthonormalsystems gegeben:

$$c_n = (g_n, f) = \int dz g_n^*(z) f(z).$$

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

Das letzte Integral wird aber im Allgemeinen nicht existieren, wenn die Funktion $f(z)$ nichtintegrierbar und $g_n(z)$ eine nichtintegrierbare, uneigentliche Eigenfunktion ist. Um die Entwicklung nach den Longitudinalmoden dennoch durchführen zu können, besteht einerseits die Möglichkeit, den nichtintegrierbaren Anteil von $\Phi_{\vec{m}}(z)$ zu erraten und in der Differentialgleichung zu eliminieren. Dieser Ansatz wird in Abschnitt 4.3.1 skizziert und gezeigt, dass er in der vorgeschlagenen Form nicht zum Ziel führt. Eine weitere Option ist den divergenten Koeffizienten der Entwicklung durch Regularisierung der Integrale einen endlichen Wert zuzuweisen. Darauf wird in Abschnitt 4.3.2 eingegangen.

4.3.1. Separation der Mean-Field-Korrektur

Um die Entwicklung des Terms proportional zu ϕ_0 in der Differentialgleichung zu umgehen, wird im Folgenden versucht, diesen mit Hilfe eines freien Parameters zu eliminieren. Dazu wird der folgende Ansatz gemacht: Motiviert durch Köpfs Ergebnis (3.52) wird angenommen, die Fluktuationen φ seien von der Form

$$\varphi(x) = \varphi_D(x) + C(\vec{x}) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right), \quad (4.26)$$

mit

$$\varphi_D(x) \xrightarrow{z \rightarrow \pm\infty} 0$$

und auf dem Systemrand $x_i \in \{0, L\}$ verschwindend und einer Funktion der transversalen Koordinaten $C(x_1, \dots, x_{D-1})$, die ebenfalls auf dem Rand Null wird. Die Fluktuationen sollen folglich so beschaffen sein, dass der nichtintegrierbare Anteil einer Korrektur der Grenzwerte des Mean-Field-Profiles entspricht. Es gilt also

$$\varphi(x) \xrightarrow{z \rightarrow \pm\infty} \pm C(\vec{x}).$$

Dieser Ansatz führt bei der Entwicklung der Fluktuationen nach den Transversalmoden (s. (4.17)) direkt auf die Form

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = \Phi_{D,\vec{m}}(z) + C_{\vec{m}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right). \quad (4.27)$$

$\Phi_{D,\vec{m}}$ beschreibt die integrierbaren „Verzerrungen“ der Profilform (mit dem Index D für „Distortion“), während der zweite Term der Verschiebung der Grenzwerte des Mean-Field-Profiles pro jeweiliger Transversalmode Rechnung trägt. Mit diesem Ansatz ergibt sich in (4.22) die Möglichkeit, die Entwicklungskoeffizienten $C_{\vec{m}}$ so zu wählen, dass sich die nichtintegrierbaren Terme gegenseitig aufheben. Anschließend lassen sich die restlichen Terme nach den Longitudinalmoden (3.47) entwickeln.

4. Die fixierte Grenzfläche

Ausnutzen der Beziehung (4.27) in der Feldgleichung (4.22) liefert

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \Phi_{D, \vec{m}}(z) \\
& + \left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] C_{\vec{m}} \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \\
& + \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] M_{\vec{n}}(z) \phi_0(z) = 0.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Außerdem ist

$$\begin{aligned}
& \left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \\
& = -m_0^2 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) + m_0^2 \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right).
\end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung von (4.7) lassen sich damit die nichtintegrierbaren Terme in (4.28) ablesen:

$$\tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \left\{ \sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 C_{\vec{m}} + m_0^2 C_{\vec{m}} + v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] M_{\vec{n}}^{(0)} \right\}.$$

Da $\Phi_{D, \vec{m}}$ nach Voraussetzung integrierbar ist, können durch die zweifache Ableitung

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \Phi_{D, \vec{m}}$$

keine weiteren Terme

$$\propto \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right)$$

in (4.28) erzeugt werden. Andernfalls müssten im Unendlichen verschwindende Stammfunktionen von $\tanh(m_0 z/2)$ existieren, was nicht mit der Tatsache vereinbar ist, dass $\tanh(m_0 z/2)$ für $z \rightarrow \pm\infty$ gegen ± 1 geht. Wenn aber in der Differentialgleichung (4.28) keine weiteren Terme proportional zum Tangens Hyperbolicus erzeugt werden können, muss der obige Klammersausdruck verschwinden:

$$\left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + m_0^2 \right] C_{\vec{m}} + v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] M_{\vec{n}}^{(0)} = 0.$$

Der Koeffizient $C_{\vec{m}}$ ist also

$$C_{\vec{m}} = -v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \frac{\sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] M_{\vec{n}}^{(0)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + m_0^2}. \tag{4.29}$$

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

Nach dem Verschwinden des Klammerausdrucks wird (4.28) zu

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \Phi_{D, \vec{m}}(z) \\
& - m_0^2 C_{\vec{m}} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \\
& + \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \\
& \cdot \left\{ M_{\vec{n}}^{(1)} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) + M_{\vec{n}}^{(2)} \operatorname{sech}^4 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \right\} \phi_0(z) = 0.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Alle in dieser Gleichung auftretenden Terme sind in den Longitudinalmoden entwickelbar und die Gleichung lässt sich in diesen entkoppeln. Die Fluktuationen lassen sich durch

$$\Phi_{D, \vec{m}}(z) = q_0^{\vec{m}} g_{\chi_0}(z) + q_1^{\vec{m}} g_{\chi_1}(z) + \int dp q_{c,p}^{\vec{m}} g_{\chi_{c,p}}(z)$$

darstellen. Nachdem die Gleichung entkoppelt ist, ergeben sich letztlich algebraische Gleichungen für die Entwicklungskoeffizienten $q_i^{\vec{m}}$.

Die Entkopplung der Differentialgleichung durch Entwicklung aller auftretenden Funktionen wird im nächsten Abschnitt vollständig durchgeführt; hier werden der Kürze wegen nur die Koeffizienten $q_i^{\vec{m}}$ und das Endergebnis für diesen Ansatz wiedergegeben, um aufzuzeigen, dass er zu Inkonsistenzen führt. Der erste Koeffizient lässt sich zu

$$q_0^{\vec{m}} = 0$$

bestimmen. Weiterhin ist

$$\begin{aligned}
q_1^{\vec{m}} = & - \frac{\sqrt{\frac{3m_0}{4} \frac{\pi}{4m_0}}}{\left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + \frac{3m_0^2}{4} \right]} \left\{ v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \right. \\
& \cdot \left. \left(\frac{m_0^2}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + m_0^2} M_{\vec{n}}^{(0)} + M_{\vec{n}}^{(1)} + \frac{1}{2} M_{\vec{n}}^{(2)} \right) \right\}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
q_{c,p}^{\vec{m}} = & \frac{i2\pi \mathcal{N}_p \frac{p^2(m_0^2+p^2)}{m_0^3} \operatorname{csch} \left(\pi \frac{p}{m_0} \right)}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + m_0^2 + p^2} \left\{ v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \right. \\
& \cdot \left. \left(\frac{m_0^2}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + m_0^2} M_{\vec{n}}^{(0)} + M_{\vec{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} \frac{m_0^2 + p^2}{m_0^2} M_{\vec{n}}^{(2)} \right) \right\}
\end{aligned}$$

mit

$$\operatorname{csch}(x) = \frac{1}{\sinh(x)}.$$

4. Die fixierte Grenzfläche

Das Integral in der Entwicklung von $\Phi_{D,\bar{m}}(z)$ lässt sich dann in einer längeren Rechnung mit Hilfe des Residuensatzes berechnen und das Ergebnis lautet:

$$\begin{aligned}
\int dp q_{c,p}^{\bar{m}} g_{\chi_{c,p}}(z) = & -\frac{1}{4m_0^4} \left\{ \frac{m_0}{2} \beta_{\bar{m}} \varepsilon(z) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right. \\
& + m_0 \left[\alpha_{\bar{m}} - \left(\frac{1}{4} + \eta_{\bar{m}}\right) \beta_{\bar{m}} + \frac{\frac{1}{4}\alpha_{\bar{m}} - \frac{1}{16}\beta_{\bar{m}}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} \right] \varepsilon(z) \\
& \cdot \left[\frac{\pi e^{-m_0|z|\sqrt{\eta_{\bar{m}}}}}{\sin(\pi\sqrt{\eta_{\bar{m}}})} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k k}{\eta_{\bar{m}} - k^2} e^{-m_0|z|k} \right] \\
& + m_0 \frac{-\frac{1}{4}\alpha_{\bar{m}} + \frac{1}{16}\beta_{\bar{m}}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} \varepsilon(z) \left[\pi e^{-\frac{m_0|z|}{2}} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k k}{\frac{1}{4} - k^2} e^{-m_0|z|k} \right] \\
& + \left[2m_0^2 \alpha_{\bar{m}} - 2m_0^2 \left(\eta_{\bar{m}} + \frac{1}{4}\right) \beta_{\bar{m}} + \beta_{\bar{m}} \gamma(z) \right] \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\
& + m_0^2 \beta_{\bar{m}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\
& + \left[-2m_0^2 \alpha_{\bar{m}} \left(\frac{1}{4} \frac{\eta_{\bar{m}}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} + \eta_{\bar{m}}\right) + 2m_0^2 \beta_{\bar{m}} \right. \\
& \cdot \left. \left(\frac{1}{8} + \frac{1}{4}\eta_{\bar{m}} + \eta_{\bar{m}}^2 - \frac{1}{16} \frac{\eta_{\bar{m}}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}}\right) + \alpha_{\bar{m}} \frac{\eta_{\bar{m}}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} \gamma(z) \right. \\
& \left. - \beta_{\bar{m}} \left(\frac{1}{4} \frac{\eta_{\bar{m}}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} + \eta_{\bar{m}}\right) \gamma(z) \right] \\
& \cdot \operatorname{sgn}(z) \left[-\frac{\pi e^{-m_0|z|\sqrt{\eta_{\bar{m}}}}}{\sqrt{\eta_{\bar{m}}} \sin(\pi\sqrt{\eta_{\bar{m}}})} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\eta_{\bar{m}} - k^2} e^{-m_0|z|k} \right] \\
& + \frac{\frac{1}{8}m_0^2 \alpha_{\bar{m}} - \frac{1}{32}m_0^2 \beta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}\alpha_{\bar{m}} \gamma(z) + \frac{1}{16}\beta_{\bar{m}} \gamma(z)}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} \\
& \left. \cdot \operatorname{sgn}(z) \left[-2\pi e^{-\frac{m_0|z|}{2}} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\frac{1}{4} - k^2} e^{-m_0|z|k} \right] \right\}. \quad (4.31)
\end{aligned}$$

Dabei wurden die Definitionen

$$\begin{aligned}
\alpha_{\bar{m}} := & v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \\
& \cdot \left(\frac{m_0^2}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + m_0^2} M_{\bar{n}}^{(0)} + M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} M_{\bar{n}}^{(2)} \right) \quad (4.32a)
\end{aligned}$$

$$\beta_{\bar{m}} := v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \frac{2}{3} M_{\bar{n}}^{(2)} \quad (4.32b)$$

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

$$\gamma(z) := \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right), \quad (4.32c)$$

$$\varepsilon(z) := 3m_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad (4.32d)$$

$$\eta_{\vec{m}} := \sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L m_0}\right)^2 + 1 \quad (4.32e)$$

verwendet.

Nach den Grundannahmen des gewählten Ansatzes (4.27), müsste dieser Ausdruck, da er ja Teil von $\Phi_{D,\vec{m}}$ ist, für $|z| \rightarrow \infty$ verschwinden. Der Term in der fünften Zeile verhindert dies aber, da er proportional zu Tangens Hyperbolicus ist. Gerade solche tanh-Abhängigkeiten sollten im gemachten Ansatz separiert werden und dürften im Falle einer selbstkonsistenten Lösung nicht mehr auftreten. Da alle anderen Terme im Unendlichen verschwinden, ließe sich der Ansatz nur retten, wenn der Vorfaktor des tanh-Terms ebenfalls gegen Null konvergiert. Jedoch gilt unter Ausnutzung von

$$\gamma(z) \rightarrow -m_0^2 \quad \text{für } |z| \rightarrow \infty$$

und der Definitionen von $\alpha_{\vec{m}}$, $\beta_{\vec{m}}$ und $\eta_{\vec{m}}$

$$\begin{aligned} \int dp a_{c,p}^{\vec{m}} g_{\chi_{c,p}}(z) &\xrightarrow{|z| \rightarrow \infty} -\frac{1}{4m_0^4} \left(2m_0^2 \alpha_{\vec{m}} - 2m_0^2 \left(\eta_{\vec{m}} + \frac{1}{4} \right) \beta_{\vec{m}} - m_0^2 \beta_{\vec{m}} \right) \\ &\propto \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \left\{ \frac{1}{\eta_{\vec{m}}} M_{\vec{n}}^{(0)} + M_{\vec{n}}^{(1)} + \left(\frac{1}{6} - \eta_{\vec{m}} \right) M_{\vec{n}}^{(2)} \right\}. \end{aligned}$$

Auf den ersten Blick gibt es keinen Grund anzunehmen, dass dieser Ausdruck allgemein verschwindet. Und tatsächlich lässt sich für den hier interessanten Spezialfall von $D = 3$ Dimensionen für beliebige, spezielle Werte der Parameter $L = m_0 = m_1 = m_2 = 1$ zeigen, dass der Ausdruck nicht verschwindet. Denn dann lautet die Reihe mit Hilfe von (4.11) bis (4.13) (die Vorfaktoren wurden ausgelassen)

$$\begin{aligned} \sum_{n_i > 0 \forall i} \frac{n_1^2 n_2^2}{(4n_1^2 - 1)(4n_2^2 - 1)} &\left\{ \frac{2}{\vec{n}^2 \pi^2} - \frac{4}{4\vec{n}^2 \pi^2 + 3} + \frac{1}{\sqrt{\vec{n}^2 \pi^2 + 1}} \right. \\ &\cdot \left. \left[\frac{1}{1 + 2\pi^2} + \frac{3}{2} \frac{1}{4\vec{n}^2 \pi^2 + 3} - \frac{1}{\vec{n}^2 \pi^2} \frac{\frac{39}{16} + \frac{9}{4}\pi^2}{4\vec{n}^2 \pi^2 + 3} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Sowohl der Vorfaktor, als auch die ersten beiden Terme in der geschweiften Klammer zusammen genommen sind größer als Null für alle \vec{n} mit echt positiven, natürlichen Komponenten. In der eckigen Klammer lassen sich die Terme auf den (positiven) Hauptnenner bringen, so dass der Zähler die Form

$$\vec{n}^2 \pi^2 (4\vec{n}^2 \pi^2 + 3) + \frac{3}{2} \vec{n}^2 \pi^2 (1 + 2\pi^2) - \left(\frac{39}{16} + \frac{9}{4}\pi^2 \right) (1 + 2\pi^2)$$

4. Die fixierte Grenzfläche

annimmt. Dies ist aber für alle \vec{n} größer als Null, da alle Terme die \vec{n} enthalten positiv sind und der Ausdruck für den kleinsten Wert von \vec{n}^2 , $\vec{n}^2 = 2$, bereits größer als Null ist. Der Wert der Reihe ist also echt größer als Null.

Letztendlich genügt der Ansatz (4.27) also nicht, um die nichtintegrierbaren Fluktuationen zu separieren und ist damit gescheitert. Aber auch wenn sich mit diesem Ansatz keine Lösung der Feldgleichung finden ließ, so verdeutlicht (4.31) zumindest eines: Da der Tangens Hyperbolicus im Ergebnis eines Integrals über die Eigenfunktion $g_{\chi_{c,p}}(z)$ an der Seite von integrierbaren Termen auftritt, muss es Koeffizienten geben, mit denen er sich durch die Eigenfunktionen des Operators $\tilde{\mathbb{K}}$ darstellen lässt. Gelingt es nun, eine derartige Darstellung des Tangens Hyperbolicus zu finden, ließe sich, ausgehend von der ursprünglichen transversal entkoppelten Feldgleichung (4.22), diese wiederum vollständig in den longitudinalen Moden entkoppeln. Der Unterschied zu dem hier gemachten Ansatz liegt im Wegfall der Notwendigkeit, den tanh-Term in der Differentialgleichung durch Annahmen zu eliminieren.

Eine Möglichkeit, die Entwicklung des Tangens Hyperbolicus explizit anzugeben, besteht darin die integrierbaren z -Abhängigkeiten in (4.31) im Orthonormalsystem (3.47) zu entwickeln und auf die linke Seite der Gleichung zu bringen. Aufgrund der Linearität des Integrals wäre damit eine Entwicklung gefunden. Der Rechenaufwand für diesen Weg wäre jedoch erheblich.

4.3.2. Regularisierung der Entwicklungskoeffizienten

In diesem Abschnitt wird nun versucht, die Koeffizienten der Entwicklung wie üblich über das Skalarprodukt mit einer Eigenfunktion zu berechnen. Es wird sich jedoch zeigen, dass einige der auftretenden Integrale – wie zu erwarten war – divergieren, weshalb sie regularisiert werden sollen. Dazu wird den Integralen ihr Cauchy-Hauptwert zugeordnet. Bei im Riemannschen Sinne existierenden Integralen entspricht der Hauptwert dem eigentlichen Integralwert. Divergente Integrale haben zudem oft einen endlichen Hauptwert; siehe auch [WW52]. Der Hauptwert eines uneigentlichen Integrals wird dadurch berechnet, dass die Integrationsgrenzen mit derselben „Rate“ an Singularitäten oder ins Unendliche geführt werden. Das heißt, wenn der Hauptwert durch \mathcal{P} gekennzeichnet wird und die Funktion $f(z)$ bei $z = b \in [a, c]$ singulär ist:

$$\mathcal{P} \int_a^c dz f(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\int_a^{b-\epsilon} dz f(z) + \int_{b+\epsilon}^c dz f(z) \right];$$

oder wenn $g(z)$ über ganz \mathbb{R} integriert werden soll und nicht rasch abfällt:

$$\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dz g(z) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R dz g(z).$$

Motivieren lässt sich dieser Ansatz noch dadurch, dass die Vollständigkeitsrelation für das Orthonormalsystem (3.47) (und damit die Delta-Distribution) formal auch auf beliebige Funktionen anwendbar ist und diese somit in einem gewissen Sinne auch in diesem Orthonormalsystem darstellbar sein sollten. Da dieser Ansatz hier jedoch nicht

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

streng mathematisch begründet werden kann, muss die Konsistenz der Entwicklung im Nachhinein geprüft werden. Es wird sich aber zeigen, dass die Anwendung der Regularisierung durch Zuweisung des Hauptwerts zu einer selbstkonsistenten Darstellung des Tangens Hyperbolicus durch die Longitudinalmoden führt.

Neben der Entwickelbarkeit des Tangens Hyperbolicus ist eine weitere Voraussetzung für die Entkoppelung der Differentialgleichung natürlich die Entwickelbarkeit des Felderwartungswertes $\bar{\varphi}_1$ bzw. $\Phi_{\vec{m}}(z)$ selbst. Dass dieser aber durch die Eigenfunktionen des Operators \mathbb{K} bzw. $\tilde{\mathbb{K}}$ mit Hilfe regularisierter Koeffizienten darstellbar ist, zeigt ein Blick auf die Graphenberechnung (3.28). Wenn die Propagatoren $\mathbb{K}_{x'x'}^{-1}$ in der Spektraldarstellung (3.33) gegeben sind, lässt sich das Schleifenintegral umschreiben zu

$$\bar{\varphi}_1(x) \sim \sum_{\lambda} \frac{1}{\lambda} \Psi_{\lambda}(x) \int d^D x' \Psi_{\lambda}^*(x') \mathbb{K}_{x'x'}^{-1} \phi_0(x') \quad (4.33)$$

mit den Eigenfunktionen (4.3), die ihrerseits durch die Longitudinalmoden (3.47) dargestellt werden. Effektiv entspricht dies einer Darstellung des Erwartungswertes in den Longitudinalmoden, wobei die Koeffizienten in diesem Fall proportional zu dem D -dimensionalen Integral über x' sind. Letzteres muss im Allgemeinen ebenfalls regularisiert werden, so dass es sich auch in diesem Fall um eine Darstellung durch regularisierte Koeffizienten handelt. Prinzipiell ist das nun zur Anwendung kommende Verfahren also mit der Graphenberechnung vereinbar.

Im Folgenden werden die Entwicklungskoeffizienten der in der Feldgleichung (4.22) auftretenden Terme berechnet. Die Zerlegung der Fluktuationen $\Phi_{\vec{m}}$ in die Moden (3.47) wird mit den Entwicklungskoeffizienten $a_i^{\vec{m}}$ notiert:

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = a_0^{\vec{m}} g_{\chi_0}(z) + a_1^{\vec{m}} g_{\chi_1}(z) + \mathcal{P} \int dp a_{c,p}^{\vec{m}} g_{\chi_{c,p}}(z). \quad (4.34)$$

Hier wurde das Integral durch den Hauptwert regularisiert, da davon auszugehen ist, dass es divergiert. Die Wirkung des Operators $\tilde{\mathbb{K}}$ auf das Feld in (4.22) kann nun mit Hilfe der Spektraldarstellung durch

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(z) \right] \Phi_{\vec{m}}(z) = \frac{3m_0^2}{4} a_1^{\vec{m}} g_{\chi_1}(z) + \mathcal{P} \int dp (m_0^2 + p^2) a_{c,p}^{\vec{m}} g_{\chi_{c,p}}(z)$$

ersetzt werden.

Entwicklung von $\text{sech}^2 \tanh$

Der $\text{sech}^2 \tanh$ -Faktor, dessen Koeffizient $M_{\vec{n}}^{(1)}$ ist, lässt sich

$$\text{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) = b_0 g_{\chi_0}(z) + b_1 g_{\chi_1}(z) + \int dp b_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z) \quad (4.35)$$

schreiben. Der erste Koeffizient ist

$$\begin{aligned} b_0 &= \int dz g_{\chi_0}^*(z) \text{sech}^2 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \\ &= \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \int dz \text{sech}^4 \left(\frac{m_0}{2} z \right) \tanh \left(\frac{m_0}{2} z \right) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (4.36)$$

4. Die fixierte Grenzfläche

da der Integrand ungerade ist und im Unendlichen verschwindet.

Im Fall des zweiten Koeffizienten ist die Lösung per Substitution zu finden.

$$\begin{aligned}
 b_1 &= \int dz g_{\chi_1}^*(z) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\
 &= \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \int dz \operatorname{sech}^3\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\
 &= \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \frac{4}{m_0} \underbrace{\int_0^\infty dz \operatorname{sech}^3(z) \tanh^2(z)}_I.
 \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurden die Argumente der Funktionen substituiert und ausgenutzt, dass der Integrand gerade ist. Mit der Substitution

$$\begin{aligned}
 y &= \operatorname{sech}(z) \\
 dz &= -\frac{1}{y\sqrt{1-y^2}} dy
 \end{aligned}$$

ist

$$I = \int_0^1 dy y^2 \sqrt{1-y^2},$$

was durch eine weitere Substitution

$$\begin{aligned}
 y &= \sin(x) \\
 dy &= \cos(x) dx
 \end{aligned}$$

auf

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx \sin^2(x) \cos^2(x)$$

zurückgeführt wird. Das letzte Integral lässt sich durch partielle Integration lösen (in Kurzschreibweise mit $s_x = \sin(x)$, $c_x = \cos(x)$):

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^2 c_x^2 &= s_x^3 c_x \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} - \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx (2s_x^2 c_x^2 - s_x^4) \\
 &= -3 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^2 c_x^2 + \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^2
 \end{aligned}$$

und damit ist

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^2 c_x^2 = \frac{1}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} s_x^2 = \frac{\pi}{16}.$$

Daher lautet das Ergebnis

$$b_1 = \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \frac{\pi}{4m_0}. \quad (4.37)$$

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

Der dritte Koeffizient ist

$$b_{c,p} = \int dz g_{\chi_{c,p}}^* \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

und wurde mit Mathematica [Mat10] berechnet:

$$b_{c,p} = -i2\pi\mathcal{N}_p \frac{p^2(m_0^2 + p^2)}{m_0^3} \operatorname{csch}\left(\pi \frac{p}{m_0}\right). \quad (4.38)$$

Entwicklung von $\operatorname{sech}^4 \tanh$

Die Entwicklungskoeffizienten des Terms mit dem Koeffizienten $M_n^{(2)}$ werden mit c_i bezeichnet:

$$\operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) = c_0 g_{\chi_0}(z) + c_1 g_{\chi_1}(z) + \int dp c_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z). \quad (4.39)$$

Dabei ist wegen des ungeraden Integranden wieder

$$c_0 = 0. \quad (4.40)$$

Der zweite Koeffizient lässt sich wie b_1 lösen:

$$\begin{aligned} c_1 &= \int dz g_{\chi_1}^*(z) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\ &= \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \frac{4}{m_0} \underbrace{\int_0^\infty dz \operatorname{sech}^5(z) \tanh^2(z)}_{\text{II}}. \end{aligned}$$

Dieselben Substitutionen liefern

$$\begin{aligned} \text{II} &= \int_0^1 dy y^4 \sqrt{1-y^2} \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^4 c_x^2 \\ &= -c_x^3 s_x^3 \Big|_0^{\frac{\pi}{2}} + \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx (-2c_x^2 s_x^4 + 3c_x^4 s_x^2) \\ &= -5 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^4 c_x^2 + 3 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx s_x^2 c_x^2 \end{aligned}$$

und somit

$$\text{II} = \frac{1}{2}\text{I}.$$

Also ist

$$c_1 = \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \frac{\pi}{8m_0} = \frac{1}{2}b_1. \quad (4.41)$$

4. Die fixierte Grenzfläche

Und für den dritten Koeffizienten

$$c_{c,p} = \int dz g_{\chi_{c,p}}^* \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

findet [Mat10] wiederum

$$\begin{aligned} c_{c,p} &= -i \frac{4\pi}{3} \mathcal{N}_p \frac{p^2 (m_0^2 + p^2)^2}{m_0^5} \operatorname{csch}\left(\pi \frac{p}{m_0}\right) \\ &= \frac{2}{3} \frac{m_0^2 + p^2}{m_0^2} b_{c,p}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Entwicklung des tanh

Die Koeffizienten der Entwicklung des Tangens Hyperbolicus werden d_i genannt. Es ist also

$$\tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) = d_0 g_{\chi_0}(z) + d_1 g_{\chi_1}(z) + \mathcal{P} \int dp d_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z). \quad (4.43)$$

Da der Tangens Hyperbolicus ungerade ist, die Eigenfunktion g_{χ_0} aber gerade, verschwindet der erste Koeffizient

$$d_0 = 0. \quad (4.44)$$

Der zweite Koeffizient ist durch

$$d_1 = \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \int dz \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) = \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \frac{\pi}{m_0} \quad (4.45)$$

gegeben. Dabei wurde das Integral durch Substitution von $\tanh(m_0 z/2)$ und Rücksubstitution von $\sin(x)$ gelöst:

$$\begin{aligned} \int dz \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) &= \frac{2}{m_0} \int_{-1}^1 dy \frac{y^2}{\sqrt{1-y^2}} \\ &= \frac{2}{m_0} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \sin^2(x). \end{aligned}$$

Während alle bisher berechneten Koeffizienten endlich waren und nicht regularisiert wurden, muss der letzte Koeffizient $d_{c,p}$ regularisiert werden. Die Berechnung des Hauptwertes mit Hilfe des Residuensatzes ist in den Anhang C.2 verschoben. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} d_{c,p} &= \mathcal{P} \int dz g_{\chi_{c,p}}^*(z) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\ &= i2\pi \mathcal{N}_p \left[\frac{p^2}{m_0} + m_0 \right] \operatorname{csch}\left(\frac{p}{m_0}\pi\right), \end{aligned} \quad (4.46)$$

was für $p = 0$ singularär ist. Mit den gefundenen Koeffizienten lässt sich dann die Konsistenz der Entwicklung durch Berechnung der rechten Seite von (4.43) überprüfen und verifizieren. Auch diese Rechnung ist der Länge wegen im Anhang C.2 zu finden.

4.3.3. Lösung der Feldgleichung

Mit den Ergebnissen (4.36) bis (4.46) ist die Differentialgleichung (4.22) jetzt zu einer algebraischen Gleichungen für die Koeffizienten $a_0^{\vec{m}}$, $a_1^{\vec{m}}$ und $a_{c,p}^{\vec{m}}$ entkoppelbar, in denen jeweils nur noch die Koeffizienten der Eigenfunktionen g_{χ_0} , g_{χ_1} oder $g_{\chi_{c,p}}$ auftreten. Auflösen der Gleichungen nach den $a_i^{\vec{m}}$ liefert dann mittelbar, nach Auswertung des Integrals in (4.34), die Lösung der Differentialgleichung.

Da der Differentialoperator in (4.22) symmetrisch ist und die Inhomogenität antisymmetrisch, muss die Lösung $\Phi_{\vec{m}}(z)$ ebenfalls antisymmetrisch sein. Der Koeffizient a_0 der symmetrischen Funktion $g_{\chi_0}(z)$ sollte also verschwinden. Da die Entwicklungskoeffizienten b_0 , c_0 und d_0 alle Null sind und ebenso der Eigenwert von $\tilde{\mathbb{K}}$ zur Eigenfunktion g_{χ_0} , lautet die Gleichung der Vorfaktoren von g_{χ_0} :

$$\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 a_0^{\vec{m}} = 0.$$

Damit ist wie erwartet

$$a_0^{\vec{m}} = 0, \quad (4.47)$$

da der Klammerausdruck endlich ist (für m_i sind nur echt positive Werte erlaubt).

Die Gleichung der Koeffizienten von $g_{\chi_1}(z)$ lautet

$$\left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + \frac{3m_0^2}{4} \right] a_1^{\vec{m}} + v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \left\{ d_1 M_{\vec{n}}^{(0)} + b_1 M_{\vec{n}}^{(1)} + c_1 M_{\vec{n}}^{(2)} \right\} = 0.$$

Mit

$$d_1 = 4b_1$$

und (4.41) lässt sich der Koeffizient $a_1^{\vec{m}}$ dann schreiben als

$$a_1^{\vec{m}} = -v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \frac{4M_{\vec{n}}^{(0)} + M_{\vec{n}}^{(1)} + \frac{1}{2}M_{\vec{n}}^{(2)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + \frac{3m_0^2}{4}} b_1. \quad (4.48)$$

Die letzte Koeffizientengleichung für die Koeffizienten von $g_{\chi_{c,p}}(z)$ lautet

$$\left[\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L} \right)^2 + m_0^2 + p^2 \right] a_{c,p}^{\vec{m}} + v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \left\{ d_{c,p} M_{\vec{n}}^{(0)} + b_{c,p} M_{\vec{n}}^{(1)} + c_{c,p} M_{\vec{n}}^{(2)} \right\} = 0.$$

4. Die fixierte Grenzfläche

Hier lassen sich die Koeffizienten der Übersicht halber durch $d_{c,p}$ ausdrücken:

$$b_{c,p} = -\frac{p^2}{m_0^2} d_{c,p}$$

und

$$c_{c,p} = -\frac{2p^2(m_0^2 + p^2)}{3m_0^4} d_{c,p}.$$

Somit ist der letzte Koeffizient durch

$$a_{c,p}^{\vec{m}} = -v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \cdot \frac{M_{\vec{n}}^{(0)} - \frac{p^2}{m_0^2} M_{\vec{n}}^{(1)} - \frac{2p^2(m_0^2 + p^2)}{3m_0^4} M_{\vec{n}}^{(2)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + m_0^2 + p^2} d_{c,p} \quad (4.49)$$

gegeben.

Anhand dieser Ergebnisse und Gleichung (4.34) lässt sich die Lösung der Differentialgleichung (4.22) wie folgt darstellen:

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = -v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \cdot \left\{ \frac{4M_{\vec{n}}^{(0)} + M_{\vec{n}}^{(1)} + \frac{1}{2}M_{\vec{n}}^{(2)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + \frac{3m_0^2}{4}} b_1 g_{\chi_1}(z) + \mathcal{P} \int dp \frac{M_{\vec{n}}^{(0)} - \frac{p^2}{m_0^2} M_{\vec{n}}^{(1)} - \frac{2p^2(m_0^2 + p^2)}{3m_0^4} M_{\vec{n}}^{(2)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + m_0^2 + p^2} d_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z) \right\}. \quad (4.50)$$

Dank der Faktoren $A_{n_i m_i}$ ist dies Null, sobald ein m_i gerade ist.

Die Berechnung des Integrals anhand des Residuensatzes ist in den Anhang C.3 verschoben. Die Bedingung für die Gültigkeit des dort berechneten Ergebnisses ist

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L m_0}\right)^2 + 1} \notin \mathbb{Z},$$

was durch geeignete Wahl von L problemlos zu erreichen ist. Der Residuensatz wird dann auf die beiden Bereiche $z > 0$ und $z < 0$ angewendet und es zeigt sich, dass

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = \text{sgn}(z) \Phi_{\vec{m}}(|z|)$$

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

gilt, $\Phi_{\bar{m}}$ also wie erwartet antisymmetrisch ist. Für $z \neq 0$ lautet das Ergebnis

$$\begin{aligned}
\Phi_{\bar{m}}(z) = & -v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L}\right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \operatorname{sgn}(z) \\
& \cdot \left\{ \frac{M_{\bar{n}}^{(0)} + \frac{1}{4} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{1}{8} M_{\bar{n}}^{(2)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + \frac{3m_0^2}{4}} \frac{\pi}{m_0} \sqrt{\frac{3m_0}{4}} g_{\chi_1}(|z|) \right. \\
& - \frac{\pi}{2m_0^4} \left(\frac{2}{\pi \eta_{\bar{m}}} M_{\bar{n}}^{(0)} \gamma(|z|) \right. \\
& + \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + \frac{1}{4} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{1}{8} M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \left[\frac{m_0^2}{2} - \gamma(|z|) + \frac{m_0}{2} \varepsilon(|z|) \right] \frac{e^{-\frac{m_0}{2}|z|}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} \\
& + \operatorname{csc}(\sqrt{\eta_{\bar{m}}}\pi) \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + \eta_{\bar{m}} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} \eta_{\bar{m}} (1 - \eta_{\bar{m}}) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \cdot \left[2\eta_{\bar{m}} m_0^2 - \gamma(|z|) + \sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 \varepsilon(|z|) \right] \frac{e^{-\sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 |z|}}{2\sqrt{\eta_{\bar{m}}} \left(\frac{1}{4} - \eta_{\bar{m}}\right)} \\
& - \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + k^2 M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} k^2 (1 - k^2) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \left. \cdot \left[2m_0^2 k^2 - \gamma(|z|) + m_0 k \varepsilon(|z|) \right] \frac{(-e^{-m_0 |z|})^k}{\left(\frac{1}{4} - k^2\right) (\eta_{\bar{m}} - k^2)} \right\}. \tag{4.51}
\end{aligned}$$

Hierbei wurden der Kürze wegen wieder die Definitionen (4.32c), (4.32d) und (4.32e) benutzt.

Die Form von $\Phi_{\bar{m}}$ lässt sich noch vereinfachen, wenn man erkennt, dass der erste Term in der geschweiften Klammer und der zweite Term in der runden Klammer sich wegheben. Denn mit

$$\begin{aligned}
\frac{m_0^2}{2} - \gamma(z) + \frac{m_0}{2} \varepsilon(z) &= \frac{3}{2} m_0^2 \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \left(1 + \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right)\right) \\
&= \frac{3}{2} m_0^2 \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2} z\right) e^{\frac{m_0}{2} z}
\end{aligned}$$

und

$$\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4} = \frac{1}{m_0^2} \left(\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + \frac{3m_0^2}{4} \right),$$

sowie (3.47b) zeigt sich

$$\frac{\pi}{m_0} \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \frac{g_{\chi_1}(|z|)}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + \frac{3m_0^2}{4}} = \frac{\pi}{2m_0^4} \left[\frac{m_0^2}{2} - \gamma(|z|) + \frac{m_0}{2} \varepsilon(|z|) \right] \frac{e^{-\frac{m_0}{2}|z|}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}}.$$

4. Die fixierte Grenzfläche

Somit wird der Ausdruck für $\Phi_{\bar{m}}$ zu

$$\begin{aligned}
\Phi_{\bar{m}}(z) = & v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{D-1} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \\
& \cdot \operatorname{sgn}(z) \left\{ \frac{1}{\eta_{\bar{m}} m_0^4} M_{\bar{n}}^{(0)} \gamma(|z|) \right. \\
& + \frac{\pi}{2m_0^4} \operatorname{csc}(\sqrt{\eta_{\bar{m}}}\pi) \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + \eta_{\bar{m}} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} \eta_{\bar{m}} (1 - \eta_{\bar{m}}) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \cdot \left[2\eta_{\bar{m}} m_0^2 - \gamma(|z|) + \sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 \varepsilon(|z|) \right] \frac{e^{-\sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 |z|}}{2\sqrt{\eta_{\bar{m}}} \left(\frac{1}{4} - \eta_{\bar{m}} \right)} \\
& - \frac{1}{2m_0^4} \sum_{k=1}^{\infty} \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + k^2 M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} k^2 (1 - k^2) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \cdot \left. \left[2m_0^2 k^2 - \gamma(|z|) + m_0 k \varepsilon(|z|) \right] \frac{(-e^{-m_0 |z|})^k}{\left(\frac{1}{4} - k^2 \right) (\eta_{\bar{m}} - k^2)} \right\}. \tag{4.52}
\end{aligned}$$

Obiges gilt bisher nur für $z \neq 0$, da der Residuensatz nur für endliches z anwendbar ist. Für $z = 0$ ist der Hauptwert des Integrals in (4.50) Null, da bis auf den ungeraden Faktor $\operatorname{csch}(p\pi/m_0)$, der aus $d_{c,p}$ stammt, alle weiter auftretenden Faktoren gerade in p sind. Außerdem ist $g_{\chi_1}(0) = 0$. Insgesamt folgt also

$$\Phi_{\bar{m}}(0) = 0$$

und der Ausdruck für $\Phi_{\bar{m}}(z)$ aus (4.52) sollte zumindest stetig in $z = 0$ fortsetzbar sein. Um das zu bestätigen, ist zu beachten, dass die in (4.52) auftretende Reihe nur dank des Faktors $\exp(-m_0|z|k)$ konvergent ist; für $z = 0$ hingegen verhalten sich die Summanden für große k wie k^2 und die Reihe divergiert. Deshalb kann in der Reihe nicht einfach $z = 0$ gesetzt werden und es muss stattdessen der Grenzwert $z \rightarrow 0$ des Wertes der Reihe betrachtet werden. Nachdem einige Terme für $z = 0$ verschwinden, bleibt

$$\begin{aligned}
\lim_{z \rightarrow 0} \Phi_{\bar{m}}(z) \propto & \lim_{z \rightarrow 0} \sum_{n_i > 0 \forall i} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \right] \left\{ \frac{M_{\bar{n}}^{(0)}}{2\eta_{\bar{m}} m_0^2} \right. \\
& + \frac{\pi}{2m_0^4} \operatorname{csc}(\sqrt{\eta_{\bar{m}}}\pi) \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + \eta_{\bar{m}} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} \eta_{\bar{m}} (1 - \eta_{\bar{m}}) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \cdot \frac{2\eta_{\bar{m}} m_0^2 - \frac{m_0^2}{2}}{2\sqrt{\eta_{\bar{m}}} \left(\frac{1}{4} - \eta_{\bar{m}} \right)} \\
& - \frac{1}{2m_0^4} \sum_{k=1}^{\infty} \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + k^2 M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} k^2 (1 - k^2) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \cdot \left. \left(2m_0^2 k^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) \frac{(-e^{-m_0 |z|})^k}{\left(\frac{1}{4} - k^2 \right) (\eta_{\bar{m}} - k^2)} \right\}
\end{aligned}$$

4.3. Lösung der transversal entkoppelten Feldgleichung

auszuwerten. [Mat10] berechnet Null als Ergebnis der Grenzwertbildung in der geschweiften Klammer und folglich des gesamten Ausdrucks. Damit ist (4.52) mit $\Phi_{\vec{m}}(0) = 0$ eine auf ganz \mathbb{R} stetige, antisymmetrische Funktion.

Die in (4.52) auftretende Reihe über k ist sowohl mit Hilfe von [Mat10] als auch mit [Map11] auswertbar. Das Ergebnis, ausgedrückt durch hypergeometrischen Funktionen, ist jedoch in beiden Fällen auch nach Anwendung der Vereinfachungsroutinen so lang, dass es hier nicht wiedergegeben werden kann. Da die Reihe aber von der Form

$$\sum_{k=1}^{\infty} P(k) \frac{(-e^{-m_0|z|})^k}{\left(\frac{1}{4} - k^2\right) (\eta_{\vec{m}} - k^2)}$$

ist, wobei $P(k)$ für ein Polynom sechsten Grades in k steht, genügt es den Wert von

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-e^{-m_0|z|})^k}{\left(\frac{1}{4} - k^2\right) (\eta_{\vec{m}} - k^2)}$$

zu kennen. Die Reihen, die noch zusätzliche k -Faktoren enthalten, lassen sich dann durch formale Ableitung dieses Wertes nach $-m_0|z|$ berechnen. Die Auswertung in [Mat10] liefert

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-e^{-m_0|z|})^k}{\left(\frac{1}{4} - k^2\right) (\eta_{\vec{m}} - k^2)} &= \frac{2}{\eta_{\vec{m}} - \frac{1}{4}} \left[-1 + 2 \arctan \left(e^{-\frac{m_0}{2}|z|} \right) \cosh \left(\frac{m_0}{2}|z| \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \frac{{}_2F_1(1, 1 - \sqrt{\eta_{\vec{m}}}; 2 - \sqrt{\eta_{\vec{m}}}; -e^{-m_0|z|})}{(\eta_{\vec{m}} - \frac{1}{4})(\sqrt{\eta_{\vec{m}}} - 1)\sqrt{\eta_{\vec{m}}}} \\ &+ \frac{1}{2} \frac{{}_2F_1(1, 1 + \sqrt{\eta_{\vec{m}}}; 2 + \sqrt{\eta_{\vec{m}}}; -e^{-m_0|z|})}{(\eta_{\vec{m}} - \frac{1}{4})(\sqrt{\eta_{\vec{m}}} + 1)\sqrt{\eta_{\vec{m}}}}. \end{aligned}$$

Für die hypergeometrische Funktion ${}_2F_1(a, b; c; z)$ gilt

$$\frac{d}{dz} {}_2F_1(a, b; c; z) = \frac{ab}{c} {}_2F_1(a + 1, b + 1; c + 1; z).$$

Die Länge des Ergebnisses rührt daher, dass die Exponentialfunktion, nach deren Argument abgeleitet wird, als Argument der hypergeometrischen Funktion auftritt. Durch die Ableitungen werden dann in Folge der Anwendung der Leibnizregel viele zusätzliche Terme generiert, die sich aufgrund der Vorfaktoren in $P(k)$ nicht gegenseitig aufheben.

Mit Einsetzen von (4.52) in (4.17) ist nun also formal die Lösung der Feldgleichung (3.29) und damit auch die Form der Grenzfläche in Ein-Schleifen-Ordnung (3.27) bei fixierenden Randbedingungen bekannt. Ausgeschrieben lautet der Erwartungswert der

4. Die fixierte Grenzfläche

Fluktuationen in Ein-Schleifen-Ordnung

$$\begin{aligned}
\bar{\varphi}_1(x) = & v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{\frac{3}{2}(D-1)} \sum_{\substack{m_i, n_i > 0 \\ \forall i}} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \sin \left(\frac{m_i \pi}{L} x_i \right) \right] \\
& \cdot \operatorname{sgn}(z) \left\{ \frac{1}{\eta_{\bar{m}} m_0^4} M_{\bar{n}}^{(0)} \gamma(|z|) \right. \\
& + \frac{\pi}{2m_0^4} \operatorname{csc}(\sqrt{\eta_{\bar{m}} \pi}) \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + \eta_{\bar{m}} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} \eta_{\bar{m}} (1 - \eta_{\bar{m}}) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \cdot [2\eta_{\bar{m}} m_0^2 - \gamma(|z|) + \sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 \varepsilon(|z|)] \frac{e^{-\sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 |z|}}{2\sqrt{\eta_{\bar{m}}} (\frac{1}{4} - \eta_{\bar{m}})} \\
& - \frac{1}{2m_0^4} \sum_{k=1}^{\infty} \left[M_{\bar{n}}^{(0)} + k^2 M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} k^2 (1 - k^2) M_{\bar{n}}^{(2)} \right] \\
& \left. \cdot [2m_0^2 k^2 - \gamma(|z|) + m_0 k \varepsilon(|z|)] \frac{(-e^{-m_0 |z|})^k}{(\frac{1}{4} - k^2) (\eta_{\bar{m}} - k^2)} \right\}. \tag{4.53}
\end{aligned}$$

Durch das Ersetzen der im Laufe der Arbeit definierten Funktionen und Koeffizienten scheinen sich keine Vereinfachungen des Ausdrucks zu ergeben, so dass der Länge des resultierenden Ausdrucks wegen hier auf die Wiedergabe des Ergebnisses ohne Abkürzungen verzichtet wird. Addition des Mean-Field-Profiles $\phi_0(z)$ liefert letztendlich das auf dem Rand fixierte Grenzflächenprofil $\langle \phi(x) \rangle$ in Ein-Schleifen-Ordnung.

Wie in den Randbedingungen gefordert, sorgen die Faktoren $\sin(m_i \pi x_i / L)$ in (4.53) dafür, dass die Fluktuationen auf dem Systemrand $x_i \in \{0, L\}$ verschwinden. Desweiteren ist (4.53) antisymmetrisch in z und konvergiert in der z -Richtung gegen \vec{x} -abhängige Grenzwerte. Da die z -Abhängigkeiten der Lösung entweder in Form des Tangens Hyperbolicus oder in Exponentialfunktionen mit negativem Argument vorkommen, sind bei Bildung des Grenzwertes $|z| \rightarrow \infty$ lediglich die ersten beiden Zeilen von (4.53) zu berücksichtigen. Im Limes ergeben sich dann die \vec{x} -abhängigen Grenzwerte

$$\lim_{z \rightarrow \pm \infty} \bar{\varphi}_1(\vec{x}, z) = \mp v_0 \frac{g_0}{2} \left(\frac{2}{L} \right)^{\frac{3}{2}(D-1)} \sum_{\substack{m_i, n_i > 0 \\ \forall i}} \left[\prod_{i=1}^{D-1} A_{n_i m_i} \sin \left(\frac{m_i \pi}{L} x_i \right) \right] \frac{1}{\eta_{\bar{m}} m_0^2} M_{\bar{n}}^{(0)}.$$

Bereits für diesen vermeintlich einfachst möglichen Term aus (4.53) ließ sich in $D = 3$ Dimensionen kein geschlossener Ausdruck finden.

5. Zusammenfassung und Ausblick

5.1. Zusammenfassung und Vergleich mit der Graphenberechnung

Um den Weg von der allgemein gefassten ϕ^4 -Theorie zur Lösung (4.53) der Feldgleichung der Fluktuationen noch einmal zu verdeutlichen, werden die wichtigsten Schritte hier kurz zusammengefasst. Zuerst wurde die Feldgleichung der ϕ^4 -Theorie in der Mean-Field-Näherung für ein System mit zwei in einer Raumrichtung separierten Phasen gelöst – die Lösung ist das Cahn-Hilliard-Profil (3.6). Letzteres wurde dann als Hintergrundfeld genutzt und eine Theorie der Fluktuationen vor diesem Hintergrundfeld konstruiert. Damit ließ sich dann das Diagramm zur Berechnung des Erwartungswerts der Fluktuationen in Ein-Schleifen-Ordnung angeben, dessen Integralausdruck (3.28) darstellt. Gleichwohl wurde eine Differentialgleichung (3.29) angegeben, der der Erwartungswert gehorchen muss. Die Randbedingungen, für die diese Feldgleichung gelöst werden sollte, wurden so gewählt, dass weiterhin in einer Raumrichtung zwei separierte Phasen auftreten und in den restlichen, kompakten Raumrichtungen keine Fluktuationen auf den Systemrändern auftreten. Dadurch wird das Grenzflächenprofil auf dem Systemrand zum Mean-Field-Profil und ist dort fixiert. Mit der Berechnung des inversen Fluktuationsoperator kernels in Spektraldarstellung (4.4) wurde eine explizite Form der Differentialgleichung (4.14) gefunden. Um diese partielle Differentialgleichung zu vereinfachen wurde versucht, bestimmte Werte für die Koordinaten der kompakten Raumrichtungen zu wählen, woraufhin aber keine Vereinfachung zu erkennen war. Deshalb wurden stattdessen die Eigenfunktionen der in der Differentialgleichung auftretenden Differentialoperatoren genutzt, um sie zu entkoppeln. Die Entkopplung in den Transversalmoden lieferte die inhomogene, gewöhnliche, lineare Differentialgleichung (4.22). Daraufhin wurden die Lösungen der zugehörigen homogenen Differentialgleichung untersucht und gezeigt, dass diese nicht mit den geforderten Randbedingungen in Einklang zu bringen sind und somit eine die Randbedingungen respektierende Lösung der inhomogenen Differentialgleichung eindeutig ist. Für eine weitere Entkopplung der Differentialgleichung in den Longitudinalmoden musste nun ein Weg gefunden werden, um im eigentlichen Sinne nicht entwickelbare Funktionen durch diese Moden darzustellen. Dazu wurde einerseits versucht, die nichtentwickelbaren Anteile der Fluktuationen zu raten, was zu Inkonsistenzen führte. Andererseits ließ sich dann eine Entwicklung mit Hilfe regularisierter Integrale angeben, die letztendlich die Berechnung von (4.53) möglich machte.

Der in dieser Arbeit eingeschlagene Weg zur Berechnung des Felderwartungswertes beruhte dabei auf der Idee, durch die Lösung der effektiven Feldgleichung (3.29) die schwierige Berechnung des Schleifenintegrals (3.28) zu vermeiden. Dazu wurde, mit Berufung

5. Zusammenfassung und Ausblick

auf die Dissertation von Hoppe [Hop97] und die dort angegebene geschlossene Form des Propagators bei periodischen Randbedingungen, davon ausgegangen, dass, falls sich eine geschlossene Form des Propagators bei fixierenden Randbedingungen finden ließe, diese wahrscheinlich noch komplizierter aussehen würde und die Graphenberechnung in diesem Fall noch unhandlicher gewesen wäre. Nun war es jedoch nicht möglich, wie bei Köpf [Köp08], eine geschlossene Lösung der Differentialgleichung durch Standardverfahren zu finden, so dass das hier gefundene Ergebnis nicht in eine geschlossene Form gebracht werden konnte und ebenfalls äußerst unhandlich ist.

Die Form von (4.53) entspricht dabei aber der Erwartung an das Ergebnis der Graphenberechnung (3.28), wenn dort nicht eine geschlossene Form des Propagators $\mathbb{K}_{xx'}^{-1}$, sondern die Spektraldarstellung verwendet werden würde. So korrespondiert die Summe über \vec{n} in (4.53) zu der Summe über die Eigenwerte in der Spektraldarstellung von $\mathbb{K}_{x'x'}^{-1}$. Die Summe über \vec{m} in (4.53) hingegen findet ihren Gegenpart in der Summe über die Eigenwerte in der Spektraldarstellung von $\mathbb{K}_{xx'}^{-1}$. Ohne genauere Berechnungen zum Vergleich durchgeführt zu haben, deutet dies darauf hin, dass die hier durchgeführte Rechnung dem Aufwand nach mit der Graphenberechnung (mit Propagatoren in Spektraldarstellung) vergleichbar gewesen wäre.

5.2. Ausblick

Zwar war es durch die durchgeführten Berechnungen möglich, mit der in (4.53) angegebenen formalen Lösung der Feldgleichung (3.29) auf analytischem Weg einen Ausdruck in D Dimensionen zu finden. Jedoch wurde zu den dort auftretenden Reihen keine geschlossene Form gefunden. So sind in dem Fall von größtem Interesse, nämlich in $D = 3$ Dimensionen, neben der Reihe über k noch zwei Doppelsummen über m_1, m_2 und n_1, n_2 auszuwerten, deren einzelne Reihenglieder schon sehr unhandlich sind. Es ist daher nicht zu erwarten, dass mit diesem Ausdruck auf analytischem Weg physikalische Vorhersagen zu machen sind. Stattdessen wird es wohl unumgänglich sein, die Reihen für bestimmte Parameterwerte von Interesse numerisch auszuwerten. Insbesondere die Wahl von festen Transversalkoordinaten \vec{x} , z.B. in der Systemmitte $x_i = L/2$ für i von 1 bis $D - 1$, sollte dahingehend Vereinfachungen bringen.

Dazu müssten aber zuerst die physikalischen Parameter der Theorie identifiziert, d.h. die Theorie müsste renormiert werden. Dabei könnten dann auch eventuell in den Reihen auftretende Divergenzen unter Kontrolle gebracht werden. Wenn letztendlich für den Erwartungswert des renormierten Feldes ein Ausdruck durch die renormierte Masse/Korrelationslänge und durch die renormierte Kopplungskonstante gegeben ist, können die physikalisch relevanten Fragestellungen, wie sie von Köpf [Köp08] und Müller [Mül04] bereits mit anderen Ansätzen untersucht wurden, angegangen werden. Dazu gehören dann die Bestimmung der Grenzflächendicke nach unterschiedlichen Definitionen, die Bestimmung des Gültigkeitsbereichs der Ein-Schleifen-Näherung und natürlich die Vergleiche mit den bereits durchgeführten Berechnungen anderer Ansätze und mit Simulationen.

A. Häufig verwendete Größen

Größe	Beschreibung
$\phi(x)$	Ordnungsparameterfeld zur Beschreibung der Grenzfläche
$\phi_0(z)$	Grenzflächenprofil in der Mean-Field-Näherung, Gl. (3.6)
$\varphi(x)$	Fluktuationen des Ordnungsparameterfeldes um das Mean-Field-Profil
$\bar{\varphi}_1(x)$	Erwartungswert der Fluktuationen in Ein-Schleifen-Näherung, Gl. (3.28)
$\mathbb{K}, \mathbb{K}^{-1}$	Fluktuationsoperator und sein Inverses, der Propagator der Fluktuationen, Gl. (3.25)
m_0	Nackte inverse Korrelationslänge
g_0	Nackte Kopplungskonstante
L	Systembreite in den \vec{x} -Koordinaten
\vec{n}, \vec{m}	$(D - 1)$ -dimensionale Vektoren zur Nummerierung der Transversalmoden, Gl. (4.2)
$M_{\vec{n}}(z), M_{\vec{n}}^{(i)}$	Zusammenfassung von Termen in der Spektraldarstellung von \mathbb{K}^{-1} , Gl. (4.5), (4.7)
$\Phi_{\vec{m}}(z)$	Koeffizient der Transversalmodenentwicklung der Fluktuationen, Gl. (4.17)
$A_{n_i m_i}$	Entwicklungskoeffizienten von $\sin^2(n_i \pi x_i / L)$, Gl. (4.18)
$g_{\chi_i}(z)$	Longitudinalmoden, Gl. (3.47)
a_i bis d_i	Koeffizienten der Entwicklung nach den Longitudinalmoden, Gl. (4.34), (4.35), (4.39), (4.43)
$\gamma(z) := \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)$ $\varepsilon(z) := 3m_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)$ $\eta_{\vec{m}} := \sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L m_0}\right)^2 + 1$	Abkürzungen in den Ergebnissen

B. Massendimension

Um Fehler in den Rechnungen auffindig zu machen, ist es zweckmäßig Dimensionsbetrachtungen anzustellen. Deswegen sind im Folgenden die Dimensionen der im Hamiltonian auftretenden Größen angegeben. Der Hamiltonian H muss dimensionslos sein; Längen, wie die Koordinaten x , haben Längendimension

$$[x]_L = 1.$$

Mit dem kinetischen Term

$$\sim \int d^D x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2$$

lässt sich sodann

$$[\phi]_L = 1 - \frac{D}{2}$$

einsehen. Aus dem Massenterm

$$\sim \int d^D x m^2 \phi^2$$

folgt

$$[m]_L = -1,$$

und damit generell die Beziehung zwischen Massendimension (eckige Klammern ohne Index) und Längendimension

$$[\cdot] = -[\cdot]_L,$$

(dieselbe Beziehung gilt allgemein in der QFT in natürlichen Einheiten ($\hbar = c = 1$)). Der Wechselwirkungsterm

$$\sim \int d^D x g \phi^4$$

liefert

$$[g] = 4 - D.$$

Der Fluktuationsoperator hat die Dimension von ∇^2 :

$$[\mathbb{K}] = 2.$$

Gl. (4.14) hat somit Massendimension $1 + \frac{D}{2}$ und die Koeffizienten $M_{\vec{n}}$ müssen von der Dimension

$$[M_{\vec{n}}] = -1$$

sein. Die Entwicklungskoeffizienten der Transversalmodenentwicklung haben die Dimension

$$[A_{n_i m_i}] = -\frac{1}{2}.$$

B. Massendimension

Die Koeffizienten der Transversalmoden in (4.17) haben die Dimension

$$[\Phi_{\vec{m}}] = [\varphi] - \frac{D-1}{2} = -\frac{1}{2}.$$

Damit lässt sich beispielsweise zeigen, dass das Ergebnis (4.53) die richtige Dimension hat.

C. Berechnungen mittels Residuensatz

C.1. Integrale in den Koeffizienten $M_{\vec{n}}^{(i)}$

Um für $M_{\vec{n}}^{(0)}$ aus (4.8) einen geschlossenen Ausdruck zu erhalten, muss das folgende Integral berechnet werden:

$$\frac{1}{2\pi} \int dp \frac{1}{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2}.$$

Sei

$$a = \frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2,$$

dann ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int dp \frac{1}{a + p^2} &= \frac{1}{2\pi\sqrt{a}} \int dp' \frac{1}{1 + p'^2} \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{a}} \arctan(p') \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= \frac{\pi}{2\pi\sqrt{a}}. \end{aligned}$$

Im ersten Schritt wurde

$$p \rightarrow p' = \frac{p}{\sqrt{a}}$$

substituiert. Damit ist

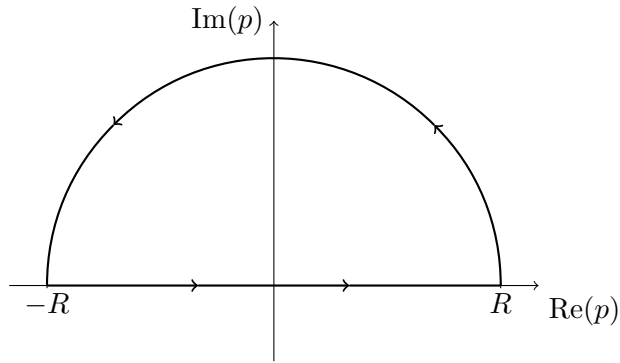
$$M_{\vec{n}}^{(0)} = \frac{1}{2\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}}. \quad (\text{C.1})$$

Der Koeffizient $M_{\vec{n}}^{(1)}$ aus (4.9) enthält das Integral

$$\frac{1}{2\pi} \int dp \frac{1}{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \frac{6m_0^4 + 3m_0^2 p^2}{4p^2 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4},$$

welches sich mit Hilfe des Residuensatzes lösen lässt. Auf eine komplexwertige geschlossenen Kurve, die sich über die reelle Achse erstreckt und einen Halbkreis mit Radius $R \rightarrow \infty$ in der oberen komplexen Halbebene beschreibt (siehe Skizze), fortgesetzt, ist das Integral durch die Summe der Residuen in der oberen Halbebene gegeben. Da der Integrand eine echt gebrochene rationale Funktion ist und somit auf dem Halbkreis im komplex Unendlichen verschwindet, sind die Ausdrücke für das Integral über die reelle Achse und die beschriebene geschlossene Kurve äquivalent.

C. Berechnungen mittels Residuensatz



Zuerst müssen die Polstellen des Integranden, d.h. die (komplexen) Nullstellen des Nenners berechnet werden:

$$\begin{aligned} \frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 + p_{1,2}^2 &= 0 \\ \Rightarrow p_{1,2} &= \pm i \sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} 4p^2 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4 &= 0 \\ \Rightarrow p_{3,4,5,6} &= -\frac{5}{8}m_0^2 \pm \frac{3}{8}m_0^2 \\ \Rightarrow p_{3,4} &= \pm i \frac{m_0}{2} \quad \text{und} \quad p_{5,6} = \pm i m_0. \end{aligned}$$

Drei Polstellen finden sich in der oberen Halbebene wieder, so dass die zu diesen Polen gehörigen Residuen benötigt werden. Das Residuum eines Pols erster Ordnung, z_0 , einer Funktion $F(z)$ berechnet sich nach

$$\text{Res}_{z_0} F = \lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0) F(z).$$

Bezeichne $f(p)$ nun den Integranden. Dann ist

$$\begin{aligned} \text{Res}_{i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} f &= \lim_{p \rightarrow i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \left(p - i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2} \right) f(p) \\ &= \frac{1}{2i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \frac{6m_0^4 - 3m_0^2 \left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 \right)}{4 \left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 \right) - 5m_0^2 \left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 \right) + m_0^4} \\ &= \frac{1}{2i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \frac{3m_0^2}{4 \frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \left[\frac{m_0^2}{\left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} \right)} - 1 \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Res}_{i\frac{m_0}{2}} f &= \frac{1}{4} \frac{1}{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + \frac{3}{4} m_0^2} \frac{6m_0^4 + 3m_0^2 p^2}{(p + i\frac{m_0}{2})(p + im_0)(p - im_0)} \Big|_{p=i\frac{m_0}{2}} \\ &= \frac{-i}{4 \frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} 7m_0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Res}_{im_0} f &= \frac{1}{4} \frac{1}{\left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \frac{6m_0^4 + 3m_0^2 p^2}{(p + i\frac{m_0}{2})(p - i\frac{m_0}{2})(p + im_0)} \Big|_{p=im_0} \\ &= \frac{im_0}{2 \left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)}. \end{aligned}$$

Damit ist das Integral gelöst:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int dp f(p) &= i \sum_{p_1, p_3, p_5} \operatorname{Res}_{p_i} f \\ &= \frac{1}{4 \frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \left\{ \frac{3m_0^2}{2\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \left[\frac{m_0^2}{\left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} - 1 \right] + 7m_0 \right\} - \frac{m_0}{2 \left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \end{aligned}$$

und letztendlich ergibt sich für den Koeffizienten

$$M_{\vec{n}}^{(1)} = \frac{m_0}{2 \left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} + \frac{1}{4 \frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \left\{ \frac{3m_0^2}{2\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \left[1 - \frac{m_0^2}{\left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \right] - 4m_0 \right\}. \quad (\text{C.2})$$

In $M_{\vec{n}}^{(2)}$ aus (4.10) tritt das Integral

$$\frac{9}{4} \frac{m_0^4}{2\pi} \int dp \frac{1}{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \frac{1}{4p^4 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4}$$

auf. Ganz ähnlich wie oben, wird zur Berechnung der Residuensatz herangezogen. Da sich im Vergleich mit obigem Integral nur der Zähler geändert hat, bleiben die Polstellen p_1 bis p_6 dieselben. Die Residuen der oberen Halbebene sind (der Integrand wird mit g bezeichnet):

$$\begin{aligned} \operatorname{Res}_{i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} g &= \frac{1}{2i\sqrt{\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \frac{1}{\left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \frac{1}{4\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2}, \\ \operatorname{Res}_{i\frac{m_0}{2}} g &= \frac{-i}{4\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \frac{4}{3m_0^3}, \\ \operatorname{Res}_{im_0} g &= \frac{i}{\left(\frac{\vec{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \frac{1}{6m_0^3}. \end{aligned}$$

C. Berechnungen mittels Residuensatz

Die Lösung des Integrals ist

$$\begin{aligned} \frac{9}{4} \frac{m_0^4}{2\pi} \int dp g(p) &= \frac{9}{4} \frac{m_0^4}{2\pi} 2\pi i \sum_{p_1, p_3, p_5} \text{Res}_{p_i} g \\ &= \frac{1}{4 \frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \left\{ 3m_0 + \frac{9}{8 \sqrt{\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \frac{m_0^4}{\left(\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \right\} - \frac{3}{8} \frac{m_0}{\left(\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)}, \end{aligned}$$

so dass der Koeffizient schließlich

$$M_{\bar{n}}^{(2)} = \frac{1}{4 \frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2} + 3m_0^2} \frac{9}{8 \sqrt{\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2} + m_0^2}} \frac{m_0^4}{\left(\frac{\bar{n}^2 \pi^2}{L^2}\right)} \quad (\text{C.3})$$

ist.

C.2. Integrale zur Entwicklung des Tangens Hyperbolicus

Die Berechnung des Koeffizienten $d_{c,p}$ in der Entwicklung (4.43) des Tangens Hyperbolicus erfolgt durch Bestimmung des Hauptwertes des Integrals

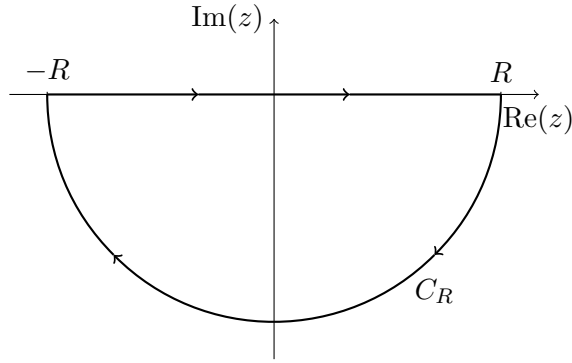
$$d_{c,p} = \mathcal{P} \int dz g_{\chi_{c,p}}^*(z) \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right).$$

Nach Einsetzen des komplex Konjugierten von (3.47c) lässt sich dies umschreiben zu

$$\begin{aligned} d_{c,p} &= \mathcal{N}_p \left\{ \left[2p^2 + \frac{m_0^2}{2} \right] \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \right. \\ &\quad - i3m_0 p \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2} z\right) \\ &\quad \left. - \frac{3}{2} m_0^2 \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh^3\left(\frac{m_0}{2} z\right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Jedes dieser drei Integrale oszilliert, fällt nicht gegen Null, wenn z gegen Unendlich läuft, und muss deshalb regularisiert werden, um dem Integral einen Wert zuzuweisen. Die Hauptwerte lassen sich dann mit dem Residuensatz auswerten, da der Integrand bei positiven p -Werten für z -Werte in der unteren komplexen Halbebene dank der Exponentialfunktion gedämpft wird. Und umgekehrt genauso für negative p in der oberen Halbebene. Im Folgenden wird aber vorerst nur der Fall $p > 0$ betrachtet. Für alle drei Integrale wird der in der Skizze dargestellte Integrationsweg verwendet, wobei C_R den Halbkreis mit Radius R bezeichnet. Letzterer ist dabei so gewählt, dass keiner der Pole des Integranden auf dem Halbkreis liegt.

C.2. Integrale zur Entwicklung des Tangens Hyperbolicus



Da nun die Integrale über C_R für $R \rightarrow \infty$ verschwinden, sind die Hauptwerte gleich den Summen der Residuen. Für das erste Integral ist also

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) &= \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\int_{-R}^R dz e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \right. \\ &\quad \left. + \int_{C_R} dz e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \right] \\ &= -2\pi i \sum_{z_p} \text{Res}_{z_p} \left(e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \right). \end{aligned}$$

Das negative Vorzeichen vor den Residuen trägt der Umkehr des mathematischen Umlaufs bei Umlauf der Kurve in Richtung der Pfeile Rechnung; z_p steht für die Polstellen des Integranden. Diese sind gleich den Polstellen des Tangens Hyperbolicus und damit die Nullstellen des Kosinus Hyperbolicus auf der imaginären Achse:

$$\cosh\left(\frac{m_0}{2} z_p\right) = 0 \quad \text{für} \quad z_p = i \frac{\pi}{m_0} (2n + 1), \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Die Residuen in der unteren Halbebene lauten

$$\begin{aligned} &\text{Res}_{-i \frac{\pi}{m_0} (2n+1)} \left(e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \right) \\ &= \lim_{z \rightarrow -i \frac{\pi}{m_0} (2n+1)} \left(z + i \frac{\pi}{m_0} (2n + 1) \right) e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2} z\right) \\ &= \sinh\left(-i \frac{\pi}{2} (2n + 1)\right) e^{-p \frac{\pi}{m_0} (2n+1)} \frac{2}{m_0} \frac{1}{\sinh\left(-i \frac{\pi}{2} (2n + 1)\right)} \\ &= \frac{2}{m_0} e^{-\frac{p}{m_0} (2n+1)\pi}. \end{aligned}$$

C. Berechnungen mittels Residuensatz

Im zweiten Schritt wurde die Regel von l'Hospital angewandt. Damit ist

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) &= -2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{m_0} e^{-\frac{p}{m_0}(2n+1)\pi} \\
 &= -\frac{4\pi i}{m_0} e^{-\frac{p}{m_0}\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-\frac{p}{m_0}2\pi}\right)^n \\
 &= -i \frac{2\pi}{m_0} \operatorname{csch}\left(\frac{p}{m_0}\pi\right),
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

wobei die geometrische Reihe und die Exponentialdarstellung des Sinus Hyperbolicus benutzt wurden.

Da sich in den beiden noch zu berechnenden Integralen nur der Exponent des Tangens Hyperbolicus vom zuletzt berechneten Integral unterscheidet, kann genau wie bei diesem verfahren werden. Es ist lediglich zu beachten, dass die Polstellen z_p nun Pole höherer Ordnung darstellen und sich dementsprechend die Residuen anders berechnen. So sind im zweiten Integranden die Polstellen von zweiter Ordnung und die Residuen berechnen sich nach

$$\begin{aligned}
 &\operatorname{Res}_{-i\frac{\pi}{m_0}(2n+1)} \left(e^{-ipz} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right) \\
 &= \lim_{z \rightarrow -i\frac{\pi}{m_0}(2n+1)} \frac{d}{dz} \left[\left(z + i\frac{\pi}{m_0}(2n+1) \right)^2 e^{-ipz} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \\
 &= -4i \frac{p}{m_0^2} e^{-\frac{p}{m_0}(2n+1)\pi}.
 \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis lässt sich nach einer elementaren, aber länglichen Berechnung der Ableitung und Anwendung der Regel von l'Hospital oder mit einem CAS finden. Der zweite Hauptwert ergibt sich damit zu

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) &= -2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \left(-4i \frac{p}{m_0^2} \right) e^{-\frac{p}{m_0}(2n+1)\pi} \\
 &= -\frac{4\pi p}{m_0^2} \operatorname{csch}\left(\frac{p}{m_0}\pi\right).
 \end{aligned} \tag{C.6}$$

Die Polstellen des dritten Integranden sind dementsprechend von dritter Ordnung und mit

$$\begin{aligned}
 &\operatorname{Res}_{-i\frac{\pi}{m_0}(2n+1)} \left(e^{-ipz} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right) \\
 &= \lim_{z \rightarrow -i\frac{\pi}{m_0}(2n+1)} \frac{d^2}{dz^2} \left[\left(z + i\frac{\pi}{m_0}(2n+1) \right)^3 e^{-ipz} \tanh^3\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \\
 &= 2e^{-\frac{p}{m_0}(2n+1)\pi} \left[\frac{1}{m_0} - 2\frac{p^2}{m_0^3} \right]
 \end{aligned}$$

C.2. Integrale zur Entwicklung des Tangens Hyperbolicus

zu berechnen. Auch hier gestaltet sich die von Hand durchgeführte Rechnung als sehr länglich, so dass hier nur das Ergebnis wiedergegeben wird, welches sich so aber auch von [Mat10] bestätigen ließ. Der letzte Hauptwert ist also durch

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int dz e^{-ipz} \tanh^3\left(\frac{m_0}{2}z\right) &= -2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} 2e^{-\frac{p}{m_0}(2n+1)\pi} \left[\frac{1}{m_0} - 2\frac{p^2}{m_0^3} \right] \\ &= 2\pi i \left[2\frac{p^2}{m_0^3} - \frac{1}{m_0} \right] \operatorname{csch}\left(\frac{p}{m_0}\pi\right) \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

gegeben.

Einsetzen der Hauptwerte in (C.4) liefert letztendlich

$$d_{c,p} = i2\pi \mathcal{N}_p \left[\frac{p^2}{m_0} + m_0 \right] \operatorname{csch}\left(\frac{p}{m_0}\pi\right). \quad (\text{C.8})$$

Bisher wurde nur der Fall $p > 0$ betrachtet; jedoch ergibt sich dasselbe für $p < 0$, wenn als Kurvenvervollständigung ein Halbkreis in der oberen Halbebene betrachtet wird. Dieses Ergebnis ist also für $p \neq 0$ gültig. Für $p \rightarrow 0$ divergiert der Ausdruck.

Prüfung der Entwicklung

Um zu überprüfen, ob das so gefundene Ergebnis (C.8) tatsächlich eine Darstellung des Tangens Hyperbolicus liefert, wird die rechte Seite von (4.43) berechnet. Die Zuweisung des Cauchy-Hauptwertes regularisiert dabei die ansonsten bei $p = 0$ auftretende Singularität von $d_{c,p}$. Mit d_0, d_1 aus 4.3.2, den Funktionen (3.47) und zwei Definitionen aus (4.32) ist dann

$$\begin{aligned} &d_0 g_{\chi_0}(z) + d_1 g_{\chi_1}(z) + \mathcal{P} \int dp d_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z) \\ &= \frac{3}{4}\pi \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \frac{i}{m_0^3} \mathcal{P} \int dp \frac{\left(\frac{p}{m_0}\right)^2 + 1}{4\left(\frac{p}{m_0}\right)^4 + 5\left(\frac{p}{m_0}\right)^2 + 1} \operatorname{csch}\left(\frac{p}{m_0}\pi\right) e^{ipz} \\ &\quad \cdot \left[\underbrace{2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)}_{\gamma(z)} + ip \underbrace{3m_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)}_{\varepsilon(z)} \right] \\ &= \frac{3}{4}\pi \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\ &\quad + \frac{i}{4m_0^2} \mathcal{P} \int dp \frac{p^2 + 1}{p^4 + \frac{5}{4}p^2 + \frac{1}{4}} \operatorname{csch}(p\pi) e^{ipm_0z} [2m_0^2 p^2 + \gamma(z) + im_0 \varepsilon(z)p]. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Der Einfachheit halber wurde in der letzten Zeile $\frac{p}{m_0}$ durch die nun dimensionslose Größe p substituiert. Da die Integrationsgrenzen davon unbeeinflusst bleiben, ist dies auch bei Bildung des Cauchy-Hauptwertes erlaubt. Der Hauptwert ist dank der Exponentialfunktion wieder mit Hilfe des Residuensatzes berechenbar. Im Folgenden sei dafür $z > 0$ und

C. Berechnungen mittels Residuensatz

die Integrationskurve – diesmal in der oberen Halbebene – bestehe wieder aus der reellen Achse und einem Halbkreis. Die Polstellen des Integranden sind die Pole des Kosekans Hyperbolicus auf der imaginären Achse

$$p = in, \quad n \in \mathbb{Z}$$

und die Nullstellen des Nennerpolynoms. Letztere sind aus Anhang C.1 bekannt:

$$p^4 + \frac{5}{4}p^2 + \frac{1}{4} = (p + \frac{i}{2})(p - \frac{i}{2})(p^2 + 1).$$

Da der Kosekans Hyperbolicus aber auch auf der reellen Achse bei $p = 0$ einen Pol besitzt, ist dieser durch einen weiteren Halbkreis mit Radius $\delta > 0$ zu umlaufen, der dann gegen Null geschickt wird. Dadurch geht das Residuum dieses Pols mit dem Faktor $1/2$ in die Summe der Residuen ein [WW52]. Nach dem Kürzen des Zählers ist das Integral aus (C.9) also

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int dp \underbrace{\frac{1}{(p + \frac{i}{2})(p - \frac{i}{2})} \operatorname{csch}(p\pi) e^{ipm_0z} [2m_0^2p^2 + \gamma(z) + im_0\varepsilon(z)p]}_{F(p)} \\ = 2\pi i \left[\sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{Res}_{in}(F(p)) + \operatorname{Res}_{\frac{i}{2}}(F(p)) + \frac{1}{2} \operatorname{Res}_0(F(p)) \right]. \quad (\text{C.10}) \end{aligned}$$

Die Residuen in der oberen Halbebene ergeben sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \operatorname{Res}_{in}(F(p)) &= \lim_{p \rightarrow in} (p - in)F(p), \quad n \in \mathbb{N} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{4} - n^2} e^{-m_0zn} [-2m_0^2n^2 + \gamma(z) - m_0\varepsilon(z)n] \lim_{p \rightarrow in} \frac{p - in}{\sinh(p\pi)} \\ &= \frac{(-1)^n}{\pi} \frac{1}{\frac{1}{4} - n^2} e^{-m_0zn} [-2m_0^2n^2 + \gamma(z) - m_0\varepsilon(z)n], \end{aligned}$$

$$\operatorname{Res}_0(F(p)) = \frac{4}{\pi} \gamma(z),$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Res}_{\frac{i}{2}}(F(p)) &= \lim_{p \rightarrow \frac{i}{2}} (p - \frac{i}{2})F(p) \\ &= e^{-\frac{m_0}{2}z} \left[\frac{m_0^2}{2} - \gamma(z) + \frac{m_0}{2}\varepsilon(z) \right]. \end{aligned}$$

C.2. Integrale zur Entwicklung des Tangens Hyperbolicus

Nach Einsetzen in (C.10) und Umsortierung der Terme ist dann

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int dp F(p) &= 2\pi i e^{-\frac{m_0}{2}z} \left[\frac{m_0^2}{2} - \gamma(z) + \frac{m_0}{2}\varepsilon(z) \right] + 4i\gamma(z) \\ &\quad + 2i\gamma(z) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} - 4im_0^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 (-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} \\ &\quad - 2im_0\varepsilon(z) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n (-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2}. \end{aligned}$$

Mit [Mat10] findet sich

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} = -2 + 4 \arctan \left(e^{-\frac{m_0}{2}z} \right) \cosh \left(\frac{m_0}{2}z \right).$$

Die restlichen noch auftretenden Summen lassen sich daraus durch Ableitung bestimmen:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n (-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} &= -\frac{1}{m_0} \frac{d}{dz} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} \\ &= 1 - 2 \arctan \left(e^{-\frac{m_0}{2}z} \right) \sinh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^2 (-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} &= \frac{1}{m_0^2} \frac{d^2}{dz^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-e^{-m_0z})^n}{\frac{1}{4} - n^2} \\ &= -\frac{1}{2} \tanh \left(\frac{m_0}{2}z \right) + \arctan \left(e^{-\frac{m_0}{2}z} \right) \cosh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \end{aligned}$$

Damit wird (C.10) zu

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int dp F(p) &= 2\pi i e^{-\frac{m_0}{2}z} \left[\frac{m_0^2}{2} - \gamma(z) + \frac{m_0}{2}\varepsilon(z) \right] - 2im_0\varepsilon(z) + 2im_0^2 \tanh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \\ &\quad + \arctan \left(e^{-\frac{m_0}{2}z} \right) \left\{ 8i\gamma(z) \cosh \left(\frac{m_0}{2}z \right) - 4im_0^2 \cosh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \right. \\ &\quad \left. + 4im_0\varepsilon(z) \sinh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \right\}. \end{aligned}$$

Nach Einsetzen der Definitionen von $\gamma(z)$ und $\varepsilon(z)$ lässt sich erkennen, dass der Ausdruck in der geschweiften Klammer verschwindet. Der Term mit der eckigen Klammer geht über in

$$3\pi i m_0^2 e^{-\frac{m_0}{2}z} \left(\tanh^2 \left(\frac{m_0}{2}z \right) + \tanh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \right),$$

wobei sich der letzte Faktor mit Hilfe der Exponentialdarstellung zu

$$\tanh^2 \left(\frac{m_0}{2}z \right) + \tanh \left(\frac{m_0}{2}z \right) = \tanh \left(\frac{m_0}{2}z \right) \operatorname{sech} \left(\frac{m_0}{2}z \right) e^{\frac{m_0}{2}z}$$

C. Berechnungen mittels Residuensatz

umschreiben lässt. Im Endeffekt gilt dann

$$\mathcal{P} \int dp F(p) = 3\pi i m_0^2 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) - 4im_0^2 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

und Ersetzen des Integrals in (C.9) durch dieses Ergebnis liefert

$$d_0 g_{\chi_0}(z) + d_1 g_{\chi_1}(z) + \mathcal{P} \int dp d_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z) = \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

C.3. Integral in der Lösung der Feldgleichung

In der Entwicklung des Feldes $\Phi_{\vec{m}}(z)$, Gl. (4.50), tritt dieser noch zu bestimmende Ausdruck auf:

$$\mathcal{P} \int dp \frac{M_{\vec{n}}^{(0)} - \frac{p^2}{m_0^2} M_{\vec{n}}^{(1)} - \frac{2}{3} \frac{p^2(m_0^2 + p^2)}{m_0^4} M_{\vec{n}}^{(2)}}{\sum_{i=1}^{D-1} \left(\frac{m_i \pi}{L}\right)^2 + m_0^2 + p^2} d_{c,p} g_{\chi_{c,p}}(z). \quad (\text{C.11})$$

Benutzung von (3.47c), (4.46) und Transformation der Integrationsvariable auf die dimensionslose Größe p/m_0 , die dann wiederum in p umbenannt wird, führt auf

$$\begin{aligned} \frac{i}{4m_0^4} \mathcal{P} \int dp \left\{ M_{\vec{n}}^{(0)} - p^2 M_{\vec{n}}^{(1)} - \frac{2}{3} p^2 (1 + p^2) M_{\vec{n}}^{(2)} \right\} \frac{p^2 + 1}{p^4 + \frac{5}{4} p^2 + \frac{1}{4}} \\ \cdot \frac{\operatorname{csch}(p\pi)}{p^2 + \eta_{\vec{m}}} e^{ipm_0 z} [2p^2 m_0^2 + \gamma(z) + im_0 \varepsilon(z)p] \\ =: \frac{i}{4m_0^4} \mathcal{P} \int dp G_z(p), \end{aligned}$$

wobei noch der Integrand als $G_z(p)$ definiert wurde. Hier wurden wieder die Definitionen für $\eta_{\vec{m}}$, $\gamma(z)$ und $\varepsilon(z)$ aus (4.32) benutzt. Ersetzen der Exponentialfunktion durch die Euler-Relation und Aufteilen des Integranden in Real- und Imaginärteil zeigt bereits, dass der Hauptwert reell ist, da der Imaginärteil ungerade ist und daher verschwindet. Wie in den vorherigen Abschnitten wird zur Berechnung des Hauptwertes wieder der Residuensatz bemüht. Solange $z \neq 0$ ist, sorgt die Exponentialfunktion für das Verschwinden der Integrale über die Halbkreise in den Halbebenen.

Dazu müssen zuerst die Pole des Integranden in der komplexen Ebene bekannt sein. Nach Kürzen der rationalen Funktion

$$\frac{p^2 + 1}{p^4 + \frac{5}{4} p^2 + \frac{1}{4}} = \frac{1}{(p + \frac{i}{2})(p - \frac{i}{2})}$$

lässt sich erkennen, dass durch die im Nenner stehenden Polynome die Polstellen

$$p_p = \pm \frac{i}{2} \quad \text{und} \quad \pm i\sqrt{\eta_{\vec{m}}}$$

erzeugt werden, sowie durch den Kosekans Hyperbolicus die Pole

$$p_p = \pm ik \quad \text{mit} \quad k \in \mathbb{N}.$$

C.3. Integral in der Lösung der Feldgleichung

Prinzipiell könnte, falls $\sqrt{\eta_{\bar{m}}} \in \mathbb{Z}$ gilt, eine Polstelle der rationalen Funktion mit einer Polstelle des Kosekans Hyperbolicus zusammenfallen. Das Residuum dieser Polstelle müsste in diesem Fall mit der Rechenvorschrift für Polstellen zweiter Ordnung berechnet werden. Im Allgemeinen sollte es aber möglich sein die Systemlänge L so zu wählen, dass dieser Fall nicht eintritt. Die Polstellen werden im Folgenden also stets als Polstellen erster Ordnung behandelt. Da für $k = 0$ wieder die Problematik mit dem Pol auf der reellen Achse auftritt (s. Anhang C.2), geht das Residuum dieses Pols mit dem Faktor $1/2$ in das Ergebnis ein. Je nachdem ob z größer oder kleiner als Null ist, wird der Integrationsweg über die reelle Achse durch einen Halbkreis in der oberen oder unteren Halbebene geschlossen. Dann ist für $z > 0$:

$$\mathcal{P} \int dp G_z(p) = 2\pi i \left[\text{Res}_{\frac{i}{2}} (G_z(p)) + \text{Res}_{i\sqrt{\eta_{\bar{m}}}} (G_z(p)) + \sum_{k=1}^{\infty} \text{Res}_{ik} (G_z(p)) + \frac{1}{2} \text{Res}_0 (G_z(p)) \right]. \quad (\text{C.12})$$

Für $z < 0$ muss noch der mathematische Umlaufsinn bei Berechnung der Residuen durch das Vorzeichen berücksichtigt werden:

$$\mathcal{P} \int dp G_z(p) = -2\pi i \left[\text{Res}_{-\frac{i}{2}} (G_z(p)) + \text{Res}_{-i\sqrt{\eta_{\bar{m}}}} (G_z(p)) + \sum_{k=1}^{\infty} \text{Res}_{-ik} (G_z(p)) + \frac{1}{2} \text{Res}_0 (G_z(p)) \right].$$

Die Residuen sind dann

$$\begin{aligned} \text{Res}_{\pm \frac{i}{2}} (G_z(p)) &= \lim_{p \rightarrow \pm \frac{i}{2}} \left(p \mp \frac{i}{2} \right) G_z(p) \\ &= \frac{M_{\bar{n}}^{(0)} + \frac{1}{4} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{1}{8} M_{\bar{n}}^{(2)}}{\eta_{\bar{m}} - \frac{1}{4}} e^{\mp \frac{m_0}{2} z} \left[\frac{m_0^2}{2} - \gamma(z) \pm \frac{m_0}{2} \varepsilon(z) \right], \\ \text{Res}_{\pm i\sqrt{\eta_{\bar{m}}}} (G_z(p)) &= \lim_{p \rightarrow \pm i\sqrt{\eta_{\bar{m}}}} (p \mp i\sqrt{\eta_{\bar{m}}}) G_z(p) \\ &= \frac{M_{\bar{n}}^{(0)} + \eta_{\bar{m}} M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} \eta_{\bar{m}} (1 - \eta_{\bar{m}}) M_{\bar{n}}^{(2)}}{\frac{1}{4} - \eta_{\bar{m}}} \frac{\csc(\sqrt{\eta_{\bar{m}}}\pi)}{2\sqrt{\eta_{\bar{m}}}} \\ &\quad \cdot e^{\mp \sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 z} [2\eta_{\bar{m}} m_0^2 - \gamma(z) \pm \sqrt{\eta_{\bar{m}}} m_0 \varepsilon(z)], \\ \text{Res}_{\pm ik} (G_z(p)) &= \lim_{p \rightarrow ik} (p \mp ik) G_z(p), \quad k \in \mathbb{N} \\ &= \frac{(-1)^k M_{\bar{n}}^{(0)} + k^2 M_{\bar{n}}^{(1)} + \frac{2}{3} k^2 (1 - k^2) M_{\bar{n}}^{(2)}}{\pi \frac{1}{4} - k^2} \\ &\quad \cdot \frac{e^{\mp k m_0 z}}{\eta_{\bar{m}} - k^2} [-2m_0 k^2 + \gamma(z) \mp k m_0 \varepsilon(z)], \end{aligned}$$

C. Berechnungen mittels Residuensatz

$$\text{Res}_0 (G_z(p)) = \frac{4}{\pi\eta_{\vec{m}}} M_{\vec{n}}^{(0)} \gamma(z).$$

Bei Betrachtung der Residuen in der oberen Halbebene für $z > 0$ und in der unteren Halbebene für $z < 0$, unter Beachtung von

$$\begin{aligned} \varepsilon(z) &= -\varepsilon(-z), \\ \gamma(z) &= \gamma(-z), \end{aligned}$$

wird deutlich, dass die Werte der Residuen an einander gegenüberliegenden Polstellen in diesem Fall gleich sind. Also ist mit $z = |z|$ für $z > 0$ und $z = -|z|$ für $z < 0$:

$$\text{Res}_{p_p} (G_{|z|}(p)) = \text{Res}_{-p_p} (G_{-|z|}(p)).$$

Es folgt, dass

$$\mathcal{P} \int dp G_z(p) = -\mathcal{P} \int dp G_{-z}(p)$$

erfüllt ist. Da $g_{\chi_1}(z)$ in (4.50) ebenfalls antisymmetrisch ist, ergibt sich die Antisymmetrie des Feldes in z -Richtung, da nun gezeigt ist, dass alle Terme antisymmetrisch sind:

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = -\Phi_{\vec{m}}(-z).$$

Um das Ergebnis der Rechnung ohne Fallunterscheidung niederschreiben zu können, wird

$$\Phi_{\vec{m}}(z) = \text{sgn}(z) \Phi_{\vec{m}}(|z|)$$

ausgenutzt und für $\Phi_{\vec{m}}(|z|)$ der Residuensatz in der oberen Halbebene benutzt. Einsetzen der Residuen in (C.12) und dies wiederum eingesetzt in (4.50) liefert (4.51).

Literaturverzeichnis

- [AL73] E. Abers und B. Lee: *Gauge theories*. Physics Reports, 9(1):1–141, 1973.
- [AMM05] D. J. Amit und V. Martín-Mayor: *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 3. Auflage, 2005.
- [And69] T. Andrews: *Bakerian Lecture: On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter*. Proceedings of the Royal Society of London, 18:42–45, 1869.
- [Bel92] M. Le Bellac: *Quantum and Statistical Field Theory*. Oxford University Press, USA, 1992.
- [BLS65] F. P. Buff, R. A. Lovett und F. H. Stillinger: *Interfacial Density Profile for Fluids in the Critical Region*. Phys. Rev. Lett., 15(15):621–623, 1965.
- [CH58] J. W. Cahn und J. E. Hilliard: *Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy*. The Journal of Chemical Physics, 28(2):258–267, 1958.
- [Dre10] B. Drees: *Intrinsische Fluktuationen und Rauigkeit kritischer Grenzflächen*. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2010.
- [GKM96] C. Gutfeld, J. Küster und G. Münster: *Calculation of universal amplitude ratios in three-loop order*. Nuclear Physics B, 479:654–662, 1996.
- [GS75] J. L. Gervais und B. Sakita: *Extended particles in quantum field theories*. Phys. Rev. D, 11(10):2943–2945, 1975.
- [HM98] P. Hoppe und G. Münster: *The interface tension of the three-dimensional Ising model in two-loop order*. Physics Letters A, 238:265–270, 1998.
- [Hop97] P. Hoppe: *Analytische Berechnung der Oberflächenspannung im dreidimensionalen ϕ^4 -Modell in 2-Loop-Ordnung*. Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 1997.
- [Jas84] D. Jasnow: *Critical phenomena at interfaces*. Reports on Progress in Physics, 47(9):1059, 1984.
- [KM08] M. H. Köpf und G. Münster: *Interfacial Roughening in Field Theory*. Journal of Statistical Physics, 132:417–430, 2008.
- [Köp08] M. H. Köpf: *Rauigkeit von Grenzflächen in der Ising-Universalitätsklasse*. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2008.

Literaturverzeichnis

- [Lan36] L. D. Landau: *The Theory of Phase Transitions*. Nature, 138:840–841, 1936.
- [LL66] L. D. Landau und J. M. Lifschitz: *Statistische Physik*, Band 5 der Reihe *Lehrbuch der theoretischen Physik*. Akademie Verlag, Berlin, 1966.
- [Map11] *Maple 15*. Maplesoft, a division of Waterloo Maple Inc., Waterloo, Ontario, 2011.
- [Mat10] *Mathematica 8.0*. Wolfram Research, Inc., Champaign, Illinois, 2010.
- [MM05] M. Müller und G. Münster: *Profile and Width of Rough Interfaces*. Journal of Statistical Physics, 118:669–686, 2005.
- [Mül04] M. Müller: *Fluktuationen kritischer Grenzflächen auf verschiedenen Größenskalen*. Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2004.
- [Mün06] G. Münster: *Quantentheorie*. De Gruyter, 2006.
- [NO11] H. Nishimori und G. Ortiz: *Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 2011.
- [Par88] G. Parisi: *Statistical Field Theory*. Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1988.
- [PT33] G. Pöschl und E. Teller: *Bemerkungen zur Quantenmechanik des anharmonischen Oszillators*. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 83:143–151, 1933.
- [Raj75] R. Rajaraman: *Some non-perturbative semi-classical methods in quantum field theory (a pedagogical review)*. Physics Reports, 21(5):227 – 313, 1975.
- [Raj82] R. Rajaraman: *Solitons and Instantons*. North-Holland Pub. Co., 1982.
- [vdW79] J. D. van der Waals: *The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density*. Journal of Statistical Physics, 20:200–244, 1979. Ursprünglich veröffentlicht in: Verhandl. Konink. Akad. Wet. Amsterdam (Sect. 1), Vol. 1, No. 8 (1893).
- [WK74] K. G. Wilson und J. Kogut: *The renormalization group and the ε -expansion*. Physics Reports, 12(2):75 – 199, 1974.
- [WW52] E. T. Whittaker und G. N. Watson: *A Course of Modern Analysis*. Cambridge University Press, 4. Auflage, 1952.
- [ZJ02] J. Zinn-Justin: *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford University Press, USA, 4. Auflage, 2002.

Danksagung

- Ganz herzlich möchte ich Herrn Prof. Dr. Münster für die spannende Aufgabenstellung, die Betreuung und die lehrreichen Gespräche danken. Beim Verfassen einer rechenintensiven Arbeit ist es natürlich beruhigend, über Rechenfehler großer Physiker informiert zu werden.
- Dr. Michael Köpf danke ich für die bereitwillige Beantwortung meiner Fragen gerade zu Anfang der Einarbeitungsphase.
- Auch den Mitgliedern der Arbeitsgruppe Münster möchte ich für die gegenseitige Unterstützung und die manchmal notwendige Zerstreuung danken. Besonderer Dank gebührt Tobias Berheide und Christian Wittemeier für das Korrekturlesen.
- Zu tiefstem Dank bin ich selbstredend – und nicht zuletzt – denjenigen verpflichtet, die mir das Studium durch ihre Unterstützung erst ermöglicht haben: Meiner Familie und ganz besonders meinem Vater. Danke!

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst habe und keine anderen Quellen und Hilfsmittel als die angegebenen verwendet habe. Die Stellen der Arbeit, die den Werken anderer entnommen wurden, sind durch Angabe der Quelle kenntlich gemacht worden.

Ort, Datum

Unterschrift