

# Intrinsische Fluktuationen und Rauigkeit kritischer Grenzflächen

Als Diplomarbeit vorgelegt von  
Bastian Drees

Januar 2010



WESTFÄLISCHE  
WILHELMS-UNIVERSITÄT  
MÜNSTER







# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Landau-Theorie</b>	<b>5</b>
2.1 Kritische Phänomene . . . . .	5
2.2 Der Phasenübergang . . . . .	6
2.3 Das System mit Grenzfläche . . . . .	8
<b>3 Kapillarwellen-Theorie</b>	<b>11</b>
3.1 Die Grenzfläche als Membran . . . . .	11
3.2 Rauigkeit, Grenzflächendicke und Systemgröße . . . . .	12
3.3 Faltungsnäherung . . . . .	14
<b>4 Statistische Feldtheorie</b>	<b>17</b>
4.1 Grundlagen . . . . .	17
4.2 Berechnung des Grenzflächenprofils . . . . .	19
4.3 Feste Randbedingungen . . . . .	25
<b>5 Trennung der lang- und kurzreichweiten Fluktuationen</b>	<b>31</b>
5.1 Das Höhenprofil als kollektive Koordinate . . . . .	32
5.2 Der Hamiltonian . . . . .	35
<b>6 Intrinsische Fluktuationen</b>	<b>39</b>
6.1 Die Feldgleichung . . . . .	39
6.2 Pauli-Villars-Regularisierung . . . . .	43
6.3 Das intrinsische Grenzflächenprofil . . . . .	53
<b>7 Die Kapillarwellen</b>	<b>59</b>
7.1 Der Hamiltonian $\tilde{H}[h]$ . . . . .	60
7.2 Die Grenzflächendicke . . . . .	61
<b>8 Diskussion der Resultate</b>	<b>65</b>
8.1 Der Zusammenhang zwischen $l_{\text{int}}$ , $l_{\text{KW}}$ und $\Lambda$ . . . . .	65
8.2 Das intrinsische Profil . . . . .	67
8.3 Die intrinsische Grenzflächendicke . . . . .	73
<b>9 Zusammenfassung</b>	<b>75</b>

*Inhaltsverzeichnis*

<b>A Die Entwicklungskoeffizienten <math>A_{n,m}</math></b>	<b>77</b>
<b>B Ursprung der Koeffizienten <math>C_i</math></b>	<b>79</b>

Liste von Größen, die in der Arbeit definiert werden und von häufig verwendeten Beziehungen:

Größe	Definition (numerischer Wert)	Bedeutung
$\mathbb{K}$	$-\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0^2(x)$	Fluktuationsoperator
$m$	$\xi^{-1}$	inverse Korrelationslänge
$p_1(z)$	$\mathcal{N}\partial_z\phi(z)$	Wahrscheinlichkeitsdichte
$p_2(z)$	$\mathcal{N}(\partial_z\phi(z))^2$	Wahrscheinlichkeitsdichte
$u$	$\frac{g}{m}$	dimensionslose Kopplung
$v$	$\sqrt{\frac{3m^2}{g}}$	Potentialminimum
$w_1^2$	$\int dz z^2 p_1(z)$	Grenzflächendicke
$w_2^2$	$\int dz z^2 p_2(z)$	Grenzflächendicke
$\alpha$	$\ln\left(\frac{2\sqrt{\pi}}{3\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \gamma \approx -1,832$	
$\alpha^{\text{Div}}$	$\ln\left(\frac{2}{3}\right) + \frac{1}{2}\left[\gamma - \ln(4\pi)\right] - \frac{1}{\epsilon}$	
$\beta$	$(k_B T)^{-1}$	inverse Temperatur
$\gamma$	$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{1} + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{N} - \ln(N)\right) \approx -0,5772$	Euler'sche Konstante
$\eta$	$-\frac{3}{4}\ln(3) + \frac{13}{16} \approx -0,0115$	
$\kappa$	$\frac{1}{2}\left[\ln\left(\frac{2}{3}\right) + \ln\left(\frac{m_R}{\Lambda}\right)\right]$	
$\sigma$	$\frac{2m_R^2}{u_R} = \frac{2m_R^3}{g_R}$	Oberflächenspannung
$(\psi, \phi)$	$\int d^3x \psi^*(x)\phi(x)$	Skalarprodukt



# 1 Einleitung

In einem aus einer Flüssigkeit und ihrer Gasphase bestehenden System kommt es jenseits des kritischen Punktes zur Ununterscheidbarkeit der beiden Phasen. Ebenso kommt es in vielen Systemen binärer Fluide oberhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  zu einer homogenen Mischung, während sich die Fluide bei niedrigeren Temperaturen entmischen und zwei Phasen bilden.

Nähert man sich dem kritischen Punkt von niedrigen Temperaturen (also  $T \rightarrow T_c$  und  $T < T_c$ ), so kommt es zu einem unbegrenzten Anwachsen der Korrelationslänge  $\xi$  und es treten sogenannte **kritische Phänomene** auf. Da mit dem Anwachsen der Korrelationslänge korrelierte Fluktuationen auf makroskopischen Längenskalen verbunden sind, werden die mikroskopischen Details des Systems irrelevant. Dies führt dazu, dass sich so verschiedene Phänomene wie z.B. der Ferromagnet-Paramagnet-Übergang und das beschriebene Phänomen der Mischung/Entmischung zweier Fluide mit demselben Formalismus beschreiben lassen. Dieses gleichartige Verhalten verschiedener physikalischer Systeme in der Nähe des kritischen Punktes bezeichnet man als Universalität.

Das Verhalten solcher „kritischer Systeme“ lässt sich nun mit Hilfe einer makroskopischen Größe, dem Ordnungsparameter  $\phi$ , beschreiben. Dieser wird z.B. mit der Magnetisierung (Ising-Magnet) oder mit der Dichtedifferenz (System zweier Fluide) identifiziert. Oberhalb von  $T_c$  ist er gleich Null, was einem ungeordneten System mit hoher Symmetrie (z.B. einem homogenen Gemisch) entspricht, und nimmt für  $T < T_c$  einen von Null verschiedenen Wert an, womit ein System größerer Ordnung und daher geringerer Symmetrie (getrennte Phasen) charakterisiert wird.

Dieses Konzept des Ordnungsparameters wurde 1937 von L. D. LANDAU im Rahmen der nach ihm benannten **Landau-Theorie** (s. Kap. 2) entwickelt [La37]. In der vorliegenden Arbeit wird auf der Grundlage dieser Theorie ein System in der Ising-Universalitätsklasse, d.h. mit den Symmetrieeigenschaften des Ising-Modells behandelt.

In statistischen Systemen kann es also unter geeigneten Bedingungen zur Ausbildung verschiedener Phasen kommen, die durch eine, als Grenzfläche bezeichnete, Grenzschicht voneinander getrennt sind. Prominente Beispiele sind die Grenzflächen zwischen zwei Flüssigkeiten oder zwischen einer Flüssigkeit und ihrer Gasphase (die auch als Oberfläche bezeichnet wird), aber z.B. auch die Bloch'schen Wände im Ferromagneten.

Die Untersuchung der Eigenschaften solcher Grenzflächen hat eine lange Tradition und wird seit J. D. VAN DER WAALS [vdW93] vor allem im Rahmen der Thermo-

## 1 Einleitung

dynamik und Statistik betrieben. Hierbei wird die Grenzfläche für gewöhnlich durch sogenannte **Mean-Field-Theorien** (zu denen auch die oben beschriebene Landau-Theorie gehört) als kontinuierlicher Übergang von einer Phase zur anderen, also als ein intrinsisches Grenzflächenprofil, eine Grenzfläche mit einer intrinsischen Dicke beschrieben.

Auf der anderen Seite war schon zu Beginn des 20. Jahrhunderts das Phänomen einer rauen Grenzfläche (bzw. Oberfläche) bekannt. So schreibt Mandelstam 1913: „*Eine Flüssigkeitsoberfläche, die im idealen Gleichgewicht z.B. eben sein sollte, wird vermöge der unregelmäßigen Wärmebewegung fortdauernd deformiert.*“ [Ma13] Dieses Phänomen der **Rauigkeit** wird im Allgemeinen so beschrieben, dass die Grenzfläche als eine scharfe Trennung der beiden Phasen genähert und als schwingende Membran ohne intrinsische Dicke betrachtet wird [BLS65].

Diese beiden Näherungen, eine ebene Grenzfläche mit intrinsischer Dicke einerseits und eine raue Grenzfläche ohne intrinsische Dicke andererseits bilden die thematischen Eckpfeiler dieser Arbeit.

Über reale Grenzflächen lässt sich zusammenfassend sagen, „*daß es überhaupt keine scharfe Grenze [...] gibt, sondern daß eine Übergangsschicht existiert, in welcher ein kontinuierlicher Übergang stattfindet. Überdies muß jedoch bemerkt werden, daß die Niveauländerungen nicht vollkommen eben sein können, sondern daß sie [...] fortwährend wechselnde Verbiegungen erfahren müssen.*“ [Sm08]

Das heißt also, dass die beiden erwähnten Näherungen jeweils nur einen Teilaspekt der tatsächlichen Grenzfläche beschreiben, bzw. nur einen bestimmten Teil der Dichtefluktuationen betrachten. Während beim intrinsischen Profil Dichtefluktuationen auf kleinen Längenskalen (d.h. nicht wesentlich größer als die Korrelationslänge) eine Rolle spielen, sind für die **Kapillarwellen** (s. Kap. 3), die die Rauigkeit der Grenzfläche verursachen, Fluktuationen auf größeren (makroskopischen) Längenskalen verantwortlich.

Beide Näherungen lassen sich mit Hilfe der **Faltungsnäherung** kombinieren, so dass man im Resultat eine raue Oberfläche mit intrinsischer Dicke, wie sie im angeführten Zitat von Smoluchowski beschrieben wird, erhält. In der Faltungsnäherung wird dabei die scharfe Grenzfläche der Kapillarwellen-Theorie mit dem intrinsischen Profil ausgeschmiert. Dieses Vorgehen erscheint aufgrund des unterschiedlichen Gültigkeitsbereichs der beiden Näherungen plausibel und wird im Prinzip schon im obigen Zitat nahegelegt. Darüber hinaus befindet sich die Faltungsnäherung im Einklang mit experimentellen Ergebnissen (z.B. [HW69]<sup>1</sup>) und bietet daher ein gutes Mittel zur Vereinigung der beiden Näherungen.

Ein Problem bereitet jedoch die Festlegung des Cutoffs zwischen lang- und kurzreichweiten Fluktuationen, also Kapillarwellen und intrinsischem Profil. Die Frage, die sich dabei stellt, ist: Wie langreichweilig dürfen Fluktuationen sein, um noch „kurzreichweilig“ genannt zu werden und wie langreichweilig müssen Fluktuationen

---

<sup>1</sup> vgl. Note 1 auf S.100 in [Wi72]

sein, um „langreichweitig“ genannt zu werden? Oder anders gefragt: Was gilt als makroskopische Struktur, was als mikroskopische Struktur der Grenzfläche? Die Beantwortung dieser Frage ist offensichtlich mit einer gewissen Beliebigkeit verbunden, wenngleich die charakteristische Größe  $\xi$  die Größenordnung, in der der Cutoff liegen sollte, vorgibt.

Eine Möglichkeit, auf diese Unterscheidung ganz zu verzichten, bietet sich im Rahmen der **statistischen Feldtheorie** (s. Kap. 4). Das Landau-Ginzburg-Modell, eine feldtheoretische Erweiterung der Landau-Theorie, ermöglicht die Berücksichtigung von Fluktuationen auf allen Längenskalen. Dabei wird, analog zum Vorgehen in der Quantenfeldtheorie, eine Loop-Entwicklung um die klassische Lösung, d.h. die Lösung in der Landau-Näherung, durchgeführt. Im Rahmen des Landau-Ginzburg-Modells ist es so möglich, ein Grenzflächenprofil herzuleiten, in dem von vornherein Fluktuationen auf allen Längenskalen berücksichtigt werden [Kö08].

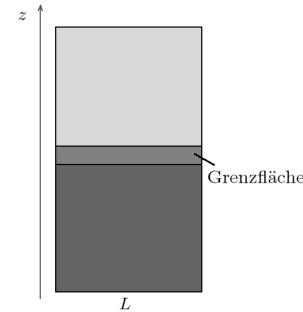
Das in drei Dimensionen erhaltene Profil beinhaltet das aus der Landau-Theorie bekannte Grenzflächenprofil und weist die aus der Kapillarwellen-Theorie bekannte Abhängigkeit vom Logarithmus der transversalen Systemgröße  $L$  auf.

Eine zentrale Rolle bei der Berechnung dieses Profils spielt der sogenannte Fluktuationsoperator  $\mathbb{K}$ , dessen  $z$ -abhängiger Teil ein Spektrum aus zwei diskreten Eigenwerten ( $\xi_0, \xi_1$ ) und einem kontinuierlichen Teil ( $\lambda_p$ ) besitzt (dabei ist die  $z$ -Richtung die Richtung senkrecht zur (ebenen) Grenzfläche).

Die darin auftretende Nullmode (d.h. die Mode zum Eigenwert  $\xi_0 = 0$ ) sorgt für eine Translation der Grenzfläche. Das Band von Moden proportional zu dieser **Translationsmode** (d.h. das Band, das sich aus der Nullmode und dem transversalen Teil des Spektrums zusammensetzt) ist darüber hinaus für das Auftreten der Kapillarwellen verantwortlich. Dementsprechend werden die beiden anderen Bänder (zu den Eigenwerten  $\xi_1$  und  $\lambda_p$ ) mit intrinsischen Fluktuationen assoziiert.

Diese Unterscheidung zwischen intrinsischem und Kapillarwellenanteil wird hier also von der Theorie, genauer vom Spektrum des Fluktuationsoperators vorgegeben und ist insofern nicht willkürlich, wie es die oben beschriebene Festlegung eines Cutoffs wäre.

Das zentrale Ziel dieser Arbeit ist die Aufteilung des Grenzflächenprofils nach diesem Kriterium (s. Kap. 5), also die Herleitung eines intrinsischen Profils aus dem vollständigen und die Unterscheidung zwischen intrinsischem (s. Kap. 6) und Kapillarwellenanteil (s. Kap. 7) in der vollständigen Theorie. Im Grunde entspricht dies dem umgekehrten Weg der Faltungsnäherung, da ein bestehendes vollständiges Grenzflächenprofil in seine verschiedenen Anteile zerlegt wird. Auf diese Weise werden die feldtheoretisch erhaltenen Ergebnisse in einen Zusammenhang mit der Faltungsnäherung gebracht und lassen sich mit Ergebnissen der Kapillarwellen-Theorie



## 1 Einleitung

sowie mit intrinsischen Profilen vergleichen (s. Kap. 8).

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

In Kapitel 2 werde ich die Landau-Theorie behandeln und das Grenzflächenprofil, sowie die Grenzflächendicke in der Landau-Näherung diskutieren.

Danach werde ich in Kapitel 3 zunächst die Kapillarwellen-Theorie vorstellen, um im Anschluss daran zu klären, wie in der Faltungsnäherung die Ergebnisse der verschiedenen Bereiche miteinander verknüpft werden.

Nach einigen Grundlagen der statistischen Feldtheorie werde ich in Kapitel 4 die Herleitung des vollständigen Profils, wie sie bei [Kö08] durchgeführt wird, kurz skizzieren. Am Ende des Kapitels folgt in Abschnitt 4.3 ein Exkurs, in dem die Möglichkeiten und Probleme von festen Randbedingungen diskutiert werden.

Die eigentliche Trennung der Fluktuationen findet in Kapitel 5 statt, in dem zunächst das Funktionalintegral in der Zustandssumme und dann der Hamiltonian nach den Moden des Fluktuationsoperators aufgeteilt werden.

In den Kapiteln 6 und 7 werden die so erhaltenen Teile einzeln behandelt. Zunächst wird in Kapitel 6 das intrinsische Profil und die intrinsische Dicke berechnet. Dies geschieht in der Pauli-Villars-Regularisierung, mit der, sozusagen *en passant*, auch die Ergebnisse von Köpf (die dort dimensionell regularisiert wurden) noch einmal überprüft werden.

Anschließend betrachte ich in Kapitel 7 den verbleibenden Teil der Fluktuationen, um zu zeigen, dass es sich dabei tatsächlich um den Kapillarwellenanteil handelt. Die so gefundenen Ergebnisse werde ich dann gemäß der Faltungsnäherung miteinander verknüpfen und das Resultat mit dem Ausgangspunkt, den Ergebnissen von Köpf, vergleichen.

Abschließend werde ich in Kapitel 8 meine Ergebnisse diskutieren und mit den Resultaten anderer Arbeiten vergleichen.

## 2 Landau-Theorie

Eine Grenzfläche (z.B. zwischen einer Flüssigkeit und einer Gasphase) erscheint im Allgemeinen als exakte Trennung zwischen der einen Phase diesseits und der anderen Phase jenseits der Fläche. So verwundert es nicht, dass noch zu Beginn des 19. Jahrhunderts Grenzflächen als scharfe Übergänge betrachtet wurden. Auch Thomas Young, der bereits 1816 von einer „Abstufung“ („*gradation*“) der Dichte innerhalb der Grenzfläche zwischen Flüssigkeit und Gas schreibt [Yo55], ist noch der Meinung, dass die Dicke der Grenzfläche keine nennenswerte Rolle spielt<sup>1</sup>.

Poisson ist 1831 der Erste, der Grenzflächen als kontinuierliche Dichteänderung auffasst [Po31], aber erst van der Waals beschreibt 1893 diesen Übergang auf der Grundlage thermodynamischer Argumente [vdW93].

Dieser Ansatz wurde später von Cahn und Hilliard [CH58] in etwas anderer Formulierung weiterentwickelt und von Landau [La37] im Kontext kontinuierlicher Phasenübergänge, d.h. in der Nähe des kritischen Punktes, verwendet. Diese Theorie bildet die Grundlage dieser Arbeit und soll in diesem Kapitel kurz skizziert werden.

### 2.1 Kritische Phänomene

Bei einer Vielzahl physikalischer Systeme kommt es am sogenannten kritischen Punkt zu einem kontinuierlichen Phasenübergang bzw. einem Phasenübergang zweiter Ordnung. Unter einem Phasenübergang  $n$ -ter Ordnung versteht man nach der Ehrenfest'schen Klassifizierung einen Phasenübergang, bei dem die  $(n - 1)$  ersten Ableitungen des thermodynamischen Potentials stetig sind, die  $n$ -te jedoch unstetig ist.

Beispiele sind der kritische Punkt im Phasendiagramm einer Flüssigkeit (Endpunkt der Verdampfungskurve), die Curie-Temperatur beim Ferromagnet-Paramagnet Übergang oder die Mischung/Entmischung binärer Flüssigkeiten (für einen Überblick siehe z.B. [Fi67], [BD92], [KS01]).

Die große Bedeutung kritischer Phänomene beruht auf deren Universalität. Das heißt, dass sich physikalische Größen einer breiten Klasse von Systemen in der Nähe der kritischen Temperatur  $T_c$  gleichartig verhalten.

Die Ursache hierfür liegt in dem unbegrenzten Anwachsen der Korrelationslänge  $\xi$  in der Nähe des kritischen Punktes. Während fern vom kritischen Punkt nur Wech-

---

<sup>1</sup> „the thickness of the whole stratum being always extremely minute in comparison with any sensible radius of curvature“

## 2 Landau-Theorie

selwirkungen auf mikroskopischen Längenskalen stattfinden, ist mit der Divergenz der Korrelationslänge ein Auftreten langreichweiter thermischer Fluktuationen verbunden. Aufgrund dieser kritischen Fluktuationen spielen mikroskopische Details des Systems in der Nähe von  $T_c$  keine Rolle mehr und physikalische Größen verschiedener Systeme zeigen ein universelles Verhalten.

Die Zugehörigkeit zu einer solchen Universalitätsklasse hängt daher nur von globalen Eigenschaften wie der Dimension und Symmetrie des Systems ab, dessen Verhalten sich aus diesem Grund mit Hilfe einer makroskopischen Größe, des sogenannten Ordnungsparameters  $\phi$ , beschreiben lässt.

Dieser ist ein Maß für die Ordnung des Systems und verschwindet oberhalb der kritischen Temperatur. Im Fall eines Ising-Magnets dient die Magnetisierung, im Fall zweier Flüssigkeiten (bzw. einer Flüssigkeit und ihrer Gasphase) die Dichtedifferenz als Ordnungsparameter. Während oberhalb von  $T_c$  die Magnetisierung des Systems gleich null ist, kommt es unterhalb der kritischen Temperatur zur spontanen Magnetisierung, d.h. einem Zustand höherer Ordnung; der Ordnungsparameter verschwindet nicht.

Ebenso bilden die Flüssigkeiten oberhalb der kritischen Temperatur ein homogenes Gemisch mit verschwindender Dichtedifferenz, während die Ausbildung zweier Phasen bei  $T < T_c$  eine endliche Dichtedifferenz zur Folge hat.

Die Landau-Theorie ermöglicht eine Beschreibung solcher Phasenübergänge mit Hilfe eines kontinuierlichen Ordnungsparameters  $\phi(x)$ .

## 2.2 Der Phasenübergang

Auch für diskrete Systeme, wie z.B. das oben erwähnte Ising-Modell, lässt sich ein kontinuierlicher Ordnungsparameter  $\phi(x)$  definieren, indem man den Ordnungsparameter als die (über ein mikroskopisches Volumen) um  $x$  gemittelte Magnetisierung betrachtet. Postuliert man die Analytizität der thermodynamischen Potentiale, so kann man diese nach Potenzen von  $\phi$  entwickeln. Da die Systeme der hier betrachteten Universalitätsklasse eine  $\phi \rightarrow -\phi$  Symmetrie besitzen, fordert man auch für das Potential eine solche Symmetrie, d.h. es treten nur gerade Potenzen von  $\phi$  auf.

Ein System in der Nähe des kritischen Punktes wird daher durch den Hamiltonian

$$H[\phi] = \int d^3x \mathcal{H}(\phi(x)) \quad (2.1)$$

beschrieben. Dabei ist

$$\mathcal{H}(\phi(x)) = \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + V(\phi) \quad (2.2)$$

die Hamiltondichte und

$$V(\phi) = \frac{g}{4!}\phi^4 + \frac{\mu^2}{2}\phi^2 \quad (2.3)$$

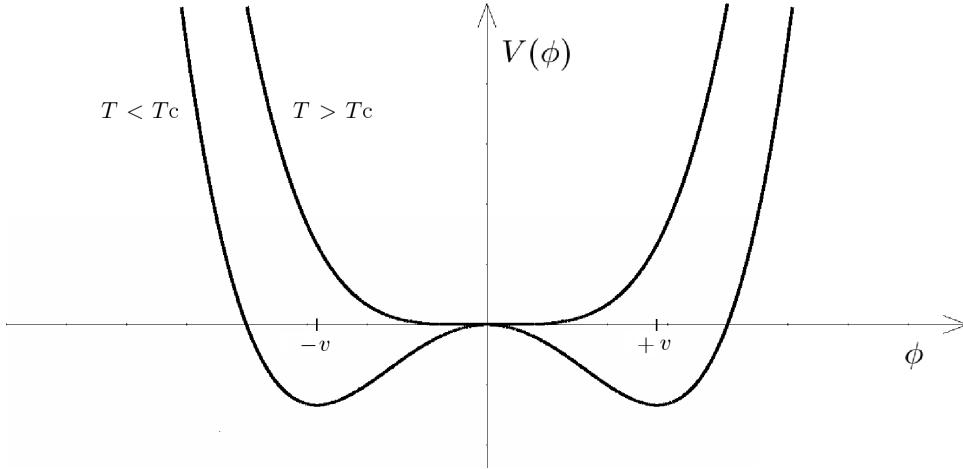


Abbildung 2.1: Das Potential in der symmetrischen und der gebrochenen Phase

das  $\phi^4$ -Potential in dem  $g > 0$  die Kopplungskonstante ist und  $\mu^2 \sim \text{sgn}(T - T_c)$  einen Vorzeichenwechsel bei  $T = T_c$  hat.

In der Landau-Approximation werden Fluktuationen vernachlässigt und nur das Feld  $\phi_0(x)$ , welches den Hamiltonian bzw. das Potential minimiert, betrachtet. Das Potential (vgl. Abb. 2.1) besitzt für  $T > T_c$  ( $\mu^2 > 0$ ) genau ein Minimum bei  $\phi_0 = 0$  während für  $T < T_c$  ( $\mu^2 < 0$ ) zwei Minima bei  $\pm v \neq 0$  entstehen; der Parameter  $\mu$  steuert also den Phasenübergang.

Für den Fall  $\mu^2 < 0$  ist es sinnvoll  $-\mu^2 = \frac{m^2}{2} > 0$  zu definieren und außerdem das Potential auf  $V(\pm v) = 0$  zu normieren. Damit erhält man die beiden Minima

$$\phi_0 = \pm v = \pm \sqrt{\frac{3m^2}{g}}$$

des Potentials

$$V(\phi) = \frac{g}{4!}(\phi^2 - v^2)^2 = \frac{g}{4!}\phi^4 - \frac{m^2}{4}\phi^2 + \frac{3}{8}\frac{m^4}{g}. \quad (2.4)$$

Da es am Phasenübergang zur spontanen Symmetriebrechung kommt, spricht man für  $T > T_c$  von der symmetrischen Phase und für  $T < T_c$  von der Phase gebrochener Symmetrie oder der gebrochenen Phase.

Die Masse  $m$  wird mit der inversen Korrelationslänge identifiziert, d.h.  $m = \xi^{-1}$ . In der Nähe des kritischen Punktes geht  $m \rightarrow 0$  und somit  $\xi \rightarrow \infty$ . Die Korrelationslänge divergiert also, wie im vorigen Abschnitt beschrieben, am kritischen Punkt.

## 2.3 Das System mit Grenzfläche

Ist man nun an einem System mit einer Grenzfläche interessiert, so betrachtet man das System in der gebrochenen Phase. In der symmetrischen Phase ist der Ordnungsparameter gleich null, was im Fall von binären Fluiden einem homogenen Gemisch entspricht. Erst durch das Auftreten zweier Potentialminima in der gebrochenen Phase wird die Ausbildung einer Grenzfläche möglich.

Da jedoch die konstanten Lösungen  $\phi_0 = v$  bzw.  $\phi_0 = -v$  energetisch günstiger sind als eine Lösung, die einen Übergang von  $-v$  nach  $+v$  aufweist, müssen entsprechende Randbedingungen gewählt werden, die die Existenz einer Grenzfläche erzwingen.

Es wird ein System mit einer  $L \times L \times \infty$  - Geometrie betrachtet (s. Abb. 2.2) und periodische Randbedingungen in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung, in z-Richtung aber antiperiodische Randbedingungen gewählt, d.h.

$$\begin{aligned}\phi(x_1 + L, x_2, z) &= \phi(x_1, x_2, z) = \phi(x_1, x_2 + L, z) \\ \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \phi(x_1, x_2, z) &= \pm v.\end{aligned}$$

Eine ebene, zur z-Richtung senkrechte Grenzfläche erfüllt die transversalen Randbedingungen, d.h. für das Grenzflächenprofil gilt  $\phi(x_1, x_2, z) = \phi(z)$ . Ich verwende im Folgenden die Notation  $x = (x_1, x_2, z) = (\vec{x}, z)$ .

Das Grenzflächenprofil in der Landau-Approximation erhält man nun durch Minimierung des Hamiltonians (2.2) mit dem Potential (2.4) unter Berücksichtigung der gerade gewählten Nebenbedingungen, die das Auftreten einer Grenzfläche erzwingen (genauer: das Auftreten einer ungeraden Anzahl von Grenzflächen).

Man erhält die Gleichung

$$\frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi} \Big|_{\phi_0(x)} = -\nabla^2 \phi_0(x) - \frac{m^2}{2} \phi_0(x) + \frac{g}{3!} \phi_0^3(x) = 0 \quad (2.5)$$

mit dem Cahn-Hilliard-Profil

$$\phi_0^{(a)}(z) = v \tanh\left(\frac{m}{2}(z - a)\right) \quad (2.6)$$

als Lösung. Dabei ist  $a$  ein beliebiger Parameter, der die Position der Grenzfläche festlegt. Dieses Profil wird auch als Kink bezeichnet und beschreibt einen um  $a$  symmetrischen Übergang von  $-v$  nach  $+v$ . Bei umgekehrter Wahl der Randbedingungen findet man den Anti-Kink ( $-\phi_0^{(a)}(z)$ ) als Lösung, die den Übergang von  $+v$  nach  $-v$  beschreibt.

Die Energie sowohl des Kink- als auch des Anti-Kink-Profiles beträgt

$$H[\phi_0] = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi_0)^2 + \frac{g}{4!} \phi_0^4 - \frac{m^2}{4} \phi_0^2 + \frac{3}{8} \frac{m^4}{g} \right\} = 2 \frac{m^3}{g} L^2. \quad (2.7)$$

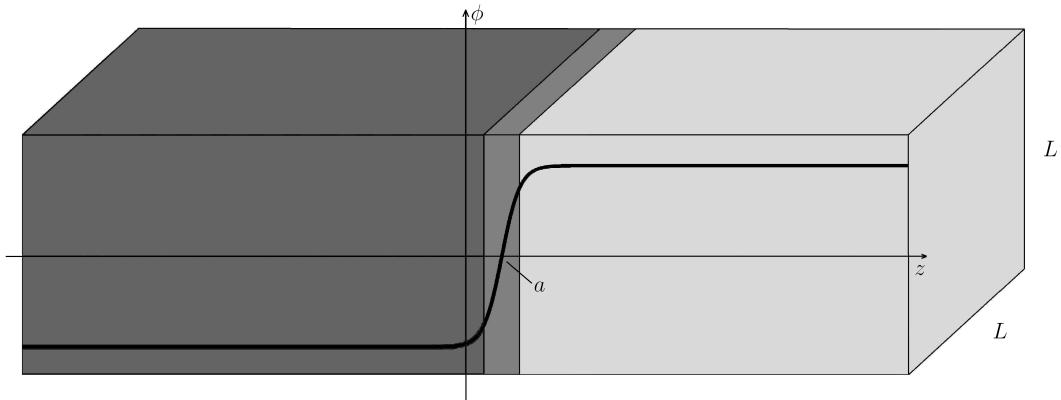


Abbildung 2.2: Die Geometrie des Systems und die schematische Darstellung der Kink-Lösung

### Grenzflächendicke

Das berechnete Profil ist das Grenzflächenprofil in der Landau-Näherung, mit dem nun die Grenzflächendicke  $w$  in dieser Näherung berechnet werden kann. Hierzu bedarf es einer geeigneten Definition der Dicke. Eine naheliegende Definition wäre z.B. die Halbwertsbreite. Diese oder ähnliche Ad-hoc-Definitionen sind allerdings nur für hinreichend einfache Profile sinnvoll, da der halbe Maximalwert im Allgemeinen weder eine charakteristische Größe des Profils noch eindeutig ist.

Um den tatsächlichen Verlauf eines allgemeinen Profils  $\phi(z)$  besser zu berücksichtigen, kann die Grenzflächendicke als zweites Moment  $\langle z^2 \rangle$  bezüglich einer geeigneten Gewichtung  $p(z)$  definiert werden:

$$w^2 = \langle z^2 \rangle = \int dz z^2 p(z). \quad (2.8)$$

Damit diese Definition ein brauchbares Maß der Dicke darstellt, muss eine Wahrscheinlichkeitsdichte gewählt werden, die im Bereich der Grenzfläche große und sonst nur kleine oder gar keine Beiträge liefert. Dies erfüllt die, z.B. in [BLS65] verwendete Definition

$$p_1(z) \sim \partial_z \phi(z).$$

Diese Wahl hat jedoch den Nachteil, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_1(z)$  für ein nicht monotonen Profil negative Werte annimmt.

Dieses Problem lässt sich vermeiden, wenn die Wahrscheinlichkeitsdichte proportional zum Quadrat der Ableitung

$$p_2(z) \sim (\partial_z \phi(z))^2$$

gewählt wird. Ich werde dennoch im Folgenden immer auch  $p_1$  verwenden, da alle auftretenden Profile innerhalb der betrachteten Parametergrenzen monoton steigen.

## 2 Landau-Theorie

Außerdem wird sich in Kapitel 6 zeigen, dass in der verwendeten Näherung auch  $p_2$  nicht immer positiv sein muss.

Verwendet man nun diese beiden Definitionen für das Kink-Profil, so erhält man mit der normierten Wahrscheinlichkeitsdichte

$$p_1(z) = \mathcal{N} \partial_z \phi_0(z) = \frac{m}{4} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m}{2}z\right)$$

den Ausdruck

$$w_1^2 = \frac{m}{4} \int dz z^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m}{2}z\right) = \frac{\pi^2}{3m^2} \quad (2.9)$$

und somit eine Grenzflächendicke

$$w_1 = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \frac{1}{m} \approx 1,81 \xi,$$

die in der Größenordnung der Korrelationslänge liegt.

Als Vergleich erhält man mit

$$p_2(z) = \frac{3m}{8} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m}{2}z\right)$$

das zweite Moment

$$w_2^2 = \frac{\pi^2 - 6}{3m^2} \quad (2.10)$$

und die Grenzflächendicke

$$w_2 \approx 1,14 \xi$$

ebenfalls in der Größenordnung der Korrelationslänge.

Mit der Landau-Theorie besitzt man also eine Theorie zur Beschreibung von Grenzflächen in nullter Näherung, d.h. unter Vernachlässigung statistischer Fluktuationen. Man erhält auf diese Weise den Kink (2.6) als Grenzflächenprofil und eine Grenzflächendicke, die, je nach Definition, bei wenigen Korrelationslängen liegt. Im folgenden Kapitel werde ich einen anderen Ansatz zur Beschreibung von Grenzflächen betrachten: die Kapillarwellen-Theorie.

# 3 Kapillarwellen-Theorie

Die Kapillarwellen-Theorie ist eine Theorie zur Beschreibung von Grenzflächen und beruht auf einem Ansatz von Buff, Lovett und Stillinger [BLS65]. In dieser Näherung wird die Grenzfläche als elastisches Trommelfell (*drumhead*) ohne intrinsische Dicke aufgefasst, das im Gleichgewichtszustand völlig eben ist. Aufgrund thermischer Fluktuationen kommt es zu Auslenkungen aus dem Gleichgewichtszustand und damit zur sogenannten Rauigkeit der Grenzfläche. Diese Kapillarwellen werden i.A. unter dem Einfluß eines äußeren Feldes (z.B. Gravitation) und bei endlicher Systemgröße (in transversaler Richtung) behandelt.

## 3.1 Die Grenzfläche als Membran

Man betrachte wiederum ein System mit quadratischer Ausdehnung der Länge  $L$  in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung und unendlicher Ausdehnung in  $z$ -Richtung, in dem die Grenzfläche im Gleichgewichtszustand bei  $z = 0$  positioniert sei. Das Auftreten einer Grenzfläche bricht die Translationsinvarianz des Systems, d.h. es treten Goldstone-Bosonen auf, mit denen langwellige Fluktuationen, die Kapillarwellen, assoziiert werden.

Aufgrund der Kapillarwellen kommt es nun zu Auslenkungen aus dem Gleichgewichtszustand, die durch ein Höhenprofil  $z = h(x_1, x_2)$  beschrieben werden (vgl. Abb. 3.1). Hier soll dieses Höhenprofil als eindeutige Funktion angenommen werden (d.h. ohne Überhänge, Blasen, etc.) und ferner soll der feldfreie Fall, in dem nur Arbeit gegen die Oberflächenspannung  $\sigma$  geleistet werden muss, betrachtet werden. Unter diesen Voraussetzungen ist der Hamiltonian  $H$  des Kapillarwellen-Modells durch

$$\beta H = \sigma \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 [1 + (\partial_{x_1} h(\vec{x}))^2 + (\partial_{x_2} h(\vec{x}))^2]^{\frac{1}{2}}$$

gegeben, der die Energie einer (dem Höhenprofil  $h(\vec{x})$  entsprechend) verformten Oberfläche beschreibt. Für kleine Auslenkungen  $h(\vec{x})$  aus dem Gleichgewichtszustand liefert eine Entwicklung der Wurzel nach  $[(\partial_{x_1} h)^2 + (\partial_{x_2} h)^2]$

$$\beta H = \sigma L^2 + \frac{\sigma}{2} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 [(\partial_{x_1} h(\vec{x}))^2 + (\partial_{x_2} h(\vec{x}))^2] + \dots ,$$

wobei der erste Term der Energie der flachen Oberfläche entspricht. In erster Näherung gilt für die Arbeit, die bei der Auslenkung aus der Gleichgewichtslage geleistet

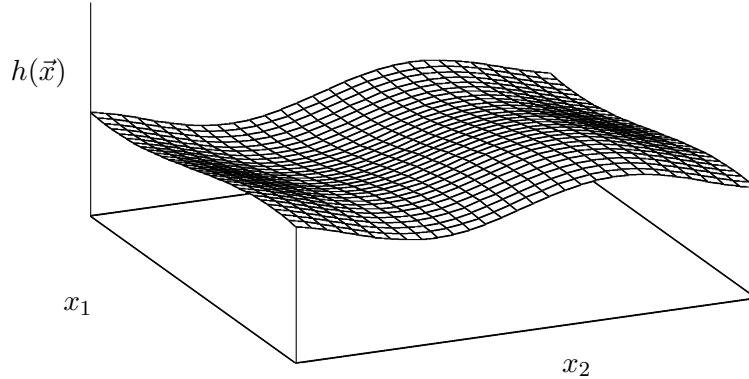


Abbildung 3.1: Höhenprofil

werden muss, also

$$\beta H_{\text{eff}} = \frac{\sigma}{2} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 [(\partial_{x_1} h(\vec{x}))^2 + (\partial_{x_2} h(\vec{x}))^2]. \quad (3.1)$$

Dies entspricht dem Hamiltonian einer zweidimensionalen freien, masselosen Feldtheorie.

## 3.2 Rauigkeit, Grenzflächendicke und Systemgröße

Die Kapillarwellen sorgen also für eine gewisse Rauigkeit der Grenzfläche, die man sich wie eine gekräuselte Wasseroberfläche vorstellen kann. Auch wenn die Grenzfläche in dieser Näherung keine intrinsische Dicke besitzt, ergibt eine Mittelung über die lokalen Positionen der Grenzfläche  $h(\vec{x})$  eine effektive, endliche Grenzflächendicke. In dieser Näherung ist somit die Rauigkeit der Grenzfläche die Ursache einer (zumindest bei endlicher Systemgröße (s.u.)) endlichen Grenzflächendicke. Um ein Maß für die Grenzflächendicke zu erhalten, benötigt man also ein Maß für die Rauigkeit.

Im hier betrachteten Fall periodischer Randbedingungen in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung und quadratischer Querschnittsfläche der Länge  $L$  lautet die Fouriertransformation des Höhenprofils

$$h(\vec{x}) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} e^{i \frac{2\pi}{L} \vec{n} \cdot \vec{x}} h(\vec{n}).$$

Unter Verwendung der Beziehung

$$\int_0^L d^2 \vec{x} e^{i \frac{2\pi}{L} (\vec{n} + \vec{m}) \cdot \vec{x}} = L^2 \delta_{\vec{n} + \vec{m}, \vec{0}}$$

wird Gleichung (3.1) zu

$$\beta H_{\text{eff}} = L^2 \frac{\sigma}{2} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{4\pi^2}{L^2} h(\vec{n}) h(-\vec{n}).$$

Der Boltzmann-Faktor  $e^{-\beta H_{\text{eff}}}$  ( $\beta = (k_B T)^{-1}$ ) ist dann ein Maß der Wahrscheinlichkeit einer Amplitude  $h(\vec{n})$  (vgl. z.B. [RW02]).

Als Maß der Rauigkeit und damit auch der Grenzflächendicke  $w$  verwendet man in der Kapillarwellennäherung die mittlere quadratische Fluktuation  $\langle h^2 \rangle$ . Das Grenzflächenprofil der Kapillarwellen-Theorie hat die Form einer Fehlerfunktion. Daher gilt für die Grenzflächendicke im Fall der Definition als zweites Moment bzgl.  $p_1$  (s.o.)

$$w_{1,\text{KW}}^2 = \langle h^2 \rangle,$$

während für  $p_2$

$$w_{2,\text{KW}}^2 = \frac{1}{2} \langle h^2 \rangle$$

gilt. Die mittlere quadratische Fluktuation erhält man durch

$$\langle h^2 \rangle = \beta^{-1} \frac{1}{2\pi\sigma} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} dk \frac{1}{k} = \beta^{-1} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{k_{\max}}{k_{\min}} \right).$$

Es fällt auf, dass hier sowohl ein oberer als auch ein unterer Cutoff nötig sind, damit der Ausdruck endlich bleibt. Der Cutoff  $k_{\min}$  ist durch die Systemgröße bestimmt und es gilt offensichtlich  $k_{\min} = \frac{2\pi}{L}$ .

Auf der anderen Seite ist  $k_{\max}$  durch den Gültigkeitsbereich der Kapillarwellen-Theorie bestimmt. Denn diese ist nur für Fluktuationen mit Wellenlängen  $\lambda \geq l_{\text{KW}} \sim \xi$  eine sinnvolle Näherung, da auf kleineren Skalen die intrinsische Dicke (die in der Größenordnung der Korrelationslänge  $\xi$  liegt) nicht mehr vernachlässigt werden kann. Allerdings ist der Cutoff  $l_{\text{KW}}$  nicht eindeutig bestimmt, sondern lässt sich in der Größenordnung der Korrelationslänge  $\xi$  mehr oder weniger beliebig wählen. Mit  $k_{\max} = \frac{2\pi}{l_{\text{KW}}}$  ergibt sich also für die Grenzflächendicke

$$w_{1,\text{KW}}^2 = \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{L}{l_{\text{KW}}} \right). \quad (3.2)$$

Ich habe an dieser Stelle  $\beta^{-1} = 1$  gesetzt (vgl. Kapitel 4), da dies in den späteren Kapiteln durchgängig der Fall sein wird.

Gleichung (3.2) zeigt, dass die Kapillarwellen eine logarithmische Divergenz der Grenzflächendicke mit der Systemgröße zur Folge haben, d.h. man benötigt eine endliche Systemgröße, um einen endlichen Ausdruck für die Grenzflächendicke zu erhalten. Alternativ ließe sich eine endliche Grenzflächendicke auch durch ein äußeres Feld (*pinning force*) erreichen (vgl. z.B. [Ja84]), welches hier aber nicht betrachtet werden soll.

### 3.3 Faltungsnäherung

Ein möglicher Ansatz, die Ergebnisse der Kapillarwellen-Theorie mit einem intrinsischen Grenzflächenprofil zu kombinieren, besteht in der Faltungsnäherung (s. z.B. [JR78], [Ab84]).

Da bei der Berechnung eines intrinsischen Profils nur Fluktuationen mit Wellenlängen  $\lambda < l_{\text{int}}$  und in der Kapillarwellennäherung nur Fluktuationen mit Wellenlängen  $\lambda > l_{\text{KW}}$  betrachtet werden, wobei sowohl  $l_{\text{int}}$  als auch  $l_{\text{KW}}$  in der Größenordnung der Korrelationslänge liegen, werden die Fluktuationen der beiden unterschiedlichen Skalen (intrinsische Fluktuationen  $\lesssim \xi$  und Kapillarwellen  $\gtrsim \xi$ ) als nicht miteinander wechselwirkend angenommen und die resultierenden Profile miteinander verknüpft.

Dies geschieht, indem der Schwerpunkt des intrinsischen Profils  $\phi_{\text{int}}$  an das Höhenprofil der Kapillarwellen  $h(\vec{x})$  geheftet wird oder andersherum gesprochen, indem man den scharfen Übergang, der in der Kapillarwellen-Theorie für die Membran angenommen wird, mit einer intrinsischen Dicke ausschmiert (s. Abbildung 3.2). In der Faltungsnäherung wird somit die Grenzfläche mit einem Feld der Form

$$\phi(x) = \phi_{\text{int}}(z - h(\vec{x}))$$

beschrieben. Mit  $\phi_{\text{int}}(z) = v \operatorname{sgn}(z)$  erhält man wieder die scharfe Grenzfläche der Kapillarwellennäherung, mit  $h(\vec{x}) = a$  das reine intrinsische Profil  $\phi_{\text{int}}(z - a)$  an der Position  $a$ . Das resultierende Grenzflächenprofil  $\bar{\phi}$  erhält man durch eine Mittelung des intrinsischen Profils über alle Positionen  $h(\vec{x})$

$$\begin{aligned} \bar{\phi}(x) &= \langle \phi_{\text{int}}(z - h(\vec{x})) \rangle_h \\ &= \int \mathcal{D}h \phi_{\text{int}}(z - h(\vec{x})) \rho[h] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dh \phi_{\text{int}}(z - h) P(h) \\ &= \phi_{\text{int}}(z) * P(z), \end{aligned} \quad (3.3)$$

also durch eine Faltung des intrinsischen Profils mit dem statistischen Gewicht der Kapillarwellen, d.h. dem oben beschriebenen Boltzmann-Faktor. Das Quadrat der Grenzflächendicke erhält man in diesem Bild (für die Definition  $p_1(z) \sim \partial_z \phi(z)$  (s.o.)) als Summe der Quadrate der intrinsischen Dicke und der in der Kapillarwellennäherung berechneten Dicke (3.2):

$$w_1^2 = w_{\text{int},1}^2 + \langle h \rangle^2 = w_{\text{int},1}^2 + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{L}{l_{\text{KW}}} \right). \quad (3.4)$$

Für den Fall der Definition  $p_2(z) \sim (\partial_z \phi(z))^2$  erhält man das Quadrat der Grenzflächendicke in guter Näherung ebenfalls als Summe der Quadrate der einzelnen Dicken:

$$w_2^2 \approx w_{\text{int},2}^2 + \frac{1}{2} \langle h \rangle^2. \quad (3.5)$$

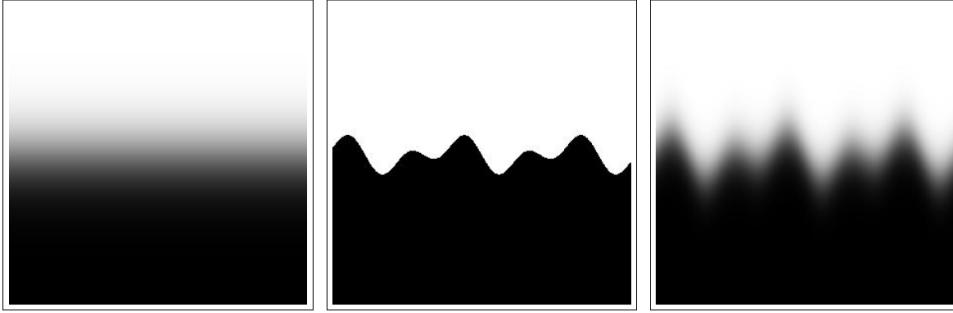


Abbildung 3.2: Die Grenzfläche in der Meanfieldnäherung, Kapillarwellentheorie und Faltungsnäherung (Quelle: [Mü04])

Aufgrund der Nichtlinearität der Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_2$  gilt diese Beziehung im Gegensatz zu (3.4) jedoch nicht exakt (vgl. die Diskussion verschiedener Definitionen der Grenzflächendicke bei [Mü04]).

Auch wenn diese Näherung den Vorteil hat, sehr anschaulich zu sein, besitzt sie dennoch einige Schönheitsfehler. Wie bereits in Abschnitt 3.2 erwähnt wurde, ist die Wahl des Cutoffs  $k_{\max}$  bzw.  $l_{\text{KW}}$  in der Größenordnung der Korrelationslänge willkürlich. Auch muss der Cutoff der Kapillarwellen-Theorie nicht unbedingt mit dem der „intrinsischen Theorie“  $l_{\text{int}}$  übereinstimmen, so dass sich die verschiedenen Bereiche unter Umständen überschneiden. Inwieweit in diesem Fall die beiden Bereiche als nichtwechselwirkend betrachtet werden dürfen, ist nicht ohne Weiteres klar.

Auch bei einer Theorie (vgl. Kapitel 4.2), die auf diesen Cutoff gänzlich verzichtet und Fluktuationen auf allen Längenskalen berücksichtigt (die ich deshalb hier als „vollständige Theorie“ bezeichne), lässt sich aus dem Resultat für die Grenzflächendicke im Nachhinein nicht bestimmen, welcher Teil „rein intrinsisch“ ist und welcher mit den Kapillarwellen zusammenhängt, da

$$w_{\text{int}}^2 \sim \xi^2 \sim \frac{1}{\sigma}$$

gilt und das Resultat mithin die Form

$$w^2 = A\xi^2 + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{L}{B\xi} \right)$$

(vgl. (4.15)) hat, in der die Parameter A und B, abhängig voneinander, veränderbar sind. Man sieht dem Resultat also nicht an, von welchen Fluktuationen die Beiträge stammen. Auch hier ist daher keine Rechtfertigung der Wahl des Cutoffs möglich.

Dennoch bietet die vollständige Theorie eine natürliche (weil aus der Theorie selbst entspringende) Unterscheidung von lang- und kurzreichweitigen Fluktuationen. Die Trennung dieser Fluktuationen voneinander und die Identifikation der intrinsischen und Kapillarwellenanteile einer solchen vollständigen Theorie, ist eines der zentralen Ziele dieser Arbeit und wird in den Kapiteln 5 - 7 durchgeführt.

### *3 Kapillarwellen-Theorie*

Die Berechnung eines Grenzflächenprofils, in dem Fluktuationen auf allen Längenskalen eine Rolle spielen, ist im Rahmen der statistischen Feldtheorie möglich, indem thermische Fluktuationen als Störung der Landau-Näherung berücksichtigt werden. Das folgende Kapitel gibt einen Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Methoden der statistischen Feldtheorie und stellt die 1-Loop-Ergebnisse für das Grenzflächenprofil und die Grenzflächendicke zusammen.

# 4 Statistische Feldtheorie

Bei einer Annäherung an den kritischen Punkt wächst die Korrelationslänge über alle Grenzen und thermische Fluktuationen können nicht länger vernachlässigt werden. Mithin verliert die Landau-Approximation in dieser sogenannten Fluktuationsumgebung ihre Gültigkeit [LL87].

Mit Hilfe der statistischen Feldtheorie des Landau-Ginzburg-Modells können, durch eine Entwicklung nach  $\beta^{-1} = k_B T$ , Korrekturen zur Landau-Näherung berechnet werden. Dieses Vorgehen ist formal völlig analog zur Berechnung von Korrekturen zur klassischen Näherung durch eine Entwicklung nach  $\hbar$  im Rahmen der quantenfeldtheoretischen  $\phi^4$ -Theorie.

Im Folgenden werden nun zunächst einige grundlegende Methoden der statistischen Feldtheorie und ihre Analogien zur Quantenfeldtheorie vorgestellt. Einen Überblick über die hier präsentierten Grundlagen und die formale Äquivalenz gewisser Methoden der Quantenfeldtheorie und der statistischen Physik findet sich in zahlreichen Lehrbüchern, z.B. in [LB91], [Br92], [PS95], uvm.

## 4.1 Grundlagen

Die oben angesprochene Analogie zeigt sich besonders deutlich bei einem Vergleich der statistischen Zustandssumme (4.1) eines Systems mit äußerem Quellfeld  $J$  (z.B. ein Ising-Spin-System mit äußerem Magnetfeld) mit dem erzeugenden Funktional (4.2) einer euklidischen Quantenfeldtheorie. Erstere hat die Form

$$Z[J] = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^3x (\mathcal{H} - J(x)\phi(x)) \right\} \quad (4.1)$$

mit  $Z_0 = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^3x \mathcal{H} \right\}$  und ganz analog ist das erzeugende Funktional durch

$$Z[J] = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int d^3x (\mathcal{L} - J(x)\phi(x)) \right\} \quad (4.2)$$

gegeben, wobei  $Z_0 = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int d^3x \mathcal{L} \right\}$  gilt und die Größen gemäß Tabelle 4.1 interpretiert werden.

Die Helmholtz'sche freie Energie  $W[J]$  erhält man als Logarithmus der Zustandssumme (4.1)

$$W[J] = -\beta^{-1} \ln(Z[J]) \quad (4.3)$$

#### 4 Statistische Feldtheorie

(vgl. erzeugendes Funktional  $W[J]$  in der QFT).

Wie in der Quantenfeldtheorie können  $Z[J]$  und  $W[J]$  auch in der statistischen Feldtheorie als erzeugende Funktionale aufgefasst werden.  $Z[J]$  ist das erzeugende Funktional der n-Punkt Korrelations- bzw. Greensfunktionen

$$\beta^{-n} \left( \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \right) \dots \left( \frac{\delta}{\delta J(x_n)} \right) Z[J] \Big|_{J=0} = \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle = G_n(x_1 \dots x_n).$$

Genauso erzeugt  $W[J]$  die Kumulantentheorie bzw. verbundenen Greensfunktionen, z.B.

$$-\beta^{-1} \left( \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \right) \left( \frac{\delta}{\delta J(x_2)} \right) W[J] \Big|_{J=0} = \langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle_C = G_C(x_1, x_2).$$

Über eine Legendre-Transformation erhält man die effektive Wirkung

$$\Gamma[\phi_C] = W[J] + \int d^3x \phi_C(x) J(x)$$

mit dem klassischen Feld  $\phi_C(x)$ , das als Funktional der Quelle  $J$  durch

$$\phi_C(x) = \langle \phi(x) \rangle_C = -\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)}$$

definiert ist.

Für ein verschwindendes Quellfeld  $J$  entspricht  $\phi_C(x)$  dem Vakuumerwartungswert  $\bar{\phi}(x) = \langle \phi(x) \rangle$  des Feldes  $\phi(x)$ . Da außerdem

$$\frac{\partial \Gamma[\phi_C]}{\partial \phi_C(x)} = J(x)$$

gilt, erkennt man leicht, dass

$$\frac{\partial \Gamma[\phi_C]}{\partial \phi_C(x)} \Big|_{\phi_C=\langle \phi \rangle} = 0$$

eine Bewegungsgleichung analog zur klassischen Euler-Lagrange-Gleichung liefert. Einen Überblick über einige formale Identitäten zwischen QFT und SFT verschafft Tabelle 4.1.

So wie in der Quantenfeldtheorie  $\hbar = 1$  gesetzt wird, wird auch hier  $\beta^{-1} = 1$  gesetzt und nur an einigen Stellen explizit ausgeschrieben, um zu verdeutlichen bis zu welcher Ordnung entwickelt wurde. Nachdem nun die formalen Grundlagen des Landau-Ginzburg-Modells gelegt sind, soll im nächsten Abschnitt ein Ausdruck für das Grenzflächenprofil bis zur 1-Loop-Ordnung berechnet werden.

Quantenfeldtheorie	Statistische Feldtheorie
Skalarfeld	$\phi(x)$
Vakuumerwartungswert	$\langle \phi \rangle$
Euklidische Wirkung $S_E[\phi] = \int d^D x \mathcal{L}(\phi(x))$	Hamiltonian $H[\phi] = \int d^D x \mathcal{H}(\phi(x))$
Plancksches Wirkungsquantum	$\hbar$
Erzeugendes Funktional	$Z[J]$
inverse Masse	$m^{-1}$
klassische Näherung	Landau-Näherung
Quantenfluktuationen	thermische Fluktuationen

Tabelle 4.1: Formale Äquivalenz von Ausdrücken der QFT und SFT

## 4.2 Berechnung des Grenzflächenprofils

Die in den ersten Kapiteln behandelten Theorien, d.h. die Landau- und die Kapillarwellen-Theorie, beschreiben, wie gesehen, jeweils nur einen Teilespekt realer Grenzflächen. Auch wenn sich mit der Faltungsnäherung ein intrinsisches Profil und Kapillarwellen zweckmäßig und erfolgreich kombinieren lassen, so ist es dennoch wünschenswert eine Theorie zu entwickeln, die Fluktuationen auf allen Längenskalen beinhaltet und somit keines Ad-hoc-Cutoffs bedarf.

Das Landau-Ginzburg-Modell bietet für das hier betrachtete Problem den störungstheoretischen Rahmen, in dem, über die Landau-Approximation hinausgehend, statistische Fluktuationen berücksichtigt werden. Dies erfolgt analog zur  $\phi^4$ -Theorie in der Quantenfeldtheorie durch eine Entwicklung des Hamiltonians um die klassische Kink-Lösung (2.6), d.h. durch eine Zerlegung des Feldes  $\phi$  in die klassische Lösung  $\phi_0$  und statistische Fluktuationen  $\varphi$  ( $\phi_0$  bezeichnet von hier an immer  $\phi_0^{(0)} = \phi_0(z)$ , d.h. den um  $z = 0$  zentrierten Kink). Für das Grenzflächenprofil  $\bar{\phi}$  gilt dann

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

Eine feldtheoretische Berechnung der Fluktuationen  $\varphi$  in 1-Loop-Ordnung führt auf ein Tadpole-Diagramm, das sich durch Lösen einer Differenzialgleichung (s. [Kö08], [KM08]) bestimmen lässt. Dies soll im Folgenden kurz skizziert und die wesentlichen Ergebnisse zusammengefasst werden.

### 4.2.1 Störungsrechnung

Die Entwicklung der Hamiltondichte (2.2) um  $\phi_0$  liefert

$$\mathcal{H}[\phi_0 + \varphi] = \mathcal{H}(\phi_0) + \frac{1}{2}\varphi(x)\mathbb{K}\varphi(x) + \frac{g_0}{3!}\phi_0(x)\varphi^3(x) + \frac{g_0}{4!}\varphi^4(x) \quad (4.4)$$

dabei ist

$$\mathbb{K} = -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0^2(x) \quad (4.5)$$

der Fluktuationsoperator. Hier sind die Größen  $g$ ,  $m$  und (das hier nicht explizit auftretende)  $v$  aus Kapitel 2.2 durch  $g_0$ ,  $m_0$  und  $v_0$  ersetzt worden, da es sich hierbei um die „nackten“ Parameter handelt, die später noch renormiert werden müssen.

Der Fluktuationsoperator besitzt eine Nullmode

$$\mathbb{K}\Psi_{\vec{0}\xi_0} = 0$$

mit  $\Psi_{\vec{0}\xi_0} \sim \partial_z \phi_0$ . Diese verlangt nach einer gesonderten Behandlung, da sie auf ein divergentes Integral führt. In Kapitel 5 benutze ich zur Trennung der Fluktuationen ein analoges Verfahren, daher lohnt es sich an dieser Stelle die Behandlung der Nullmode ein wenig genauer zu betrachten.

### Die Nullmode

Die Mode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}$  wird auch als Translationsmode bezeichnet, da sie für eine Translation der Grenzfläche in  $z$ -Richtung sorgt. Um die Fluktuationen proportional zu dieser Translationsmode separat von den anderen Moden behandeln zu können, bedient man sich der Methode der kollektiven Koordinate [GS75]. Als kollektive Koordinate verwendet man hier die Position des Kinks  $a$  und fügt

$$1 = \int da \delta(F(a))J$$

mit

$$F(a) = \int d^3x \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z-a)\phi(x)$$

und der Jacobi-Determinante  $J = |\partial_a F| \approx \sqrt{H[\phi_0]}$  im Funktionalintegral ein. Die  $\delta$ -Funktion sorgt dafür, dass im Funktionalintegral nur Fluktuationen  $\varphi(x)$ , die orthogonal zur Nullmode sind, d.h. für die

$$(\Psi_{\vec{0}\xi_0}, \varphi) = 0$$

gilt, übrig bleiben. Dabei ist das Skalarprodukt durch

$$(\psi, \phi) := \int d^3x \psi^*(x)\phi(x)$$

definiert. Die Zustandssumme lautet nun

$$Z_0 = \sqrt{H[\phi_0]} \int da \int_{N^\perp} \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]}. \quad (4.6)$$

In diesem Ausdruck sind die Fluktuationen proportional zur Translationsmode vollständig im Integral über den Parameter  $a$  absorbiert. Dieses Integral bleibt zwar divergent, aber es ist nun möglich die Fluktuationen orthogonal zu  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}$  einzeln zu behandeln.

### Die Feldgleichung

Nach der Behandlung der Nullmode kann der Parameter  $a$  beliebig gewählt werden und wird zweckmäßig als  $a = 0$  gewählt. Nun kann mit dem erzeugenden Funktional

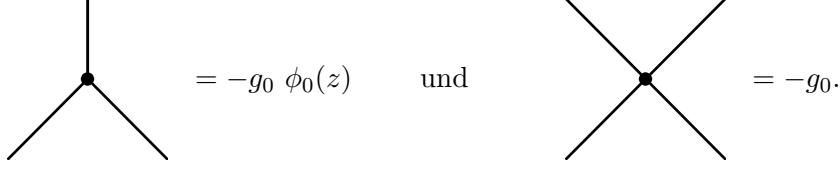
$$Z_{\perp}[J] = \frac{1}{Z_{\perp,0}} \int_{N^{\perp}} \mathcal{D}\varphi e^{-\beta H_{\perp}[\varphi] + (J,\varphi)} \quad (4.7)$$

eine Störungsrechnung im Unterraum  $N^{\perp}$  senkrecht zur Nullmode durchgeführt werden. Dabei ist

$$H_{\perp}[\varphi] = \frac{1}{2}(\varphi, \mathbb{K}\varphi) + \frac{g_0}{3!} \int d^3x \phi_0(x)\varphi^3(x) + \frac{g_0}{4!} \int d^3x \varphi^4(x)$$

und  $\int_{N^{\perp}}$  bedeutet, dass nur über Fluktuationen aus  $N^{\perp}$  integriert wird.

Es ergeben sich ein Dreier- und ein Vierervertex, die durch



gegeben sind. Wie bereits erwähnt bleibt in 1-Loop-Ordnung ein Tadpole-Graph, d.h.

$$\langle \varphi \rangle = \text{Diagramm eines geschlossenen Kreises mit einem Punkt in der Mitte} + \mathcal{O}(\beta^{-2}).$$

Der inverse, auf  $N^{\perp}$  beschränkte Fluktuationsoperator  $\mathbb{K}'_{xx'}^{-1}$  entspricht dabei dem Propagator und es bleibt

$$\langle \varphi(x) \rangle = \beta^{-1} \bar{\phi}_1(x) + \mathcal{O}(\beta^{-2}) = -\beta^{-1} \frac{g_0}{2} \int d^3x' \mathbb{K}'_{xx'}^{-1} \mathbb{K}'_{x'x'}^{-1} \phi_0(x') + \mathcal{O}(\beta^{-2})$$

zu berechnen. Dies lässt sich unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $\beta^{-2}$  zu der Differenzialgleichung

$$\mathbb{K} \bar{\phi}_1(x) + \frac{g_0}{2} \mathbb{K}'_{xx}^{-1} \phi_0(x) = 0 \quad (4.8)$$

umformen. Um diese zu lösen ist es sinnvoll,  $\mathbb{K}'_{xx}^{-1}$  in spektraler Darstellung auszudrücken, also

$$\mathbb{K}'_{xx}^{-1} = \sum_{\lambda} \Psi_{\lambda}^*(x) \Psi_{\lambda}(x) \frac{1}{\lambda} \quad (4.9)$$

zu schreiben, wobei  $\Psi_{\lambda}(x)$  die Eigenfunktionen von  $\mathbb{K}$  zu den Eigenwerten  $\lambda$  sind.

### 4.2.2 Das Spektrum des Fluktuationsoperators

Das Spektrum des Fluktuationsoperators (s. [Ra75]) erhält man aus der Lösung des Eigenwertproblems

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

Hierfür ist es sinnvoll, den Fluktuationsoperator in einen  $z$ -unabhängigen ( $-\Delta^{(2)}$ ) und einen  $z$ -abhängigen ( $\tilde{\mathbb{K}}$ ) Teil zu trennen. Dabei ist  $\Delta^{(2)}$  der zweidimensionale Laplace-Operator und  $\tilde{\mathbb{K}}$  der  $z$ -abhängige eindimensionale Schrödinger-Operator

$$\tilde{\mathbb{K}} = -\partial_z^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} v_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Da die Raumrichtungen senkrecht zu  $z$  auf das Intervall  $[0, L]^2$  beschränkt sind und periodische Randbedingungen vorliegen, gilt für die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Laplace-Operators:

$$k^2 = \frac{4\pi^2}{L^2} n^2, \quad \vec{n} \in \mathbb{Z}^2,$$

$$\varphi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \frac{1}{L} e^{i \frac{2\pi}{L} \vec{n} \cdot \vec{x}}, \quad \vec{x} \in [0, L]^2.$$

Der Operator  $\tilde{\mathbb{K}}$  besitzt zwei diskrete Eigenwerte  $\lambda \in \{\xi_0, \xi_1\}$  und ein kontinuierliches Spektrum  $\lambda_p$ . Für die Eigenwerte und Eigenfunktionen gilt:

$$\xi_0 = 0,$$

$$\psi_{\xi_0}(z) = \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right),$$

$$\xi_1 = \frac{3}{4}m_0^2,$$

$$\psi_{\xi_1}(z) = \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right),$$

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

$$\psi_{\lambda_p}(z) = \mathcal{N}_p e^{ipz} \left[ 2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + 3i m_0 p \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right],$$

mit der Normierungskonstanten

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

Das gesamte Spektrum von  $\mathbb{K}$  ist somit gegeben durch

$$\lambda_{\vec{n}\lambda} = \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 + \lambda,$$

$$\Psi_{\vec{n}\lambda}(x) = \varphi_{\vec{n}}(\vec{x}) \psi_\lambda(z)$$

## 4.2 Berechnung des Grenzflächenprofils

mit  $\lambda \in \{\xi_0, \xi_1, \lambda_p\}$ .

Setzt man dies in (4.9) ein und sortiert nach Potenzen des Sekans Hyperbolicus, so erhält man

$$\mathbb{K}'_{xx}^{-1} = C_0 + (C_2 + C_3) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + (C_1 + C_4 - C_2) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad (4.10)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} C_0 &= \frac{1}{2\pi} \int dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + (m_0^2 + p^2)L^2}, \\ C_1 &= \frac{3m_0}{8} \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{1}{4\pi^2 n^2}, \\ C_2 &= \frac{3m_0}{4} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + \frac{3}{4}m_0^2 L^2}, \\ C_3 &= -3m_0^2 \int dp \mathcal{N}_p^2 \sum_{\vec{n}} \frac{(m_0^2 + p^2)}{4\pi^2 n^2 + (m_0^2 + p^2)L^2}, \\ C_4 &= \frac{9}{4}m_0^4 \int dp \mathcal{N}_p^2 \sum_{\vec{n}} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + (m_0^2 + p^2)L^2}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

In dimensioneller Regularisierung (in  $D = 3 - \epsilon$  Dimensionen) treten  $1/\epsilon$ -Divergenzen in den Koeffizienten  $C_1$  bis  $C_4$  auf, die sich in den kombinierten Koeffizienten in (4.10) allerdings aufheben. Längere Rechnungen (s. [Kö08]) führen zu den Ergebnissen

$$\begin{aligned} C_0 &= -\frac{m_0}{4\pi}, \\ C_2 + C_3 &= \frac{3m_0}{16\pi} \ln(3), \\ C_1 + C_4 - C_2 &= \frac{3m_0}{16\pi} [\alpha + \ln(m_0 L)] \end{aligned} \quad (4.12)$$

mit der Konstanten

$$\alpha = \ln\left(\frac{2\sqrt{\pi}}{3\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \gamma \approx -1,832,$$

wobei  $\gamma \approx 0,577$  die Euler'sche Konstante ist.

Die Lösung der Differenzialgleichung (4.8) lautet

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_1(z) &= -\frac{g_0 v_0}{2m_0^2} \left\{ \left[ \frac{2}{3}(C_1 + C_4 - C_2) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + (C_0 + C_2 + C_3) \left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \times \right. \\ &\quad \left. \times \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + C_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Mit den Koeffizienten (4.12) erhält man so einen Ausdruck für die 1-Loop-Korrektur des Grenzflächenprofils.

### Grenzflächenprofil

In [Kö08] wurde die dimensionelle Regularisierung in  $D = 3 - \epsilon$  Dimensionen und das Renormierungsschema aus [Mü90] verwendet. Die gleichen Resultate erhält man auch, wie in Kapitel 6.2.2 gezeigt wird, in der Pauli-Villars-Regularisierung. Das renormierte Grenzflächenprofil in Ordnungen der dimensionslosen Kopplung

$$u_R = \frac{g_R}{m_R} \quad (\text{allgemeiner: } u_R = g_R m_R^{(D-4)})$$

ausgedrückt lautet dann:

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_R(z) = & v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \right. \\ & \left. - \frac{u_R}{8\pi} \left[ \frac{1}{2}[\alpha + \ln(m_R L)] \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\} \end{aligned} \quad (4.14)$$

mit

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

Von besonderem Interesse ist an dieser Stelle, dass dieser Ausdruck die von der Kapillarwellen-Theorie vorhergesagte logarithmische Abhängigkeit von der Systemgröße aufweist.

Aus dem Grenzflächenprofil lässt sich nun die Grenzflächendicke bestimmen.

### Grenzflächendicke

Mit der Definition aus Gleichung (2.8) und einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_1 \sim \partial_z \bar{\phi}_R(z)$  erhält man mit dem Profil (4.14) den Ausdruck

$$w_1^2 = \langle z^2 \rangle_1 = \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \alpha - \frac{\pi^2}{3} \eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L) \quad (4.15)$$

für die Grenzflächendicke. Dabei ist die Oberflächenspannung  $\sigma$  durch

$$\sigma = \frac{2m_R^2}{u_R}$$

definiert. Verwendet man die Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_2 \sim (\partial_z \bar{\phi}_R(z))^2$ , so findet man für die Grenzflächendicke

$$w_2^2 = \langle z^2 \rangle_2 = \frac{\pi^2 - 6}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5}\alpha - \frac{\pi^2 - 6}{3}\eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L). \quad (4.16)$$

In beiden Ausdrücken findet sich die Dicke des Cahn-Hilliard-Profiles in Form des ersten Terms wieder (vgl. Gl. (2.9) bzw. (2.10)) und ebenso die logarithmische Abhängigkeit von der Systemgröße. Darauf hinaus besitzen sie die gleiche Form wie Gleichung (3.4), die aus der Faltungsnäherung stammt. Der Ursprung des mittleren

Terms in beiden Ergebnissen ist jedoch unklar, da er sich ganz oder teilweise sowohl als 1-Loop-Korrektur des intrinsischen Profils verstehen lässt, als auch zum logarithmischen Term hinzugerechnet werden kann (vgl. Kapitel 3.3).

Um zu entscheiden, welcher Teil des Grenzflächenprofils bzw. der Grenzflächendicke aus kurzreichweitigen und welcher aus langreichweitigen Fluktuationen stammt, sollen in Kapitel 5 die in der Zustandssumme auftretenden Fluktuationen proportional zu  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  von den übrigen getrennt werden. Auf diese Weise können intrinsischer und Kapillarwellenanteil getrennt voneinander behandelt und somit eine Verbindung zwischen dem hier gefundenen Ergebnis und der Faltungsnäherung hergestellt werden.

Bevor ich mich jedoch jenem Kapitel widme, werde ich im nächsten Abschnitt die Abhängigkeit der Ergebnisse von den gewählten Randbedingungen betrachten. Bisher wurden immer periodische Randbedingungen in den transversalen Richtungen und antiperiodische Randbedingungen in  $z$ -Richtung gewählt. Im nächsten Abschnitt sollen Überlegungen angestellt werden, auf welche Art feste Randbedingungen gewählt werden können und welche Konsequenzen für das Spektrum des Fluktuationsoperators daraus resultieren.

## 4.3 Feste Randbedingungen

Bei den oben gewählten periodischen Randbedingungen kommt es wie gesehen zum sogenannten *interface wandering*, d.h. zu einer, durch die Nullmode hervorgerufenen, Translation der Grenzflächenposition. Dies sorgt vor allem bei numerischen Berechnungen für Probleme, da die Position der Grenzfläche nicht genau bestimmt werden kann (vgl. [Pa09]).

Eine Möglichkeit dieses Problem zu umgehen, bietet die Wahl fester Randbedingungen, die die Position der Grenzfläche fixieren. Möchte man die Grenzfläche z.B. bei  $z = 0$  fixieren, so wäre

$$\phi(0, x_2, z) = \phi(L, x_2, z) = \phi(x_1, 0, z) = \phi(x_1, L, z) = v_0 \operatorname{sgn}(z)$$

eine mögliche Wahl der Randbedingungen. Da hierbei an den Rändern ein abrunder Übergang von einer Phase zur anderen stattfindet, erwartet man bei diesen Randbedingungen starke Randeffekte und ein sinnvolles Grenzflächenprofil ließe sich nur fern von den Rändern (also z.B. als das Feld  $\phi(L/2, L/2, z)$ ) definieren oder durch Mittelung über die transversalen Richtungen erhalten.

Hier verwende ich eine andere Wahl fester Randbedingungen, die möglicherweise weniger starke Randeffekte aufweisen, da sie einen kontinuierlichen Übergang von einer Phase zur anderen vorgeben. Die naheliegende Wahl für einen solchen kontinuierlichen Übergang ist das Kinkprofil.

Ich betrachte also weiterhin ein in  $z$ -Richtung unendlich ausgedehntes System, das in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung auf ein Quadrat der Seitenlänge  $L$  beschränkt ist. Die Grenzfläche soll auch hier wieder bei  $z = 0$  liegen. Daher wähle ich in  $z$ -Richtung wie bisher

## 4 Statistische Feldtheorie

antiperiodische Randbedingungen,

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \phi(x_1, x_2, z) = \pm v_0,$$

während ich nun

$$\phi(0, x_2, z) = \phi(L, x_2, z) = \phi(x_1, 0, z) = \phi(x_1, L, z) = \phi_0(z) = v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

für die transversalen Richtungen wähle. Aus der Beziehung

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

folgt somit insbesondere, dass die Fluktuationen  $\varphi$  an den Rändern verschwinden müssen:

$$\varphi(0, x_2, z) = \varphi(L, x_2, z) = \varphi(x_1, 0, z) = \varphi(x_1, L, z) = 0.$$

Aus diesen Überlegungen ergeben sich einige Konsequenzen für das Spektrum des Fluktuationsoperators.

### 4.3.1 Das Spektrum des Fluktuationsoperators

Obige Randbedingungen lassen den  $z$ -abhängigen Teil  $\tilde{\mathbb{K}}$  des Fluktuationsoperators unverändert.

Für den transversalen Teil  $-\Delta^{(2)}$  gilt nun jedoch die Bedingung verschwindender Fluktuationen an den Rändern des Systems. Damit sind die Eigenfunktionen durch

$$\varphi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \frac{2}{L} \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2)$$

mit den Eigenwerten

$$k_i = \frac{\pi}{L} n_i \quad i = 1, 2 \quad n_i \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$$

bzw. im allgemeinen Fall von  $D$  Dimensionen durch

$$\varphi_{\vec{n}}(\vec{x}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{D-1}{2}} \prod_{i=1}^{D-1} \sin(k_i x_i)$$

mit den Eigenwerten

$$k_i = \frac{\pi}{L} n_i \quad i = 1 \dots (D-1) \quad n_i \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$$

gegeben.

(Auch wenn es sich hier nicht um die gleichen Eigenfunktionen und -werte handelt, benenne ich sie genau wie im vorigen Abschnitt, um die weitgehende Analogie herauszustellen. Ich verzichte außerdem zugunsten der Lesbarkeit auf einen weiteren Index

### 4.3 Feste Randbedingungen

und weise lediglich darauf hin, dass in allen Kapiteln (von diesem Abschnitt abgesehen) immer die Eigenfunktionen und -werte aus Abschnitt 4.2.2 verwendet werden. Gleiches gilt für das Inverse des Fluktuationsoperators.)

Für das Spektrum des gesamten Fluktuationsoperators erhält man damit :

$$\begin{aligned}\lambda_{\vec{n}\xi_0} &= \frac{\pi^2}{L^2} n^2, \\ \Psi_{\vec{n}\xi_0}(x) &= \frac{2}{L} \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right), \\ \lambda_{\vec{n}\xi_1} &= \frac{\pi^2}{L^2} n^2 + \frac{3}{4} m_0^2, \\ \Psi_{\vec{n}\xi_1}(x) &= \frac{2}{L} \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right), \\ \lambda_{\vec{n}\lambda_p} &= \frac{\pi^2}{L^2} n^2 + m_0^2 + p^2, \\ \Psi_{\vec{n}\lambda_p}(x) &= \frac{2}{L} \mathcal{N}_p \sin(k_1 x_1) \sin(k_2 x_2) e^{ipz} \times \\ &\quad \times \left[ 2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2} m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + 3i m_0 p \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right].\end{aligned}$$

Insbesondere fällt auf, dass der Fluktuationsoperator mit den oben gewählten Randbedingungen nun keine Nullmode mehr besitzt, da

$$\vec{n} \neq \vec{0} \quad \text{und sogar} \quad n_i > 0 \quad \forall i$$

gilt. Da die Nullmode für die Translation der Grenzfläche verantwortlich ist, die hier gewählten Randbedingungen eine solche Translation aber gerade verhindern, entspricht dies auch genau den Erwartungen.

Für den inversen Fluktuationsoperator ergibt sich damit folgender Ausdruck

$$\begin{aligned}\mathbb{K}_{xx}'^{-1} &= \frac{4}{L^2} \left\{ \frac{3m_0}{8} \sum_{\substack{n_1 > 0 \\ n_2 > 0}} \frac{L^2}{\pi^2 n^2} \sin^2(k_1 x_1) \sin^2(k_2 x_2) \operatorname{sech}^4(m_0/2z) + \right. \\ &\quad + \frac{3m_0}{4} \sum_{\substack{n_1 > 0 \\ n_2 > 0}} \frac{1}{\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4} m_0^2} \sin^2(k_1 x_1) \sin^2(k_2 x_2) \tanh^2(m_0/2z) \operatorname{sech}^2(m_0/2z) + \\ &\quad \left. + \int dp \sum_{\substack{n_1 > 0 \\ n_2 > 0}} \frac{1}{\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \sin^2(k_1 x_1) \sin^2(k_2 x_2) |\psi_{\lambda_p}(z)|^2 \right\}.\end{aligned}$$

Vergleicht man diesen Ausdruck mit dem entsprechenden Ausdruck (4.10) bei periodischen Randbedingungen, so fällt auf, dass hier  $x_1$ - und  $x_2$ -abhängige Terme übrig

#### 4 Statistische Feldtheorie

bleiben, während dort die Terme  $\varphi_{\vec{n}}(\vec{x})\varphi_{\vec{n}}^*(\vec{x}) \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}}$  lediglich Konstanten liefern.

Daher ist nun auch die Lösung der Gleichung (4.8) nicht mehr nur von  $z$  abhängig, sondern ebenfalls von  $x_1$  und  $x_2$ . Um diese Gleichung zu lösen bietet es sich an, die  $x_1$ - und  $x_2$ -abhängigen Teile auf beiden Seiten nach den oben bestimmten Eigenfunktionen  $\varphi_{\vec{n}}(\vec{x})$  zu entwickeln. Man erwartet also eine Lösung der Form

$$\bar{\phi}_1(x) = \sum_{\substack{m_1 > 0 \\ m_2 > 0}} \sin\left(\frac{\pi}{L}m_1x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}m_2x_2\right) \phi_{1,m_1,m_2}(z),$$

während mit  $l_i := 2m_i - 1$  und

$$\sin^2\left(\frac{\pi}{L}n_i x_i\right) = \sum_{m_i > 0} A_{n_i, l_i} \sin\left(\frac{l_i \pi}{L} x_i\right) \quad (\text{s. Anhang A}),$$

$$\mathbb{K}'^{-1}_{xx} = \left\{ \sum_{\substack{n_1, n_2 > 0 \\ m_1, m_2 > 0}} A_{n_1, l_1} A_{n_2, l_2} \sin\left(\frac{l_1 \pi}{L} x_1\right) \sin\left(\frac{l_2 \pi}{L} x_2\right) \mathbb{M}_{n_1, n_2} \right\}$$

folgt. Dabei sind die Entwicklungskoeffizienten durch

$$A_{n_i, l_i} = \frac{4n_i^2}{(2m_i - 1)(4n_i^2 - (2m_i - 1)^2)\pi} = \frac{4n_i^2}{l_i(4n_i^2 - l_i^2)\pi}$$

gegeben und

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_{n_1, n_2} = & \frac{4}{L^2} \left\{ \frac{3m_0}{8} \frac{L^2}{\pi^2(n_1^2 + n_2^2)} \operatorname{sech}^4(m_0/2z) + \right. \\ & + \frac{3m_0}{4} \frac{1}{\frac{\pi^2(n_1^2 + n_2^2)}{L^2} + \frac{3}{4}m_0^2} \tanh^2(m_0/2z) \operatorname{sech}^2(m_0/2z) + \\ & \left. + \int dp \frac{1}{\frac{\pi^2(n_1^2 + n_2^2)}{L^2} + m_0^2 + p^2} \left| \psi_{\lambda_p}(z) \right|^2 \right\}. \end{aligned}$$

Damit lautet die Feldgleichung

$$\begin{aligned} \left[ -\Delta^{(2)} + \tilde{\mathbb{K}} \right] \bar{\phi}_1(x) = & -\frac{g_0}{2} \left\{ \sum_{\substack{n_1, n_2 > 0 \\ m_1, m_2 > 0}} A_{n_1, l_1} A_{n_2, l_2} \times \right. \\ & \times \sin\left(\frac{l_1 \pi}{L} x_1\right) \sin\left(\frac{l_2 \pi}{L} x_2\right) \mathbb{M}_{n_1, n_2} \left. \right\} \phi_0(z). \end{aligned}$$

Da die  $\varphi_{\vec{n}}(\vec{x})$  ein vollständiges Orthonormalsystem bilden, muss diese Gleichung für jedes  $m_1$  und  $m_2$  bzw.  $l_1$  und  $l_2$  einzeln lösbar sein. Daher bleibt die Gleichung

$$\underbrace{\left[ \left( \frac{l_1 \pi}{L} \right)^2 + \left( \frac{l_2 \pi}{L} \right)^2 + \tilde{\mathbb{K}} \right]}_{=: \Omega} \phi_{1, l_1, l_2}(z) = -\frac{g_0}{2} \left\{ \sum_{n_1, n_2 > 0} A_{n_1, l_1} A_{n_2, l_2} \mathbb{M}_{n_1, n_2} \right\} \phi_0(z) \quad (4.17)$$

### 4.3 Feste Randbedingungen

zu lösen. Diese Gleichung hängt nun nur noch von  $z$  ab und es existiert, da der Operator  $\Omega$  ein Inverses besitzt, ein  $\phi_{1,l_1,l_2}(z)$ , das diese Gleichung löst. Dieses zu bestimmen ist aufgrund der hinzugekommenen  $A_{n_i,l_i}$  jedoch nicht ohne Weiteres möglich.

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung des Grenzflächenprofils besteht darin, einen analytischen Ausdruck für  $\mathbb{K}_{xx'}^{'-1}$  herzuleiten und mit diesem eine Lösung zu bestimmen. Ein solcher analytischer Ausdruck wurde für den Fall periodischer Randbedingungen z.B. in [Ho97] bestimmt, erweist sich aber als zu länglich und kompliziert, um dort bei der Berechnung von Graphen Verwendung zu finden.

Obwohl also das Problem der Nullmode bei festen Randbedingungen nicht auftritt, ergeben sich andere Probleme, die es nicht erlauben, mit den in den vorigen Abschnitten beschriebenen Mitteln ein Grenzflächenprofil zu bestimmen. Es sei noch darauf hingewiesen, dass zwar die Nullmode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}$  im Spektrum des Fluktuationsoptators fehlt, nicht aber das Band von Moden  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$ , das mit den Kapillarwellen assoziiert wird (s.u.). Daher ist zu erwarten, dass auch bei den hier betrachteten Randbedingungen eine  $\ln(L)$ -Abhängigkeit der Grenzfläche auftritt.

Nach diesen Zwischenüberlegungen soll nun im folgenden Kapitel die Trennung der lang- und kurzreichweiten Fluktuationen durchgeführt werden.



## 5 Trennung der lang- und kurzreichweitigen Fluktuationen

Wie in Abschnitt 4.2.2 gezeigt, besitzt der Fluktuationsoperator drei Bänder von Eigenfunktionen

$$\begin{aligned}\Psi_{\vec{n}\lambda}(x) &= \varphi_{\vec{n}}(\vec{x})\psi_{\lambda}(z) \\ \text{mit } \lambda &\in \{\xi_0 = 0, \xi_1 = \frac{3}{4}m_0^2, \lambda_p = m_0^2 + p^2\}\end{aligned}$$

die zu den Eigenwerten  $\lambda_{\vec{n}\lambda}$  gehören.

Die nur von  $z$  abhängige Nullmode

$$\Psi_{\vec{0}\xi_0}(x) = \varphi_{\vec{0}}(\vec{x})\psi_{\xi_0}(z) = \frac{1}{L}\psi_{\xi_0}(z) \sim \partial_z\phi_0(z)$$

ist die Goldstone-Mode, die aus der spontanen Brechung der Translationsinvarianz resultiert. Eine Fluktuation des Feldes proportional zu  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}$  mit einer Amplitude  $a$  ist mit einer Verschiebung der gesamten Grenzfläche in  $z$ -Richtung verbunden

$$\phi_0(z) - a \partial_z\phi_0(z) \approx \phi_0(z - a),$$

für die das System keine Energie aufwenden muss.

Mit dem Band der Goldstone-Moden

$$\sum_{\vec{n}} \Psi_{\vec{n}\xi_0}(x) = \sum_{\vec{n}} \varphi_{\vec{n}}(\vec{x})\psi_{\xi_0}(z) \quad \vec{n} \neq \vec{0}$$

wird nun ganz analog für kleine Amplituden  $h(\vec{n})$  eine lokale Verschiebung der Grenzfläche um  $h(\vec{x})$  assoziiert (vgl. z.B. [Wa80])

$$\phi_0(z) - \sum_{\vec{n}} h(\vec{n})\Psi_{\vec{n}\xi_0}(x) = \phi_0(z - h(\vec{x})). \tag{5.1}$$

In Kapitel 4.2 wurde die gesonderte Behandlung der Nullmode skizziert. Dabei wurde der Parameter  $a$ , der die Position der Grenzfläche festlegt, als kollektive Koordinate verwendet. Genauso soll nun im Folgenden das Höhenprofil  $h(\vec{x})$  als kollektive Koordinate eingeführt werden, um die kurz- und langreichweiten Fluktuationen getrennt voneinander behandeln zu können.

## 5 Trennung der lang- und kurzreichweiten Fluktuationen

Das Verfahren der kollektiven Koordinate wurde von Fadeev und Popov im Rahmen der Quantisierung von Eichfeldern entwickelt [FP67] und wird in verschiedenen Variationen durchgeführt (z.B. erfolgte die Behandlung der Nullmode analog zu [GS75]). Hier gehe ich entsprechend der in [DK80] verwendeten Methode vor.

Zuvor führe ich jedoch noch einige, den Raum der Fluktuationen und die relevanten Unterräume betreffende Bezeichnungen ein: Sei  $N$  der Raum aller Fluktuationen, dann betrachte ich folgende Zerlegung:

$$N = N^0 \oplus N^\perp = N^{\parallel \xi_0} \oplus N^{\perp \xi_0}$$

dabei ist

- $N^0$  der Raum der Konfigurationen proportional zur Nullmode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}(z)$
- $N^\perp$  der Raum der Konfigurationen orthogonal zur Nullmode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}(z)$
- $N^{\parallel \xi_0}$  der Raum der Konfigurationen proportional zum Band  $\varphi_{\vec{n}}(\vec{x})\psi_{\xi_0}(z)$
- $N^{\perp \xi_0}$  der Raum der Konfigurationen orthogonal zum Band  $\varphi_{\vec{n}}(\vec{x})\psi_{\xi_0}(z)$

mit  $\vec{n} \in \mathbb{Z}$ .

### 5.1 Das Höhenprofil als kollektive Koordinate

Ich verwende also zunächst das Höhenprofil  $h(\vec{x})$  als kollektive Koordinate, um eine Trennung von Kapillarwellen und intrinsischen Fluktuationen in der Zustandssumme

$$Z_0 = \int_N \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]}$$

zu erreichen.

Für hinreichend kleine Fluktuationen um die klassische Lösung ist das Feld  $\phi$  auch in erster Ordnung monoton steigend (in  $z$ -Richtung) und besitzt somit insbesondere nur einen Nulldurchgang. Ich definiere die Position dieses Nulldurchgangs, die mit  $\vec{x}$  variiert, als  $h(\vec{x})$ , also

$$\phi(\vec{x}, h(\vec{x})) = 0.$$

Im Prinzip wäre auch jeder andere konstante Wert  $c$  mit  $-v_0 < c < +v_0$  zur Definition des Höhenprofils geeignet. Die Wahl der Nullstelle ( $c = 0$ ) für dieses sogenannte „crossing criterion“ erscheint intuitiv jedoch als die natürliche und wird z.B. auch bei Fisher und Jin verwendet [FJ91].

Das verschobene Kinkprofil  $\phi_0(z - h(\vec{x}))$  erfüllt offensichtlich das *crossing criterion*, weshalb für die Fluktuationen

$$\tilde{\varphi}(\vec{x}, h(\vec{x})) = 0$$

folgt.

### 5.1 Das Höhenprofil als kollektive Koordinate

Es ist nun sinnvoll, das Feld

$$\phi(x) = \phi_0(z - h(\vec{x})) + \tilde{\varphi}(x)$$

in einer Form zu schreiben, in der die Fluktuationen ebenfalls verschoben sind, d.h.

$$\phi(x) = \phi_0(z - h(\vec{x})) + \varphi(\vec{x}, z - h(\vec{x})), \quad (5.2)$$

da in den im Folgenden auftretenden Integralen auf diese Weise alle Funktionen die gleichen Argumente besitzen. Wegen

$$1 = \int dF \delta(F) = \int dh \delta(F(h)) |\partial_h F(h)|$$

schreibe ich, um  $h(\vec{x})$  explizit als kollektive Koordinate einzuführen

$$1 = \prod_{\vec{x}} \left[ \int dh(\vec{x}) \delta(F(h(\vec{x}))) J_{\vec{x}} \right]$$

mit

$$F(h(\vec{x})) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z - h(\vec{x})) \phi(\vec{x}, z)$$

und

$$\begin{aligned} J_{\vec{x}} &= \left| \partial_h F \right| = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dz \partial_h \psi_{\xi_0}(z - h) \phi(x) \right| \\ &= \left| - \int_{-\infty}^{+\infty} dz (\partial_z \psi_{\xi_0}(z - h)) \phi(x) \right| \\ &= \underbrace{\left| -\psi_{\xi_0}(z - h) \phi(x) \right|}_{=0}^{\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z - h) \partial_z \phi(x). \end{aligned}$$

Der erste Term verschwindet weil  $\psi_{\xi_0} \sim \text{sech}^2(z) \rightarrow 0$  für  $z \rightarrow \pm\infty$  während  $\phi(x)$  endlich bleibt. Die Funktional-Determinante lässt sich mit (5.2) weiter umformen zu

$$\begin{aligned} J_{\vec{x}} &= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z - h) \partial_z \phi_0(z - h) + \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z - h) \partial_z \varphi(\vec{x}, z - h) \right| \\ &= \left| \frac{1}{L} \sqrt{H[\phi_0]} + \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z) \partial_z \varphi(\vec{x}, z) \right| \end{aligned} \quad (5.3)$$

Wobei im letzten Schritt eine Verschiebung  $(z - h) \rightarrow z$  durchgeführt wurde. Nach partieller Integration des zweiten Terms erhält die Jacobi-Determinante die Form

$$J_{\vec{x}} = \frac{1}{L} \sqrt{H[\phi_0]} \left[ 1 - \frac{L}{\sqrt{H[\phi_0]}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \partial_z \psi_{\xi_0}(z) \varphi(\vec{x}, z) \right].$$

## 5 Trennung der lang- und kurzreichweitigen Fluktuationen

Bei der Berechnung von  $\langle \varphi \rangle_{\perp \xi_0}$  in (6.2) würde durch den zweiten Term eine weitere Ableitung nach dem Quellfeld auftreten, die in 1-Loop-Näherung keine Beiträge liefert. Daher kann dieser Term in erster Ordnung vernachlässigt werden und es bleibt

$$J_{\vec{x}} \approx \frac{1}{L} \sqrt{H[\phi_0]}.$$

Der Faktor  $\sqrt{H[\phi_0]}$  taucht auch in der Funktionaldeterminante in Kapitel 4.2.1 aufgrund der Beziehung  $\|\partial_z \phi_0\| = \sqrt{H[\phi_0]}$  auf. Diese gilt, da

$$\int d^3x (\partial_z \phi_0)^2 = \frac{m_0^2 v_0^2}{4} \int d^3x \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) = 2 \frac{m_0^3}{g_0} L^2 = H[\phi_0]$$

(vgl. Gl. (2.7)). An dieser Stelle erhält man nun zusätzlich einen Faktor  $\frac{1}{L}$ , da

$$\begin{aligned} \|\partial_z \phi_0\| &= \int d^3x \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z) \partial_z \phi_0(z) = \frac{1}{L} \int_0^L d^2\vec{x} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z) \partial_z \phi_0(z) \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{L} \|\partial_z \phi_0\| = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z) \partial_z \phi_0(z). \end{aligned}$$

Darüber hinaus gilt für die Delta-Distribution

$$\begin{aligned} \delta(F(h(\vec{x}))) &= \delta\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z - h(\vec{x})) [\phi_0(z - h(\vec{x})) + \varphi(\vec{x}, z - h(\vec{x}))]\right) \\ &= \delta\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z - h(\vec{x})) \varphi(\vec{x}, z - h(\vec{x}))\right) \\ &= \delta\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z) \varphi(\vec{x}, z)\right). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die Faktoren  $J_{\vec{x}}$  spielen im Folgenden keine Rolle mehr und lassen sich als zusätzliche Normierungsfaktoren im Funktionalintegral über  $h$  absorbieren. Ich schreibe also

$$\prod_{\vec{x}} \int dh(\vec{x}) J_{\vec{x}} \rightarrow \int \mathcal{D}h,$$

womit die Zustandsumme

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}h \prod_{\vec{x}} \delta\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dz \psi_{\xi_0}(z) \varphi(\vec{x}, z)\right) e^{-\beta H[\phi]}$$

lautet. Aufgrund der Deltafunktion tragen nur Konfigurationen aus  $N^{\perp \xi_0}$  zum Funktionalintegral bei und somit ergibt sich

$$Z_0 = \int \mathcal{D}h \int_{N^{\perp \xi_0}} \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]} = \int \mathcal{D}h \int_{N^{\perp \xi_0}} \mathcal{D}\varphi e^{-\beta H[\phi]}. \quad (5.5)$$

Im Hamiltonian treten hier explizit nur noch Fluktuationen  $\varphi \in N^{\perp \xi_0}$  auf, die übrigen (d.h. aus  $N^{\parallel \xi_0}$ ) sind vollständig in  $h(\vec{x})$  absorbiert. Wenn daher im Folgenden von den Fluktuationen  $\varphi$  die Rede ist, sind damit immer Fluktuationen aus  $N^{\perp \xi_0}$  gemeint.

Im nächsten Abschnitt werde ich nun die lang- und kurzreichweitigen Fluktuationen im Hamiltonian  $H[\phi]$  trennen, um separate Ausdrücke für  $h$  und  $\varphi$  zu erhalten.

Ich verwende folgende Bezeichnungen:

$$x = (x_1, x_2, z) = (\vec{x}, z),$$

$$\tilde{z} = z - h(\vec{x}),$$

$$\tilde{x} = (x_1, x_2, z - h(\vec{x})).$$

Außerdem sind alle Größen, die mit Vektorpfeilen gekennzeichnet sind, Größen die in der  $(x_1, x_2)$ -Ebene wirken.

## 5.2 Der Hamiltonian

Um nun auch im Hamiltonian  $h$ -abhängige und  $\varphi$ -abhängige Ausdrücke voneinander trennen zu können, entwickle ich wie schon in Abschnitt 4.2.1 um die klassische Lösung. Allerdings entwickle ich hier um die verschobene Kinklösung  $\phi_0(z - h(\vec{x}))$ , die kein Extremum des Hamiltonian ist. Daher tritt, im Gegensatz zur Entwicklung in Abschnitt 4.2.1, ein linearer Term auf. Es zeigt sich aber, dass dieser in erster Ordnung vernachlässigt werden kann:

$$\begin{aligned} \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi} \Big|_{\phi=\phi_0} &= \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) \phi_0(\tilde{z}) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^3(\tilde{z}) \\ &= \underbrace{\left( -\partial_z^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) \phi_0(\tilde{z}) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^3(\tilde{z})}_{=0 \quad \text{vgl. Gleichung (2.5)}} - (\partial_{x_1}^2 + \partial_{x_2}^2) \phi_0(\tilde{z}) \\ &= -\partial_{x_1} (\partial_{x_1} h(\vec{x}) \partial_z \phi_0(\tilde{z})) - \partial_{x_2} (\partial_{x_2} h(\vec{x}) \partial_z \phi_0(\tilde{z})) \\ &= -(\partial_{x_1}^2 h(\vec{x})) \partial_z \phi_0(\tilde{z}) - (\partial_{x_1} h(\vec{x}))^2 \partial_z^2 \phi_0(\tilde{z}) - \\ &\quad - (\partial_{x_2}^2 h(\vec{x})) \partial_z \phi_0(\tilde{z}) - (\partial_{x_2} h(\vec{x}))^2 \partial_z^2 \phi_0(\tilde{z}) \\ &= -[\vec{\nabla}^2 h(\vec{x})] \partial_z \phi_0(\tilde{z}) - (\vec{\nabla} h(\vec{x}))^2 \partial_z^2 \phi_0(\tilde{z}) \end{aligned}$$

und weiter

$$\begin{aligned} \int d^3 \tilde{x} \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi} \Big|_{\phi_0} \varphi(\tilde{x}) &= - \int d^3 \tilde{x} [\vec{\nabla}^2 h(\vec{x})] \partial_z \phi_0(\tilde{z}) \varphi(\tilde{x}) - \int d^3 \tilde{x} (\vec{\nabla} h(\vec{x}))^2 \partial_z^2 \phi_0(\tilde{z}) \varphi(\tilde{x}) \\ &= - \int d^3 \tilde{x} (\vec{\nabla} h(\vec{x}))^2 \partial_z^2 \phi_0(\tilde{z}) \varphi(\tilde{x}). \end{aligned}$$

Hierbei gilt der letzte Schritt, da  $\partial_z \phi_0$  proportional zur Nullmode ist und  $\varphi \in N^{\perp \xi_0}$ , also  $\varphi \perp \partial_z \phi_0$ , ist. Der vernachlässigte Beitrag  $\int dz \partial_z \psi_{\xi_0}(z) \varphi(\vec{x}, z)$  in der Jacobi-Determinante (s.o.) entspricht gerade der  $z$ -Integration des hier verbleibenden Terms. Dieser kann somit ebenfalls vernachlässigt werden.

## 5 Trennung der lang- und kurzreichweitigen Fluktuationen

Damit lässt sich der Hamiltonian schreiben als

$$\begin{aligned} H[\phi_0 + \varphi] = & \int d^3\tilde{x} \left\{ \frac{1}{2}(\nabla\phi_0(\tilde{z}))^2 - \frac{m_0^2}{4}\phi_0^2(\tilde{z}) + \frac{g_0}{4!}\phi_0^4(\tilde{z}) \right\} + \\ & + \frac{1}{2!} \int d^3\tilde{x} d^3\tilde{x}' \frac{\delta^2 H[\phi]}{\delta\phi(\tilde{x})\delta\phi(\tilde{x}')} \Big|_{\phi=\phi_0} \varphi(\tilde{x})\varphi(\tilde{x}') + \\ & + \frac{1}{3!} \int d^3\tilde{x} d^3\tilde{x}' d^3\tilde{x}'' \frac{\delta^3 H[\phi]}{\delta\phi(\tilde{x})\delta\phi(\tilde{x}')\delta\phi(\tilde{x}'')} \Big|_{\phi=\phi_0} \varphi(\tilde{x})\varphi(\tilde{x}')\varphi(\tilde{x}'') + \dots \end{aligned}$$

Wie in Gleichung (4.4) bleiben auch hier vier Terme, von denen die letzten drei die folgenden Ausdrücke enthalten,

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 H[\phi]}{\delta\phi(\tilde{x})\delta\phi(\tilde{x}')} \Big|_{\phi_0} &= \left[ -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0^2(\tilde{z}) \right] \delta(\tilde{x} - \tilde{x}'), \\ \frac{\delta^3 H[\phi]}{\delta\phi(\tilde{x})\delta\phi(\tilde{x}')\delta\phi(\tilde{x}'')} \Big|_{\phi_0} &= g_0\phi_0(\tilde{z})\delta(\tilde{x} - \tilde{x}')\delta(\tilde{x} - \tilde{x}''), \\ \frac{\delta^4 H[\phi]}{\delta\phi(\tilde{x})\delta\phi(\tilde{x}')\delta\phi(\tilde{x}'')\delta\phi(\tilde{x}''')} \Big|_{\phi_0} &= g_0\delta(\tilde{x} - \tilde{x}')\delta(\tilde{x} - \tilde{x}'')\delta(\tilde{x} - \tilde{x}''), \end{aligned}$$

während der erste Term mit der Beziehung

$$(\nabla\phi_0(z - h(\vec{x})))^2 = (\partial_z\phi_0(\tilde{z}))^2 + (\vec{\nabla}h(\vec{x}))^2(\partial_z\phi_0(\tilde{z}))^2,$$

zu

$$\underbrace{\int d^3\tilde{x} \left\{ \frac{1}{2}(\partial_z\phi_0(\tilde{z}))^2 - \frac{m_0^2}{4}\phi_0^2(\tilde{z}) + \frac{g_0}{4!}\phi_0^4(\tilde{z}) \right\}}_{=:H[\phi_0]} + \underbrace{\frac{1}{2} \int d^3\tilde{x} (\vec{\nabla}h(\vec{x}))^2(\partial_z\phi_0(\tilde{z}))^2}_{=:H[h]}$$

wird.

Nach diesen Umformungen erhält man den Hamiltonian in erster Ordnung als

$$\begin{aligned} H[\phi_0 + \varphi] &= H[\phi_0] + \tilde{H}[h] + \underbrace{\frac{1}{2}(\varphi, \mathbb{K}\varphi) + \frac{g_0}{3!}(\phi_0, \varphi^3) + \frac{g_0}{4!}(\varphi^2, \varphi^2)}_{=:H_{\perp\xi_0}[\varphi]} \\ &= H[\phi_0] + \tilde{H}[h] + H_{\perp\xi_0}[\varphi]. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Ich setze dieses Resultat nun in (5.5) ein und erhalte für die Zustandssumme

$$Z_0 = e^{-\beta H[\phi_0]} \int \mathcal{D}h \ e^{-\beta \tilde{H}[h]} \int_{N^{\perp\xi_0}} \mathcal{D}\varphi \ e^{-\beta H_{\perp\xi_0}[\varphi]}, \tag{5.7}$$

völlig analog zu (4.6). Es lässt sich nun eine Störungsrechnung im Unterraum  $N^{\perp\xi_0}$  durchführen, indem man die Zustandssumme

$$Z_{\perp\xi_0,0} = \int_{N^{\perp\xi_0}} \mathcal{D}\varphi \ e^{-\beta H_{\perp\xi_0}[\varphi]} \tag{5.8}$$

mit dem Hamiltonian

$$H_{\perp \xi_0}[\varphi] = \frac{1}{2}(\varphi, \mathbb{K}''\varphi) + \frac{g_0}{3!}(\phi_0, \varphi^3) + \frac{g_0}{4!}(\varphi^2, \varphi^2)$$

definiert.  $\mathbb{K}''$  bezeichnet darin den auf  $N^{\perp \xi_0}$  beschränkten Fluktuationsoperator. In der Zustandssumme (5.7) sind die kurzreichweiten Fluktuationen explizit von den langreichweiten getrennt. Die Zustandssumme (5.8) ermöglicht es daher, einen Ausdruck für das intrinsische Grenzflächenprofil herzuleiten. Dies soll im folgenden Kapitel geschehen.



# 6 Intrinsische Fluktuationen

## 6.1 Die Feldgleichung

Das erzeugende Funktional der intrinsischen Fluktuationen (d.h. der Fluktuationen aus dem Unterraum  $N^{\perp \xi_0}$ ) erhält man durch Addition eines Terms  $(J, \varphi)$  zum Hamiltonian in der Zustandssumme (5.8):

$$Z_{\perp \xi_0}[J] = \frac{1}{Z_{\perp \xi_0, 0}} \int_{N^{\perp \xi_0}} \mathcal{D}\varphi e^{-\beta H_{\perp \xi_0}[\varphi] + (J, \varphi)} \quad (6.1)$$

dabei ist  $J$  das Quellfeld und

$$\begin{aligned} H_{\perp \xi_0}[\varphi] &= \frac{1}{2}(\varphi, \mathbb{K}''\varphi) + \int d^3x \mathcal{H}_{I, \perp \xi_0}(\varphi), \\ \text{mit } \mathcal{H}_{I, \perp \xi_0}(\varphi) &= \frac{g_0}{3!}\phi_0(x)\varphi^3(x) + \frac{g_0}{4!}\varphi^4(x). \end{aligned}$$

Ich schreibe das erzeugende Funktional wie folgt:

$$Z_{\perp \xi_0}[J] = \frac{1}{Z_{\perp \xi_0, 0}} \exp \left\{ -\beta \int d^3x \mathcal{H}_{I, \perp \xi_0} \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \int_{N^{\perp \xi_0}} \mathcal{D}\varphi e^{-\beta \frac{1}{2}(\varphi, \mathbb{K}''\varphi) + (J, \varphi)}.$$

Mit der Verschiebung

$$\tilde{\varphi} = \varphi - \beta^{-1}\mathbb{K}''^{-1}J$$

folgt dann die Beziehung

$$\begin{aligned} (\tilde{\varphi}, \mathbb{K}''\tilde{\varphi}) &= (\varphi, \mathbb{K}''\varphi) - 2\beta^{-1}(\varphi, J) + \beta^{-2}(J, \mathbb{K}''^{-1}J) \\ \iff (\varphi, \mathbb{K}''\varphi) &= (\tilde{\varphi}, \mathbb{K}''\tilde{\varphi}) + 2\beta^{-1}(\varphi, J) - \beta^{-2}(J, \mathbb{K}''^{-1}J) \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} Z_{\perp \xi_0}[J] &= \frac{1}{Z_{\perp \xi_0, 0}} \exp \left\{ -\beta \int d^3x \mathcal{H}_{I, \perp \xi_0} \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \times \\ &\times e^{\frac{1}{2}\beta^{-1}(J, \mathbb{K}''^{-1}J)} \int_{N^{\perp \xi_0}} \mathcal{D}\tilde{\varphi} e^{-\beta \frac{1}{2}(\tilde{\varphi}, \mathbb{K}''(\phi_0)\tilde{\varphi})}. \end{aligned}$$

Dabei ist das letzte Integral ein Gauß'sches und hängt nicht von  $J$  ab. Es liefert den Beitrag

$$\int_{N^{\perp \xi_0}} \mathcal{D}\tilde{\varphi} e^{-\beta \frac{1}{2}(\tilde{\varphi}, \mathbb{K}''(\phi_0)\tilde{\varphi})} = (\det \mathbb{K}'')^{-\frac{1}{2}}$$

## 6 Intrinsische Fluktuationen

und so wird das erzeugende Funktional zu

$$\begin{aligned} Z_{\perp \xi_0}[J] &= \frac{1}{Z_{\perp \xi_0,0} \sqrt{\det \mathbb{K}''}} \exp \left\{ -\beta \int d^3x \mathcal{H}_{I,\perp \xi_0} \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} e^{\frac{1}{2} \beta^{-1} (J, \mathbb{K}''^{-1} J)} \\ &= \frac{1}{Z_{\perp \xi_0,0} \sqrt{\det \mathbb{K}''}} \exp \left\{ -\beta \int d^3x \frac{g_0}{3!} \phi_0(x) \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)^3 \right\} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ -\beta \int d^3x \frac{g_0}{4!} \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)^4 \right\} e^{\frac{1}{2} \beta^{-1} (J, \mathbb{K}''^{-1} J)}. \end{aligned}$$

Für den Erwartungswert der intrinsischen Fluktuationen erhält man damit bis zur Ordnung  $\beta^{-1}$

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle_{\perp \xi_0} &= \frac{\delta}{\delta J(x)} \left\{ -\beta \int d^3x' \frac{g_0}{3!} \phi_0(x') \left( \frac{\delta}{\delta J(x')} \right)^3 \right\} \times \\ &\quad \times \left. \left\{ 1 + \frac{1}{2} \beta^{-1} (J, \mathbb{K}''^{-1} J) + \frac{1}{8} \beta^{-2} (J, \mathbb{K}''^{-1} J)(J, \mathbb{K}''^{-1} J) \right\} \right|_{J=0} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= -\beta^{-1} \int d^3x' \frac{g_0}{2} \mathbb{K}''_{xx'}^{-1} \mathbb{K}''_{x'x'}^{-1} \phi_0(x') + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \end{aligned} \quad (6.2)$$

Ich wende  $\mathbb{K}''$  auf beide Seiten von (6.2) an

$$\mathbb{K}'' \langle \varphi \rangle_{\perp \xi_0} = -\beta^{-1} \frac{g_0}{2} \mathbb{K}''_{xx}^{-1} \phi_0(x) + \mathcal{O}(\beta^{-2})$$

und erhalte somit in erster Ordnung die Gleichung

$$\mathbb{K}'' \langle \varphi \rangle_{\perp \xi_0} + \frac{g_0}{2} \mathbb{K}''_{xx}^{-1} \phi_0(x) = 0, \quad (6.3)$$

die formal Gleichung (4.8) entspricht.

### 6.1.1 Lösung der Feldgleichung

Um die so erhaltene Gleichung zu lösen, ist es sinnvoll den Operator  $\mathbb{K}''^{-1}$  genau wie sein Gegenstück in Gleichung (4.9) spektral darzustellen. Hierbei ergeben sich die gleichen Ausdrücke wie bei der Darstellung von  $\mathbb{K}'^{-1}$ ; allein der Koeffizient  $C_1$ , der aus den Moden  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  stammt (Überlegungen über den Ursprung der Koeffizienten finden sich in Anhang B), fehlt nun in der Darstellung von  $\mathbb{K}''^{-1}$ . Für den Kern des Operators erhält man bei zusammenfallenden Argumenten

$$\mathbb{K}''_{xx}^{-1} = C_0 + (C_2 + C_3) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + (C_4 - C_2) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \quad (6.4)$$

(vgl. Gleichung (4.10)).

Außerdem tritt in Gleichung (6.3) der Operator  $\mathbb{K}''$  an die Stelle des vollständigen Fluktuationsoperators in Gleichung (4.8). Da die explizite Form von  $\mathbb{K}''$  nicht bekannt

## 6.1 Die Feldgleichung

ist, ist nicht unmittelbar klar, ob Gleichung (6.3) analog zu Gleichung (4.8) gelöst werden kann.

Dieses Problem lässt sich durch folgende Überlegung lösen:

Bei allen in Gleichung (6.3) auftretenden Größen handelt es sich um die auf  $N^{\perp \xi_0}$  beschränkten Größen aus Gleichung (4.8), deren Lösung (vgl. Abschnitt 4.2.2)

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_1(z) = -\frac{g_0 v_0}{2m_0^2} & \left\{ \left[ \frac{2}{3}(C_1 + C_4 - C_2) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (C_0 + C_2 + C_3)\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + C_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right\} \quad (6.5) \end{aligned}$$

orthogonal zu  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  ist, da  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  gerade und  $\phi_1$  ungerade in  $z$  und damit

$$(\Psi_{\vec{n}\xi_0}(x), \phi_1(z)) = 0$$

ist. Daher ist die auf  $N^{\perp \xi_0}$  beschränkte Lösung

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{1,\perp \xi_0}(z) = -\frac{g_0 v_0}{2m_0^2} & \left\{ \left[ \frac{2}{3}(C_4 - C_2) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (C_0 + C_2 + C_3)\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + C_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right\} \quad (6.6) \end{aligned}$$

die Lösung der Gleichung (6.3).

Hier ergibt sich nun das Problem, dass in  $D = 3 - \epsilon$  Dimensionen zwar die kombinierten Koeffizienten  $C_0$ ,  $(C_2 + C_3)$  und  $(C_1 + C_4 - C_2)$  endliche Ausdrücke liefern (Gleichung (4.12)), die einzelnen Koeffizienten allerdings  $\epsilon$ -Pole aufweisen. Bei Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $\epsilon$  bzw.  $e^{-m_0 L} (m_0 L)^{-1/2}$  lauten die Koeffizienten  $C_2$  und  $C_4$  bei [Kö08]

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{3}{8\pi} m_0 L^\epsilon \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \ln(m_0 L) - \frac{1}{2} [\gamma - \ln(4\pi)] - \ln\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \right\}, \\ C_4 &= \frac{3}{16\pi} m_0 L^\epsilon \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \ln(m_0 L) - \frac{1}{2} [\gamma - \ln(4\pi)] + \ln\left(\frac{8}{9}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Schreibt man nun

$$L^\epsilon = \frac{(L m_0)^\epsilon}{m_0^\epsilon} = m_0^{-\epsilon} \left( 1 + \epsilon \ln(m_0 L) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right),$$

so erhält man die Koeffizienten in der Form (wiederum unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $\epsilon$ )

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{3}{8\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} [\gamma - \ln(4\pi)] - \ln\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \right\}, \\ C_4 &= \frac{3}{16\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} [\gamma - \ln(4\pi)] + \ln\left(\frac{8}{9}\right) \right\}. \end{aligned}$$

## 6 Intrinsische Fluktuationen

Somit bleibt hier ein  $\epsilon$ -Pol in dem Ausdruck ( $C_4 - C_2$ ) bestehen:

$$C_4 - C_2 = \frac{3}{16\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ -\frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{2} [\gamma - \ln(4\pi)] + \ln\left(\frac{2}{3}\right) \right\}.$$

Das intrinsische (unrenormierte) Grenzflächenprofil in erster Ordnung lautet damit

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{\perp\xi_0}(z) &= \phi_0(z) + \bar{\phi}_{1,\perp\xi_0}(z) \\ &= v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) - \frac{u_0 v_0}{8\pi} \left\{ \left[ \frac{m_0^{-\epsilon}}{2} \alpha^{\text{Div}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \left( \frac{3}{4} \ln(3) - 1 \right) \left( \frac{m_0}{2}z \right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) - \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right\} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Dabei enthält  $\alpha^{\text{Div}}$  einen einfachen Pol in  $\epsilon$

$$\alpha^{\text{Div}} = -\frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{2} [\gamma - \ln(4\pi)] + \ln\left(\frac{2}{3}\right),$$

welcher auch durch eine (evtl. modifizierte) Massen- oder Kopplungsrenormierung nicht zu beseitigen ist, da der divergente Term proportional zu  $\tanh(\frac{m_0}{2}z)\operatorname{sech}^2(\frac{m_0}{2}z)$  ist, während alle denkbaren Counterterme aus einer Entwicklung des Terms nullter Ordnung kommen müssten und somit proportional zu  $\operatorname{sech}^2(\frac{m_0}{2}z)$  wären.

Es ist also nicht möglich, im Rahmen der dimensionellen Regularisierung einen endlichen Ausdruck für das intrinsische Profil zu erhalten. Dennoch kann man bereits hier einige Eigenschaften des intrinsischen Profils erkennen:

Im Gegensatz zum vollständigen Profil in Gleichung (4.14) beinhaltet der gefundene Ausdruck keinen  $\ln(L)$ -Term mehr. Diese logarithmische Abhängigkeit von der Systemgröße wird wie in Kapitel 3 beschrieben von den Kapillarwellen hervorgerufen. Da diese mit den Moden parallel zu  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  identifiziert werden, stimmt das gefundene intrinsische Profil in dieser Hinsicht mit den theoretischen Erwartungen überein.

Im nächsten Abschnitt werde ich nun die Koeffizienten  $C_0$  bis  $C_4$  in Pauli-Villars-Regularisierung behandeln. Einerseits um zu erkennen, ob es sich bei den auftretenden Divergenzen um UV- oder IR-Divergenzen handelt, andererseits kann den Divergenzen in Pauli-Villars-Regularisierung leichter eine physikalische Bedeutung zugeschrieben werden als einem  $\epsilon$ -Pol, da zwischen Pauli-Villars-Cutoff  $\Lambda$  und dem Cutoff  $l_{\text{int}}$  eine Beziehung hergestellt werden kann (vgl. Kap. 8).

In der Pauli-Villars-Regularisierung [PV49] werden, im Gegensatz zur dimensionellen Regularisierung, nur Divergenzen, die bei großen  $k$  auftreten, d.h. Ultraviolett-Divergenzen regularisiert während eventuell vorhandene Infrarot-Divergenzen (die für große  $L$  auftreten) unverändert bleiben. Diese Unterscheidung zwischen UV- und IR-Divergenzen ist im Rahmen der dimensionellen Regularisierung nicht möglich.

Außerdem liefert eine alternative Regularisierung und Renormierung einen guten Test der verwendeten Ergebnisse, da das renormierte vollständige Grenzflächenprofil (4.14) unabhängig von der Art der Renormierung sein muss.

## 6.2 Pauli-Villars-Regularisierung

Bei der Pauli-Villars-Regularisierung wird ein Parameter  $\Lambda$  eingeführt, so dass der divergente Propagator für große  $k$  stark genug abfällt, um für endliche  $\Lambda$  einen endlichen Ausdruck zu erhalten. Außerdem soll für  $\Lambda \rightarrow \infty$  der ursprüngliche Propagator zurückerhalten werden. Die UV-Divergenzen werden also vollständig im Cutoff  $\Lambda$  absorbiert. Im Allgemeinen ist es auch möglich, mehrere solcher „Pauli-Villars-Massen“  $\Lambda_i$  einzuführen, indem man den divergenten Propagator gemäß

$$\frac{1}{k^2 + m_0^2} \longrightarrow \frac{1}{k^2 + m_0^2} - \sum_{i=1}^N \frac{a_i}{k^2 + \Lambda_i^2}$$

(mit der Bedingung  $\sum_{i=1}^N a_i = 1$ ) ersetzt. Hier verwende ich allerdings nur die Regularisierung mit einem Parameter  $\Lambda$ . Der Propagator wird dann wie folgt modifiziert:

$$\frac{1}{k^2 + m_0^2} \longrightarrow \frac{1}{k^2 + m_0^2} - \frac{1}{k^2 + \Lambda^2}. \quad (6.8)$$

Eine weitere Möglichkeit, die Pauli-Villars-Regularisierung anzuwenden, ist, im Hamiltonian Felder  $\phi_i$  mit Massen  $\Lambda_i$  einzuführen und den modifizierten Propagator aus der so veränderten Hamiltondichte herzuleiten (siehe z.B. [ZJ89], [Ho93]).

Da  $\Lambda \gg m_0$  ist, kann man in (6.8) leicht sehen, dass für kleine  $k$  der ursprüngliche Propagator dominiert und die IR-Divergenzen im Wesentlichen unverändert bleiben. Schreibt man den regularisierten Propagator in der Form

$$\frac{\Lambda - m_0}{(k^2 + m_0^2)(k^2 + \Lambda)},$$

sieht man außerdem direkt, dass dieser für große  $k$  nicht mehr mit  $k^{-2}$  sondern mit  $k^{-4}$  abfällt. Im allgemeinen Fall mit  $N$  Pauli-Villars-Massen fällt er mit  $k^{-(2N+2)}$  ab. Da die hier betrachteten Integrale aber schon für  $k^{-4}$  konvergieren, wird wie bereits erwähnt nur ein  $\Lambda$  eingeführt.

Nach diesen Vorüberlegungen lassen sich nun die Koeffizienten  $C_i$  regularisieren.

### 6.2.1 Die Koeffizienten in Pauli-Villars-Regularisierung

#### Der Koeffizient $C_0$

Der Koeffizient  $C_0$  lautet

$$C_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + p^2 L^2}.$$

In Pauli-Villars-Regularisierung erhält man

$$C_{0,\text{PV}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \left\{ \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + p^2 L^2} - \frac{1}{4\pi^2 n^2 + \Lambda^2 L^2 + p^2 L^2} \right\}.$$

## 6 Intrinsische Fluktuationen

Da ähnliche Summenterme auch in den anderen Koeffizienten vorkommen, berechne ich diese hier einmal allgemein, um im Folgenden dieses Ergebnis verwenden zu können. Es gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + \frac{3}{4}x^2} &= \int_0^\infty dt \left\{ e^{-\frac{3}{4}x^2 t} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} e^{-4\pi^2 n^2 t} \right\} \\ &= \int_0^\infty dt \left\{ e^{-\frac{3}{4}x^2 t} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} e^{-4\pi^2 n^2 t} - \frac{\theta(1-t)}{4\pi t} \right\} + \int_0^\infty dt \frac{\theta(1-t)}{4\pi t} \\ &=: D_{1,0}(x) + \int_0^\infty dt \frac{\theta(1-t)}{4\pi t}; \end{aligned}$$

$D_{1,0}(x)$  ist dabei benannt und definiert wie in [Ho97]. Dort wird diese Größe zu

$$D_{1,0}(x) = -\frac{1}{4\pi} [\gamma + \ln(\frac{3}{4}x^2)] + \mathcal{O}\left(\frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{2}x}}{\sqrt{x}}\right)$$

bestimmt. Das Integral

$$\int_0^\infty dt \frac{\theta(1-t)}{4\pi t}$$

spielt hier keine Rolle, da es in jedem Koeffizienten zweimal und mit unterschiedlichem Vorzeichen auftritt, so dass sich die Beiträge gegenseitig aufheben. Es muss lediglich eingeführt werden, um endliche Ausdrücke für  $t \rightarrow 0$  zu erhalten. Außerdem werden in den Koeffizienten jeweils die Terme  $\mathcal{O}(\exp(-\sqrt{3}x/2)/\sqrt{x})$  vernachlässigt, da diese wie  $\exp(-L)$  oder stärker abfallen. Damit erhalte ich:

$$\begin{aligned} C_{0,\text{PV}} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \left\{ D_{1,0}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{m_0^2 + p^2} L\right) - D_{1,0}\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{\Lambda^2 + p^2} L\right) \right\} \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \ln\left(\frac{\Lambda^2 + p^2}{m_0^2 + p^2}\right) \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dp \ln\left(\frac{\Lambda^2 + p^2}{m_0^2 + p^2}\right) \\ &= \frac{\Lambda - m_0}{4\pi}. \end{aligned} \tag{6.9}$$

Dabei habe ich in der letzten Zeile (4.222.1) aus [GR81] benutzt. Hier tritt also eine lineare Divergenz in  $\Lambda$  auf, während der Koeffizient in dimensioneller Regularisierung endlich bleibt. Es wird sich weiter unten aber zeigen, dass nach der Renormierung in beiden Fällen das gleiche Ergebnis erhalten wird.

### Der Koeffizient $C_1$

Der Koeffizient  $C_1$  ist gegeben durch

$$C_1 = \frac{3m_0}{8} \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq 0}} \frac{1}{4\pi^2 \vec{n}^2}.$$

In Pauli-Villars-Regularisierung erhält man

$$\begin{aligned}
 C_{1,\text{PV}} &= \frac{3m_0}{8} \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} \left\{ \frac{1}{4\pi^2 \vec{n}^2} - \frac{1}{4\pi^2 \vec{n}^2 + \Lambda^2 L^2} \right\} \\
 &= \frac{3m_0}{8} \left\{ \int_0^\infty dt \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t} - \right. \\
 &\quad \left. - \int_0^\infty dt' \left\{ e^{-\Lambda^2 L^2 t'} \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t'} \right\} \right\} \\
 &= \frac{3m_0}{8} \left\{ \int_0^\infty dt \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t} - \frac{\theta(1-t)}{4\pi t} - \right. \\
 &\quad \left. - \int_0^\infty dt' \left\{ e^{-\Lambda^2 L^2 t'} \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t'} - \frac{\theta(1-t')}{4\pi t'} \right\} \right\} \\
 &= \frac{3m_0}{8} \left\{ \int_0^\infty dt \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t} - \frac{\theta(1-t)}{4\pi t} - \right. \\
 &\quad \left. - \int_0^\infty dt' \left\{ e^{-\Lambda^2 L^2 t'} \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t'} - \frac{\theta(1-t')}{4\pi t'} \right\} + \frac{1}{\Lambda^2 L^2} \right\} \\
 &= \frac{3m_0}{8} \left( Z_{0,0} - D_{1,0} \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \Lambda L \right) + \frac{1}{\Lambda^2 L^2} \right).
 \end{aligned}$$

Hier ist die Größe  $Z_{0,0}$  ebenfalls benannt und definiert wie in [Ho97], nämlich

$$Z_{0,0} = \int_0^\infty dt \sum_{\substack{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2 \\ \vec{n} \neq \vec{0}}} e^{-4\pi^2 \vec{n}^2 t} - \frac{\theta(1-t)}{4\pi t}.$$

Unter Verwendung von

$$Z_{0,0} = \frac{1}{2\pi} \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \frac{\gamma}{4\pi}$$

aus [Ho97] und Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $(\sqrt{\Lambda L} \exp(-\Lambda L))$  und  $(\Lambda L)^{-2}$  erhalte ich somit

$$C_{1,\text{PV}} = \frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln \left( \frac{\Lambda}{m_0} \right) + \gamma + \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \ln(m_0 L) \right\}. \quad (6.10)$$

## 6 Intrinsische Fluktuationen

### Der Koeffizient $C_2$

$C_2$  ist definiert durch

$$C_2 = \frac{3m_0}{4} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 \vec{n}^2 + \frac{3}{4} m_0^2 L^2}.$$

Pauli-Villars-Regularisierung liefert

$$C_{2,\text{PV}} = \frac{3m_0}{4} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \left\{ \frac{1}{4\pi^2 \vec{n}^2 + \frac{3}{4} m_0^2 L^2} - \frac{1}{4\pi^2 \vec{n}^2 + \Lambda^2 L^2} \right\}.$$

Analoge Umformungen wie oben führen zu

$$\begin{aligned} C_{2,\text{PV}} &= \frac{3m_0}{4} \left( D_{1,0}(m_0 L) - D_{1,0}\left(\frac{2}{\sqrt{3}} \Lambda L\right) \right) \\ &= \frac{3m_0}{16\pi} \left( -\gamma - \ln\left(\frac{3}{4} m_0^2 L^2\right) + \gamma + \ln(\Lambda^2 L^2) \right) \\ &= \frac{3m_0}{8\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \ln\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

### Der Koeffizient $C_3$

Der Koeffizient

$$C_3 = -3 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \mathcal{N}_p^2 (m_0^4 + m_0^2 p^2) \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + p^2 L^2}$$

lässt sich mit  $v = p/m_0$  und  $\mathcal{N}_p^2 = (2\pi(4p^4 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4))^{-1}$  schreiben als

$$C_3 = -\frac{3m_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4 + 5v^2 + 1} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + m_0^2 v^2 L^2}$$

und in Pauli-Villars-Regularisierung

$$\begin{aligned} C_{3,\text{PV}} &= -\frac{3m_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4 + 5v^2 + 1} \times \\ &\quad \times \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \left( \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + m_0^2 v^2 L^2} - \frac{1}{4\pi^2 n^2 + \Lambda^2 L^2 + m_0^2 v^2 L^2} \right) \\ &= -\frac{3m_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4 + 5v^2 + 1} \times \\ &\quad \times \left\{ D_{1,0}\left(\frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{1+v^2} m_0 L\right) - D_{1,0}\left(\frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{1+\frac{m_0^2 v^2}{\Lambda^2}} \Lambda L\right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Unter Vernachlässigung von Termen analog zu den oben vernachlässigten erhalte ich

$$C_{3,\text{PV}} = -\frac{3m_0}{8\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4+5v^2+1} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda^2}{m_0^2}\right) + \ln\left(1+\frac{m_0^2}{\Lambda^2}v^2\right) - \ln(1+v^2) \right\}$$

und es bleiben die folgenden Integrale:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4+5v^2+1} = \frac{\pi}{2},$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4+5v^2+1} \ln\left(1+\frac{m_0^2}{\Lambda^2}v^2\right) = \frac{\pi}{2} \frac{m_0}{\Lambda} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda^2}\right) \quad \text{für} \quad \Lambda \gg m_0$$

und

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1+v^2}{4v^4+5v^2+1} \ln(1+v^2) = \pi \ln\left(\frac{3}{2}\right).$$

Damit ergibt sich unter Vernachlässigung der Terme  $\mathcal{O}(\Lambda^{-1})$

$$C_{3,\text{PV}} = -\frac{3m_0}{8\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) - \ln\left(\frac{3}{2}\right) \right\}. \quad (6.13)$$

### Der Koeffizient $C_4$

$$C_4 = \frac{9}{4} m_0^4 \int_{-\infty}^{+\infty} dp \mathcal{N}_p^2 \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + p^2 L^2}$$

schreibt sich mit  $\mathcal{N}_p$  und  $v$  wie bei  $C_3$  als

$$C_4 = \frac{9}{8\pi} m_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dv (4v^4 + 5v^2 + 1)^{-1} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + m_0^2 v^2 L^2}$$

und in Pauli-Villars-Regularisierung

$$\begin{aligned} C_{4,\text{PV}} &= \frac{9}{8\pi} m_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dv (4v^4 + 5v^2 + 1)^{-1} \times \\ &\times \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} \left( \frac{1}{4\pi^2 n^2 + m_0^2 L^2 + m_0^2 v^2 L^2} - \frac{1}{4\pi^2 n^2 + \Lambda^2 L^2 + m_0^2 v^2 L^2} \right). \end{aligned}$$

Der Summenterm ist derselbe wie in (6.12) und es folgt somit

$$C_{4,\text{PV}} = \frac{9m_0}{32\pi^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dv (4v^4 + 5v^2 + 1)^{-1} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda^2}{m_0^2}\right) + \ln\left(1+\frac{m_0^2}{\Lambda^2}v^2\right) - \ln(1+v^2) \right\}$$

mit den Integralen:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{1}{4v^4+5v^2+1} = \frac{\pi}{3},$$

## 6 Intrinsische Fluktuationen

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{\ln(1 + \frac{m_0^2}{\Lambda^2} v^2)}{4v^4 + 5v^2 + 1} = \frac{\pi}{6} \frac{m_0^2}{\Lambda^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda^3}\right) \quad \text{für} \quad \Lambda \gg m_0$$

und

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{\ln(1 + v^2)}{4v^4 + 5v^2 + 1} = \frac{2}{3} \pi \ln\left(\frac{9}{8}\right)$$

resultiert (wieder unter Vernachlässigung von Termen  $\mathcal{O}(\Lambda^{-2})$ )

$$C_{4,\text{PV}} = \frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \ln\left(\frac{8}{9}\right) \right\}. \quad (6.14)$$

### 6.2.2 Vergleich der dimensionellen Regularisierung und der Pauli-Villars-Regularisierung

Zur besseren Übersicht stelle ich noch einmal die Resultate in dimensioneller ( $C_{i,\text{dim}}$ ) und in Pauli-Villars-Regularisierung ( $C_{i,\text{PV}}$ ) gegenüber. Die Koeffizienten  $C_1$  bis  $C_4$  lauten

$$\begin{aligned} C_{1,\text{dim}} &= \frac{3}{16\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ \frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{2} \left[ \gamma + \ln(4\pi) \right] + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(m_0 L) \right\}, \\ C_{1,\text{PV}} &= \frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(m_0 L) \right\}, \\ C_{2,\text{dim}} &= \frac{3}{8\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} \left[ \gamma - \ln(4\pi) \right] + \ln\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right) \right\}, \\ C_{2,\text{PV}} &= \frac{3m_0}{8\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \ln\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\right) \right\}, \\ C_{3,\text{dim}} &= -\frac{3}{8\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} \left[ \gamma - \ln(4\pi) \right] - \ln\left(\frac{3}{2}\right) \right\}, \\ C_{3,\text{PV}} &= -\frac{3m_0}{8\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) - \ln\left(\frac{3}{2}\right) \right\}, \\ C_{4,\text{dim}} &= \frac{3}{16\pi} m_0^{1-\epsilon} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} \left[ \gamma - \ln(4\pi) \right] + \ln\left(\frac{8}{9}\right) \right\}, \\ C_{4,\text{PV}} &= \frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \ln\left(\frac{8}{9}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Vergleicht man die aufgeführten Koeffizienten in Pauli-Villars-Regularisierung mit den entsprechenden in der dimensionellen Regularisierung, so lässt sich eine gemeinsame Regel zur Umrechnung der  $1/\epsilon$ -Divergenz in die  $\ln(\Lambda)$ -Divergenz feststellen. Verwendet man  $m_0^{-\epsilon} = 1 - \epsilon \ln(m_0) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$  und vernachlässigt Terme der Ordnung  $\epsilon$ , so erkennt man, dass sich die dimensionell regularisierten Koeffizienten durch

$$\frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} \left[ \gamma - \ln(4\pi) \right] \longrightarrow \ln(\Lambda) \quad (6.15)$$

in die entsprechenden  $C_{i,PV}$  umwandeln lassen.

Diese Regel gilt auch für den kombinierten Koeffizienten  $(C_4 - C_2)$ , der divergent bleibt,

$$\begin{aligned} (C_4 - C_2)_{\text{dim}} &= -\frac{3m_0^{1-\epsilon}}{16\pi} \left\{ \frac{1}{\epsilon} - \frac{1}{2} \left[ \gamma - \ln(4\pi) \right] + \ln\left(\frac{3}{2}\right) \right\}, \\ (C_4 - C_2)_{\text{PV}} &= -\frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \ln\left(\frac{3}{2}\right) \right\}, \end{aligned}$$

während der kombinierte Koeffizient  $(C_2 + C_3)$  unabhängig von der Regularisierung ist:

$$(C_2 + C_3)_{\text{dim}} = \frac{3m_0}{16\pi} \ln(3) = (C_2 + C_3)_{\text{PV}}.$$

Der Koeffizient  $C_0$  ist in dimensioneller Regularisierung endlich, weist jedoch in Pauli-Villars-Regularisierung eine lineare Divergenz in  $\Lambda$  auf

$$\begin{aligned} C_{0,\text{dim}} &= -\frac{m_0}{4\pi}, \\ C_{0,\text{PV}} &= \frac{\Lambda - m_0}{4\pi}, \end{aligned}$$

es wird sich allerdings im nächsten Abschnitt zeigen, dass nach der Renormierung beide Ausdrücke das gleiche Resultat für das vollständige Profil liefern.

### **Das vollständige Grenzflächenprofil in Pauli-Villars-Regularisierung**

Ich betrachte also zunächst das vollständige Grenzflächenprofil:

Die kombinierten dimensionell regularisierten Koeffizienten aus Gleichung (4.12) unterscheiden sich von den entsprechenden Koeffizienten in Pauli-Villars-Regularisierung

$$\begin{aligned} C_{0,\text{PV}} &= \frac{\Lambda - m_0}{4\pi} \\ (C_2 + C_3)_{\text{PV}} &= \frac{3m_0}{16\pi} \ln(3) \\ (C_1 - C_2 + C_4)_{\text{PV}} &= \frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln\left(\frac{2}{3}\right) + \gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(m_0 L) \right\} \end{aligned}$$

nur durch die  $\Lambda$ -Divergenz im ersten Koeffizienten.

Die Pauli-Villars-Renormierungsgrößen der dreidimensionalen  $\phi^4$ -Theorie wurden in [Ho93] bestimmt. Ich verwende dasselbe Renormierungsschema und die dort berechneten Größen.

## 6 Intrinsische Fluktuationen

Die renormierte Masse ist definiert durch

$$m_R^2 = \frac{\Gamma_0^{(2)}(p)}{\left(\frac{\partial}{\partial p^2} \Gamma_0^{(2)}(p)\right)_{p=0}},$$

die Feldrenormierung durch

$$Z_R^{-1} = \left. \frac{\partial \Gamma_0^{(2)}(p)}{\partial p^2} \right|_{p=0}.$$

Mit den Renormierungsbeziehungen (s. Kapitel 4.6 in [Ho93])

$$\begin{aligned} g_0 &= g_R + \frac{7}{8} \frac{g_R u_R}{4\pi} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2), \\ m_0 &= m_R - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{3}{16} m_R - \Lambda \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2), \\ u_R &= \frac{g_R}{m_R}, \\ v_R &= v_0 + \frac{u_0}{8\pi} \left( \frac{17}{16} - \frac{\Lambda}{m_0} \right) v_0 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_0^2) \end{aligned} \quad (6.16)$$

und der Umkehrung

$$v_0 = v_R - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{17}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) v_R + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2), \quad (6.17)$$

erhalte ich für das Profil in nullter Ordnung

$$\begin{aligned} \phi_0(z) &= v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\ &= v_0 \tanh\left(\frac{m_R}{2}z - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{3}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) \left( \frac{m_R}{2}z \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2)\right) \\ &= v_0 \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{3}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) \left( \frac{m_R}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2) \right\} \\ &= v_R \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R v_R}{8\pi} \left( \frac{17}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \\ &\quad - \frac{u_R v_R}{8\pi} \left( \frac{3}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) \left( \frac{m_R}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2), \end{aligned}$$

während in den Termen erster Ordnung (Gl. (6.5)) die nackten Größen direkt durch die renormierten ersetzt werden können, da alle Korrekturen nur Beiträge der Ordnung  $u_R^2$  liefern. Damit erhalte ich für das vollständige Profil unter Vernachlässigung

von Termen der Ordnung  $\frac{1}{\Lambda}$  und  $u_R^2$

$$\begin{aligned}
 \bar{\phi}(z) = & v_R \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R v_R}{8\pi} \left( \frac{17}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \\
 & - \frac{u_R v_R}{8\pi} \left\{ \left( \frac{3}{16} - \frac{\Lambda}{m_R} \right) \left( \frac{m_R}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\
 & + \left[ \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{\ln(m_R L)}{2} \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\
 & + \left. \left( \frac{\Lambda}{m_R} - 1 + \frac{3}{4} \ln(3) \right) \frac{m_R}{2}z \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \\
 & \left. + \left( \frac{\Lambda}{m_R} - 1 \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\} \\
 = & v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{\ln(m_R L)}{2} \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\
 & \left. + \frac{u_R}{8\pi} \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{1}{16} \frac{u_R}{8\pi} \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Mit

$$Z_R^{-1/2} = 1 + \frac{1}{16} \frac{u_R}{8\pi} + \mathcal{O}(u_R^2)$$

und

$$v_R = Z_R^{-1/2} v$$

folgt bis zur Ordnung  $u_R$

$$\begin{aligned}
 \bar{\phi}(z) = & v \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{\ln(m_R L)}{2} \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\
 & \left. + \frac{u_R}{8\pi} \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\}
 \end{aligned}$$

und man erhält schließlich mit

$$\bar{\phi}_R(z) = Z_R^{-1/2} \bar{\phi}(z)$$

das Grenzflächenprofil aus (4.14):

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

## 6 Intrinsische Fluktuationen

Das Grenzflächenprofil in 1-Loop Ordnung ist also unabhängig von der Art der Renormierung.

Eine Möglichkeit dieses Profil ein wenig übersichtlicher zu schreiben bietet sich bei der Verwendung der physikalischen Masse. Es wird sich zeigen, dass in diesem Fall der Term mit dem Vorfaktor  $\eta$  wegfällt.

### 6.2.3 Die physikalische Masse

Während die renormierte Masse  $m_R$  über die Beziehung

$$m_R^2 = \frac{\Gamma_0^{(2)}(p)}{\left(\frac{\partial}{\partial p^2} \Gamma_0^{(2)}(p)\right)_{p=0}},$$

definiert ist, ist die physikalische Masse  $m_{ph}$  durch die Nullstelle der renormierten 2-Punkt-Vertexfunktion bestimmt:

$$\Gamma_R^{(2)}(p) = 0 \quad p = (im_{ph}, 0, 0).$$

Die Beziehung zwischen physikalischer und renormierter Masse findet sich bis zur ersten Ordnung ebenfalls in [Ho93] (oder im Kontext dimensioneller Regularisierung bei [He93]). Sie lautet

$$m_{ph}^2 = m_R^2 \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{13}{8} - \frac{3}{2} \ln(3) \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}$$

bzw.

$$m_R^2 = m_{ph}^2 \left\{ 1 - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{13}{8} - \frac{3}{2} \ln(3) \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\Lambda}\right) + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}$$

und somit unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $\Lambda^{-1}$  und  $u_R^2$

$$\begin{aligned} m_R &= m_{ph} \left\{ 1 - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{13}{16} - \frac{3}{4} \ln(3) \right) \right\} \\ &= m_{ph} \left\{ 1 - \frac{u_R}{8\pi} \eta \right\}. \end{aligned}$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) &= \tanh\left(\frac{m_{ph}}{2}z \left[ 1 - \frac{u_R}{8\pi} \eta \right]\right) \\ &= \tanh\left(\frac{m_{ph}}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \eta \left( \frac{m_{ph}}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_{ph}}{2}z\right) + \mathcal{O}(u_R^2). \end{aligned}$$

Setzt man dies in den Term nullter Ordnung im vollständigen Profil ein und ersetzt in den Termen erster Ordnung  $m_R$  direkt durch  $m_{ph}$ , so erhält dieses die Form

$$\bar{\phi}_R(z) = v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_{ph}}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{\ln(m_{ph}L)}{2} \right) \tanh\left(\frac{m_{ph}}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_{ph}}{2}z\right) \right\}.$$

### 6.3 Das intrinsische Grenzflächenprofil

Die kombinierten Koeffizienten des auf  $N^{\perp \xi_0}$  beschränkten Profils (6.6) lauten in Pauli-Villars-Regularisierung:

$$\begin{aligned} C_{0,\text{PV}} &= \frac{\Lambda - m_0}{4\pi}, \\ (C_2 + C_3)_{\text{PV}} &= \frac{3m_0}{16\pi} \ln(3), \\ (C_4 - C_2)_{\text{PV}} &= \frac{3m_0}{16\pi} \left\{ \ln\left(\frac{m_0}{\Lambda}\right) + \ln\left(\frac{2}{3}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Mit den oben verwendeten Beziehungen zwischen renormierten und nackten Größen ((6.16) und (6.17)) und identischen Umformungen erhalte ich das intrinsische Grenzflächenprofil

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z) = v_R &\left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \right. \\ &- \frac{u_R}{8\pi} \frac{1}{2} \left( \ln\left(\frac{2}{3}\right) + \ln\left(\frac{m_R}{\Lambda}\right) \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \\ &\left. + \frac{u_R}{8\pi} \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Auch in Pauli-Villars-Regularisierung bleibt also ein divergenter Term im intrinsischen Profil bestehen.

Das hier gefundene intrinsische Profil enthält die gleichen Terme wie das Profil der vollständigen Theorie, einzig die Größe  $\alpha$  ist durch  $\ln(2/3)$  und die  $\ln(L)$ - durch die  $\ln(1/\Lambda)$ -Divergenz ersetzt worden (vgl. Diskussion zur intrinsischen Dicke in Abschnitt 6.3.1). Genau wie im vorigen Abschnitt fällt der „ $\eta$ -Term“ bei Verwendung der physikalischen Masse weg. Mit denselben Umformungen wie oben erhält man

$$\bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z) = v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_{\text{ph}}}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \frac{1}{2} \ln\left(\frac{2m_{\text{ph}}}{3\Lambda}\right) \tanh\left(\frac{m_{\text{ph}}}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_{\text{ph}}}{2}z\right) \right\}.$$

Auch wenn das Profil in dieser Form kürzer und übersichtlicher ist, werde ich im Folgenden weiterhin die renormierte Masse verwenden, da diese in vielen anderen Arbeiten verwendet wird und somit ein direkter Vergleich der Ergebnisse möglich ist.

Mit dem berechneten Profil lässt sich nun die intrinsische Grenzflächendicke bestimmen.

#### 6.3.1 Die intrinsische Dicke

Wie bereits in den ersten Kapiteln werde ich auch hier zwei verschiedene Definitionen für die Grenzflächendicke verwenden. Dazu ist es nötig, die Ableitung des Grenzflächenprofils, sowie das Quadrat der Ableitung zu bestimmen.

## 6 Intrinsische Fluktuationen

Die Ableitung des renormierten, intrinsischen Grenzflächenprofils (6.18) lautet

$$\begin{aligned}\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z) &= v_R \frac{m_R}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta - \kappa \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2 \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta \left(\frac{m_R}{2} z\right) - \kappa \tanh\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] \right\} \\ &= v_R \frac{m_R}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} \eta \left[ 1 - 2 \left(\frac{m_R}{2} z\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{u_R}{8\pi} \kappa \left[ \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) - 2 \tanh^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] \right\}.\end{aligned}$$

Dabei ist  $\kappa$  wie folgt definiert:

$$\kappa = -\frac{1}{2} \left[ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_R}\right) + \ln\left(\frac{3}{2}\right) \right].$$

Man erkennt hier, dass  $\kappa$  mit der „Übersetzungsregel“ (6.15) genau dem Ausdruck

$$\frac{m_0^{-\epsilon}}{2} \alpha^{\text{Div}}$$

im intrinsischen Profil in dimensioneller Regularisierung (6.7) entspricht.

Um das Quadrat der Ableitung zu berechnen entwickelt man  $\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z)$  nach  $\beta^{-1}$

$$\begin{aligned}\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z) &= \partial_z \phi_0 + \beta^{-1} \partial_z \bar{\phi}_1 + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ (\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z))^2 &= (\partial_z \phi_0)^2 + 2\beta^{-1} \partial_z \phi_0 \partial_z \bar{\phi}_1 + \mathcal{O}(\beta^{-2})\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}(\partial_z \phi_0)^2 &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right) \\ \partial_z \phi_0 \partial_z \bar{\phi}_1 &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \frac{u_R}{8\pi} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right) \left\{ \eta \left[ 1 - 2 \left(\frac{m_R}{2} z\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \kappa \left[ \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) - 2 \tanh^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] \right\}\end{aligned}$$

erhält man bis zur ersten Ordnung

$$\begin{aligned}(\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z))^2 &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right) \left\{ 1 + 2 \frac{u_R}{8\pi} \left( \eta \left[ 1 - 2 \left(\frac{m_R}{2} z\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \kappa \left[ \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) - 2 \tanh^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \right] \right) \right\}.\end{aligned}$$

### 6.3 Das intrinsische Grenzflächenprofil

An dieser Stelle erkennt man, dass (wie bereits in Kapitel 2 erwähnt wurde) in der betrachteten Näherung auch  $(\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z))^2$  nicht unbedingt positiv sein muss. Denn wie bisher ist auch hier  $\beta^{-1}$  lediglich ein formaler Zählparameter, der angibt, bis zu welcher Ordnung entwickelt wird. Daher sind die vernachlässigten Terme zweiter und höherer Ordnung nicht unbedingt klein gegen die berücksichtigten Terme und es lässt sich ohne Weiteres keine eindeutige Aussage über das Vorzeichen treffen. Dennoch erweisen sich im vorliegenden Fall beide Definitionen als zweckmäßig und finden daher hier Verwendung:

$$1. p_1(z) = \mathcal{N}_1 \partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z)$$

Die Normierungskonstante erhalte ich durch

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_1^{-1} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dz \partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z) = \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z) \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 2v_R \\ \Leftrightarrow \quad \mathcal{N}_1 &= \frac{1}{2v_R} \end{aligned}$$

und damit

$$\langle z^2 \rangle_{1,\perp \xi_0} = \frac{1}{2v_R} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 \partial_z \phi_0(z) + \beta^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 \partial_z \phi_1(z) \right\}.$$

Die Integrale liefern

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 \partial_z \phi_0(z) = \frac{2\pi^2 v_R}{3m_R^2}$$

und

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 \partial_z \bar{\phi}_1(z) = -\frac{v_R}{m_R^2} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{4}{3}\eta\pi^2 - 8\kappa \right).$$

Mit diesen Ergebnissen erhält man

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_{1,\perp \xi_0} &= m_R^{-2} \left[ \frac{\pi^2}{3} - \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{2}{3}\eta\pi^2 - 4\kappa \right) \right] \\ &= \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \ln \left( \frac{2}{3} \right) - \frac{\pi^2}{3}\eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{m_R}{\Lambda} \right) \end{aligned} \quad (6.19)$$

mit der Oberflächenspannung  $\sigma$ .

$$2. p_2(z) = \mathcal{N}_2 (\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z))^2$$

Die Normierungskonstante  $\mathcal{N}_2$  erhält man mit

$$\mathcal{N}_2^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz (\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z))^2.$$

## 6 Intrinsische Fluktuationen

Dies lässt sich mit  $(m_R/2)z = t_R$  wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned}\mathcal{N}_2^{-1} &= v_R^2 \frac{m_R}{2} \left\{ \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt_R \operatorname{sech}^4(t_R)}_{=\frac{4}{3}} \right. \\ &\quad + 2 \frac{u_R}{8\pi} \left( \eta \underbrace{\left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R \operatorname{sech}^4(t_R) - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R t_R \tanh(t_R) \operatorname{sech}^4(t_R) \right]}_{=\frac{4}{3}} - \right. \\ &\quad \left. \left. - \kappa \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R \operatorname{sech}^6(t_R) - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R \tanh^2(t_R) \operatorname{sech}^4(t_R) \right] \right) \right\} \\ &= \frac{2}{3} v_R^2 m_R \left( 1 + \frac{u_R}{8\pi} \left( \eta - \frac{4}{5} \kappa \right) \right).\end{aligned}$$

Die Normierungskonstante lautet damit bis zur betrachteten Ordnung

$$\mathcal{N}_2 = \frac{3}{2v_R^2 m_R} \left( 1 - \frac{u_R}{8\pi} \left( \eta - \frac{4}{5} \kappa \right) \right)$$

und das zweite Moment erhält die Form

$$\begin{aligned}\langle z^2 \rangle_{2,\perp \xi_0} &= \mathcal{N}_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 (\partial_z \bar{\phi}_{R,\perp \xi_0}(z))^2 \\ &= \mathcal{N}_2 \frac{2v_R^2}{m_R} \left\{ \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dt_R t_R^2 \operatorname{sech}^4(t_R)}_{=\frac{\pi^2-6}{9}} \right. \\ &\quad + 2 \frac{u_R}{8\pi} \left( \eta \underbrace{\left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R t_R^2 \operatorname{sech}^4(t_R) - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R t_R^3 \tanh(t_R) \operatorname{sech}^4(t_R) \right]}_{=\frac{\pi^2-6}{9}} - \right. \\ &\quad \left. \left. - \kappa \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R t_R^2 \operatorname{sech}^6(t_R) - 2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_R t_R^2 \tanh^2(t_R) \operatorname{sech}^4(t_R) \right] \right) \right\} \\ &= \frac{3}{m_R^2} \left\{ \frac{\pi^2-6}{9} - \frac{u_R}{8\pi} \left[ \frac{\pi^2-6}{9} \eta + \left( \frac{4\pi^2-60}{45} \right) \kappa - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\pi^2-6}{9} \left( \eta - \frac{4}{5} \kappa \right) \right] + \mathcal{O}(u_R^2) \right\} \\ &= m_R^{-2} \left\{ \frac{\pi^2-6}{3} + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \frac{12}{5} \kappa - 2 \frac{\pi^2-6}{3} \eta \right] \right\} + \mathcal{O}(u_R^2).\end{aligned}$$

### 6.3 Das intrinsische Grenzflächenprofil

Setzt man nun noch  $\kappa$  und die Oberflächenspannung  $\sigma$  ein, so erhält man das Ergebnis (wiederum unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $u_R^2$ )

$$\langle z^2 \rangle_{2,\perp\xi_0} = \frac{\pi^2 - 6}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5} \ln\left(\frac{2}{3}\right) - \frac{\pi^2 - 6}{3} \eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln\left(\frac{m_R}{\Lambda}\right). \quad (6.20)$$

Die Ergebnisse (6.19) und (6.20) weisen eine große Ähnlichkeit mit den Ergebnissen (4.15) und (4.16) der vollständigen Theorie auf. Zum besseren Vergleich führe ich hier noch einmal exemplarisch das Ergebnis für  $\langle z^2 \rangle_2$  aus (4.16) an, der Vergleich von (4.15) und (6.19) zeigt die gleichen Parallelen.

$$\langle z^2 \rangle_2 = \frac{\pi^2 - 6}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5}\alpha - \frac{\pi^2 - 6}{3} \eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L).$$

Beide Ergebnisse enthalten in Form des jeweils ersten Terms die Dicke des Profils in der Landau-Näherung (vgl. (2.10)), mit dem der ebenfalls in beiden Ausdrücken vorhandene „ $\eta$ -Term“ zusammenhängt. Wie oben gesehen stammt dieser aus dem Profil nullter Ordnung und der Definition der verwendeten Masse.

Von der Größe  $\alpha$ , die in der Grenzflächendicke der vollständigen Theorie auftritt, bleibt in der intrinsischen Grenzflächendicke (genau wie beim intrinsischen Profil) nur der Faktor  $\ln(2/3)$  und statt der logarithmischen Divergenz in  $L$  bleibt hier eine solche in  $\Lambda$ . Dies ist verständlich, da in der vollständigen Theorie die Wellenzahl durch die Systemgröße begrenzt wird, hier aber durch den intrinsischen Cutoff  $l_{\text{int}} \sim 1/\Lambda$  (für den genauen Zusammenhang zwischen  $\Lambda$  und  $l_{\text{int}}$  s. Kap. 8).

Somit sind die hier gefundenen Ausdrücke völlig analog zu denen der vollständigen Theorie zu verstehen, allein die Größe

$$\ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \gamma$$

fehlt in der intrinsischen Grenzflächendicke und scheint aus den Kapillarwellen zu stammen. Um dies zu überprüfen, werde ich mich im folgenden Kapitel mit dem verbleibenden, d.h. dem von den Moden parallel zu  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  herrührenden Teil, den Kapillarwellen beschäftigen.



## 7 Die Kapillarwellen

Nachdem ich im letzten Kapitel das intrinsische Profil und seine Dicke hergeleitet habe, werde ich in diesem Kapitel zeigen, dass die Moden  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  zurecht mit den Kapillarwellen identifiziert wurden und dass darüber hinaus eine Faltung des im vorigen Kapitel bestimmten intrinsischen Profils mit dem statistischen Gewicht dieser Kapillarwellen die Resultate aus [Kö08] liefert.

Wie im vorigen Kapitel starte ich mit der Zustandssumme (5.7):

$$Z_0 = e^{-\beta H[\phi_0]} \int \mathcal{D}h \ e^{-\beta \tilde{H}[h]} \int_{N^\perp \xi_0} \mathcal{D}\varphi \ e^{-\beta H_{\perp \xi_0}[\varphi]}.$$

Das erzeugende Funktional auf dem Raum  $N^\perp$  lautet nun analog zu Gleichung (4.7)

$$Z_\perp[J] = \frac{1}{Z_{\perp,0}} \int \mathcal{D}h \ e^{-\beta \tilde{H}[h]} \int_{N^\perp \xi_0} \mathcal{D}\varphi \ e^{-\beta H_{\perp \xi_0}[\varphi] + (J, \varphi)}.$$

Somit folgt für den Vakuumerwartungswert der Fluktuationen

$$\langle \varphi \rangle_\perp(x) = \int \mathcal{D}h \ e^{-\beta \tilde{H}[h]} \langle \varphi \rangle_{\perp \xi_0}(z - h)$$

bzw. für das vollständige Profil in 1-Loop-Näherung

$$\bar{\phi}(x) = \int \mathcal{D}h \ e^{-\beta \tilde{H}[h]} \bar{\phi}_{\perp \xi_0}(z - h). \quad (7.1)$$

Dies entspricht genau der Faltungsnäherung (3.3):

$$\bar{\phi}(x) = \int \mathcal{D}h \ \phi_{\text{int}}(z - h(\vec{x})) \rho[h],$$

d.h. der Faltung des intrinsischen Profils (6.18)

$$\bar{\phi}_{R, \perp \xi_0}(z) = v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \kappa \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\}$$

mit

$$\rho[h] = e^{-\beta \tilde{H}[h]}.$$

Im Folgenden werde ich nun den Hamiltonian  $\tilde{H}[h]$  ein wenig genauer betrachten und zeigen, dass dieser in erster Ordnung sowohl mit dem Hamiltonian einer verformten

## 7 Die Kapillarwellen

Oberfläche (aus der Kapillarwellentheorie) als auch mit den Moden des Fluktuationsoptimators  $\mathbb{K}$  aus dem Raum  $N^{\parallel \xi_0}$  identifiziert werden kann.

Letzteres ist nicht überraschend, da der Hamiltonian  $\tilde{H}[h]$  in Kapitel 5 gerade nach diesem Kriterium von den übrigen Fluktuationen getrennt wurde. Dennoch ist es aufschlussreich zu sehen, dass die Moden  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  an dieser Stelle explizit zurückerhalten werden können.

### 7.1 Der Hamiltonian $\tilde{H}[h]$

Ich betrachte nun den Hamiltonian

$$\tilde{H}[h] = \frac{1}{2} \int d^3\tilde{x} (\vec{\nabla}h(\tilde{x}))^2 (\partial_z\phi_0(\tilde{z}))^2.$$

Mit

$$\begin{aligned} \phi_0(\tilde{z}) &= \sqrt{\frac{3m_0^2}{g_0}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}\tilde{z}\right) \\ \implies (\partial_z\phi_0(\tilde{z}))^2 &= \frac{3m_0^4}{4g_0} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}\tilde{z}\right) = \sigma \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}\tilde{z}\right), \end{aligned}$$

wobei  $\sigma = \frac{2m_0^3}{g_0}$  die Oberflächenspannung ist, erhält man in erster Ordnung

$$\begin{aligned} \tilde{H}[h] &= \frac{\sigma}{2} \int d^3\tilde{x} (\vec{\nabla}h(\tilde{x}))^2 \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}\tilde{z}\right) \\ &= \frac{\sigma}{2} \int_0^L d^2\vec{x} (\vec{\nabla}h(\vec{x}))^2 \underbrace{\frac{3m_0}{8} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{z} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}\tilde{z}\right)}_{=1} \\ &= \frac{\sigma}{2} \int_0^L d^2\vec{x} (\vec{\nabla}h(\vec{x}))^2. \end{aligned} \tag{7.2}$$

Der Hamiltonian (7.2) entspricht dem in Kapitel 3 hergeleiteten Hamiltonian (3.1), d.h. dem Hamiltonian einer elastischen Membran mit der Oberflächenspannung  $\sigma$ .

Dieser lässt sich genau wie in Kapitel 3 mit

$$h(\vec{x}) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} e^{i\frac{2\pi}{L}\vec{n} \cdot \vec{x}} h(\vec{n})$$

und der Beziehung

$$\int_0^L d^2\vec{x} e^{i\frac{2\pi}{L}(\vec{n} + \vec{m}) \cdot \vec{x}} = L^2 \delta_{\vec{n} + \vec{m}, \vec{0}}$$

zu

$$\tilde{H}[h] = \frac{\sigma L^2}{2} \sum_{\vec{n}} h(\vec{n}) h(-\vec{n}) \frac{4\pi^2 n^2}{L^2} \tag{7.3}$$

umformen. Diese Ausdrücke (Gl. (7.2) und (7.3)) beschreiben in erster Näherung die Arbeit gegen die Oberflächenspannung bei einer Verformung der planen Oberfläche im feldfreien Fall.

Führt man dagegen die Fouriertransformation vor der  $z$ -Integration durch, so erhält man den Hamiltonian in der Form

$$\tilde{H}[h] = \frac{\sigma L^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \sum_{\vec{n}} h(\vec{n})h(-\vec{n}) \frac{4\pi^2 n^2}{L^2} \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right),$$

wobei auffällt, dass

$$\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) = \lambda_{\vec{n}\xi_0} |\Psi_{\vec{n}\xi_0}(x)|^2$$

der Teil des Spektrums des Fluktuationsooperators  $\mathbb{K}$  aus dem Unterraum  $N^{\parallel\xi_0}$  ist. Offensichtlich gilt also

$$\tilde{H}[h] = \frac{\sigma L^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \sum_{\vec{n}} h(\vec{n})h(-\vec{n}) \lambda_{\vec{n}\xi_0} |\Psi_{\vec{n}\xi_0}(x)|^2 = \frac{\sigma}{2} \int_0^L d^2\vec{x} (\vec{\nabla}h(\vec{x}))^2. \quad (7.4)$$

An dieser Stelle ist deutlich zu sehen, dass das Band der Goldstone-Moden  $\Psi_{\vec{n}\xi_0}$  bis zur 1-Loop-Ordnung den aus der Kapillarwellen-Theorie bekannten Hamiltonian liefert.

Im folgenden Abschnitt werde ich nun die von den Kapillarwellen hervorgerufene Grenzflächendicke bestimmen.

## 7.2 Die Grenzflächendicke

Wie in Kapitel 3 beschrieben, dient in der Kapillarwellen-Theorie die mittlere quadratische Fluktuation  $\langle h^2 \rangle$  als Maß für die Grenzflächendicke. Die Wahrscheinlichkeit einer Amplitude  $h(\vec{n})$  ist nun proportional zum Boltzmann-Faktor  $e^{-\beta\tilde{H}[h]}$ .

Für den Erwartungswert  $\langle h^2 \rangle$  ergibt sich mit dem Ergebnis aus (7.3) in erster Ordnung

$$\langle h^2 \rangle = \beta^{-1} \frac{1}{\sigma L^2} \sum_{\vec{n}, \vec{n} \neq \vec{0}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2} = \beta^{-1} \frac{1}{\sigma} \frac{8}{3m_0} C_1.$$

Hier taucht nun der Koeffizient  $C_1$  wieder auf, der bei der Berechnung des intrinsischen Profils fehlte. Da die in ihm enthaltenen Moden mit den langreichweiten Fluktuationen identifiziert wurden (vgl. Anhang B), entspricht dies den Erwartungen. Setze ich nun das Ergebnis für  $C_1$  aus Gleichung (6.10) ein, so erhalte ich

$$\begin{aligned} \langle h^2 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \ln\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) + \gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(m_0 L) \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(\Lambda L) \right\} \end{aligned} \quad (7.5)$$

## 7 Die Kapillarwellen

den aus den Kapillarwellen stammenden Anteil der Grenzflächendicke. Auch hier findet sich, wie bei den Ergebnissen für die intrinsische Grenzflächendicke (Gleichungen (6.19) und (6.20)) die logarithmische Abhängigkeit vom Cutoff  $\Lambda$  und, wie von der Kapillarwellentheorie vorhergesagt, die ebenfalls logarithmische Abhängigkeit von der Systemgröße  $L$ . Darüberhinaus beinhaltet die gefundene Grenzflächendicke die Größe

$$\gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right),$$

die im intrinsischen Profil gegenüber dem vollständigen Profil fehlte.

Ich habe also sowohl die intrinsische Grenzflächendicke, als auch die durch die Rauigkeit der Grenzfläche hervorgerufene Dicke aus der vollständigen Theorie erhalten. Abgesehen davon, dass beide Größen logarithmisch mit der Pauli-Villars-Masse  $\Lambda$  divergieren, weisen sie die bekannten charakteristischen Merkmale auf. Die intrinsische Grenzflächendicke beinhaltet die Dicke des Cahn-Hilliard-Profiles plus Terme, die durch intrinsische Fluktuationen hervorgerufen sind, ist aber insbesondere nicht von der Systemgröße abhängig. Diese Abhängigkeit beobachtet man, im Einklang mit den Erwartungen, im gerade erhaltenen Ausdruck. Nun stellt sich die Frage, ob mit Hilfe der Faltungsnäherung die ursprüngliche Grenzflächendicke zurückerhalten wird.

### 7.2.1 Die Faltung

Nach der Faltungsnäherung erhält man die vollständige Grenzflächendicke (bzgl. der Definition  $p_1(z) \sim \partial_z \phi(z)$ ) als Summe der intrinsischen Dicke und der mittleren quadratischen Fluktuation  $\langle h^2 \rangle$  (s. Gl. (3.4)):

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_{1,\perp\xi_0} + \langle h^2 \rangle &= \frac{\pi^2}{3m_R^2} - \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \ln\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{\pi^2}{3}\eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln\left(\frac{m_R}{\Lambda}\right) + \\ &\quad + \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(\Lambda L) \right\} \\ &= \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \alpha - \frac{\pi^2}{3}\eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L) = \langle z^2 \rangle_1. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Dies ist die Grenzflächendicke der vollständigen Theorie aus Gleichung (4.15), d.h. Gleichung (3.4) gilt auch hier, wie in Kapitel 3 beschrieben, exakt.

Für die zweite Definition der Grenzflächendicke ( $p_2(z) \sim (\partial_z \phi(z))^2$ ) gilt nach (3.5)

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_2 &\approx \langle z^2 \rangle_{2,\perp\xi_0} + \frac{1}{2} \langle h^2 \rangle \\ &= \frac{\pi^2}{3m_R^2} - \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5} \ln\left(\frac{3}{2}\right) + \frac{\pi^2}{3}\eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln\left(\frac{m_R}{\Lambda}\right) + \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \gamma + \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})}\right) + \ln(\Lambda L) \right\}. \end{aligned} \quad (7.7)$$

## 7.2 Die Grenzflächendicke

Wie bereits in Abschnitt 3.3 gesehen, gilt diese Beziehung nur näherungsweise, weshalb hier nicht die Grenzflächendicke der vollständigen Theorie zurückerhalten wird. Die exakte Beziehung lautet hier

$$\begin{aligned}
\langle z^2 \rangle_2 &= \langle z^2 \rangle_{2,\perp \xi_0} + \frac{3}{5} \langle h^2 \rangle \\
&= \frac{\pi^2}{3m_R^2} - \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5} \ln \left( \frac{3}{2} \right) + \frac{\pi^2}{3} \eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{m_R}{\Lambda} \right) + \\
&\quad + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \gamma + \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \ln(\Lambda L) \right\} \\
&= \frac{\pi^2 - 6}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5} \alpha - \frac{\pi^2 - 6}{3} \eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L).
\end{aligned}$$

Darin heben sich, ebenso wie in (7.6), die  $\ln(\Lambda)$ -Terme gegenseitig auf und man erhält die Grenzflächendicke der vollständigen Theorie, frei von  $\Lambda$ -Divergenzen. Nachdem es also zunächst gelungen ist die intrinsischen und Kapillarwellenanteile innerhalb der vollständigen Theorie zu identifizieren und voneinander zu trennen, lassen diese sich nun mit Hilfe der Faltungsnäherung wieder verbinden.

Im folgenden Kapitel werde ich die erhaltenen Ergebnisse weiter diskutieren und mit den Ergebnissen anderer Arbeiten vergleichen, um so vor allem auch einen sinnvollen Bereich für die Wahl des Cutoffs  $\Lambda$  abschätzen zu können.



# 8 Diskussion der Resultate

## 8.1 Der Zusammenhang zwischen $l_{\text{int}}$ , $l_{\text{KW}}$ und $\Lambda$

Wie in Kapitel 3 beschrieben hängt der Kapillarwellen-Cutoff  $l_{\text{KW}}$  mit einer maximalen Wellenzahl  $k_{\max, \text{KW}}$  über die Beziehung

$$k_{\max, \text{KW}} = \frac{l_{\text{KW}}}{2\pi}$$

zusammen. Entsprechend hängt der intrinsische Cutoff  $l_{\text{int}}$  mit einer minimalen Wellenzahl  $k_{\min, \text{int}}$  über die Beziehung

$$k_{\min, \text{int}} = \frac{l_{\text{int}}}{2\pi}$$

zusammen, d.h.  $l_{\text{int}}$  spielt für das intrinsische Profil die Rolle, die die Systemgröße  $L$  in der Kapillarwellen-Theorie spielt. Hier gilt

$$l_{\text{int}} = l_{\text{KW}} = l,$$

da lediglich ein Cutoff  $\Lambda$  eingeführt wurde, der sich sowohl bei den Kapillarwellen als auch im intrinsischen Profil findet und der sich darüber hinaus in der Faltungsnäherung weghebt. Daher schreibe ich von nun an lediglich  $l$  und lasse die Indizes weg. Um nun einen Zusammenhang zwischen diesem Cutoff  $l$  und der Pauli-Villars-Masse  $\Lambda$  herzustellen, betrachte man z.B. das Integral

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{k^2 + m_0^2}.$$

Die auftretende Divergenz lässt sich im Rahmen der Pauli-Villars-Regularisierung wie folgt behandeln:

$$\int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left( \frac{1}{k^2 + m_0^2} - \frac{1}{k^2 + \Lambda} \right) = \frac{\Lambda - m_0}{4\pi}$$

(vgl. z.B. [Ho93]). Führt man dagegen eine maximale Wellenzahl  $k_{\max}$  ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_{\max}} dk \frac{k^2}{k^2 + m_0^2} &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{k_{\max}} dk \left( 1 - \frac{m_0^2}{k^2 + m_0^2} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \left( k_{\max} - m_0 \arctan \left( \frac{k}{m_0} \right) \Big|_0^{k_{\max}} \right) \\ &\approx \frac{1}{2\pi^2} \left( k_{\max} - m_0 \frac{\pi}{2} \right) = \frac{(\frac{2}{\pi} k_{\max} - m_0)}{4\pi}. \end{aligned}$$

## 8 Diskussion der Resultate

Dabei gilt die Näherung in der letzten Zeile für  $k_{\max} \gg m_0$  und man erhält durch einen Vergleich der Ergebnisse

$$\Lambda \approx \frac{2}{\pi} k_{\max} = \frac{4}{l}. \quad (8.1)$$

Außerdem kann aus den oben bestimmten Ergebnissen für die Grenzflächendicken eine Beziehung zwischen  $l$  und  $\Lambda$  erhalten werden. Der aus den langreichweitigen Fluktuationen stammende Teil der Grenzflächendicke (7.5) hat die Form

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

aus Gleichung (3.2). Dafür schreibt man

$$\gamma + \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) \approx \ln \left( \frac{1}{4,164} \right),$$

womit

$$\begin{aligned} \langle h^2 \rangle &= \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \gamma + \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \ln(\Lambda L) \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{L}{l} \right) \end{aligned}$$

mit  $l \approx 4,164\Lambda^{-1}$  gilt.

Das gleiche Resultat findet man, wenn man die intrinsische Grenzflächendicke (6.19) bzw. (6.20) mit der entsprechenden Grenzflächendicke (4.15) bzw (4.16) vergleicht. Man stellt fest, dass man (6.19) durch

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_{1,\perp\xi_0} &= \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \ln \left( \frac{2}{3} \right) - \frac{\pi^2}{3}\eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{m_R}{\Lambda} \right) \\ &= \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \alpha - \frac{\pi^2}{3}\eta \right) - \frac{1}{2\pi\sigma} \left\{ \gamma + \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) \right\} + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{m_R}{\Lambda} \right) \\ &\approx \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \alpha - \frac{\pi^2}{3}\eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( 4,164 \frac{m_R}{\Lambda} \right) \end{aligned}$$

auf dieselbe Gestalt bringen kann wie (4.15), wobei  $4,164\Lambda^{-1}$  der Systemgröße  $L$  entspricht (genauso lässt sich (6.20) auf die Gestalt von (4.16) bringen). Ich werde daher im Folgenden

$$l = \frac{4,164}{\Lambda}$$

im Einklang mit (8.1) verwenden.

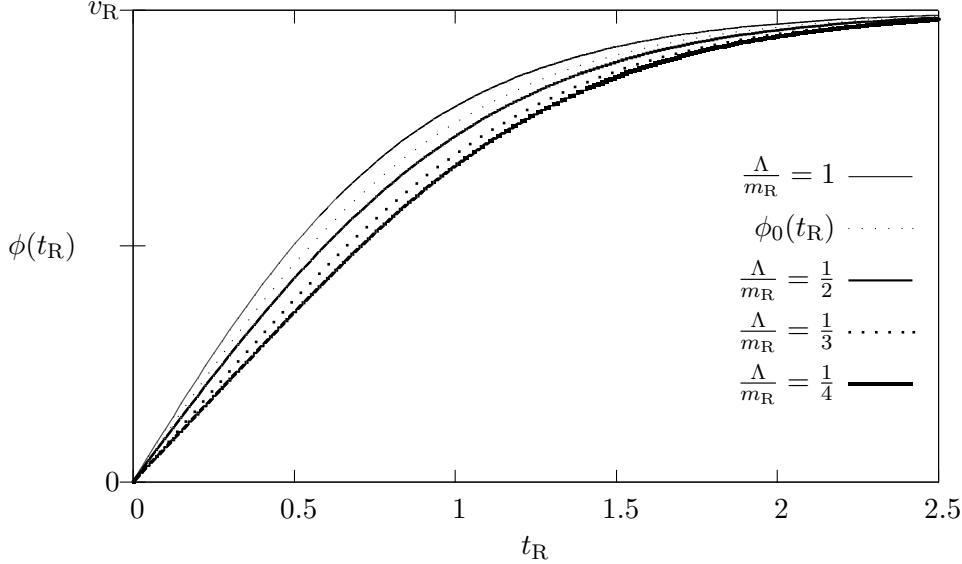


Abbildung 8.1: Das intrinsische Profil für verschiedene Werte von  $\Lambda/m_R$  und das Kinkprofil  $\phi_0$

## 8.2 Das intrinsische Profil

In diesem Kapitel schreibe ich abkürzend:

$$t_R = \frac{m_R}{2} z = \frac{1}{2} \frac{z}{\xi}.$$

Das intrinsische Profil (6.18) lautet damit

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{R,\perp\xi_0}(t_R) &= v_R \left\{ \tanh(t_R) + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3}{2} \frac{\Lambda}{m_R} \right) \tanh(t_R) + \eta t_R \right] \operatorname{sech}^2(t_R) \right\} \\ &= \phi_0(t_R) + \bar{\phi}_1(t_R). \end{aligned}$$

Wie gesehen hängt dieses, obwohl die Trennung in einen intrinsischen und einen Kapillarwellenanteil ohne die Einführung eines Cutoffs stattfand, sondern durch das Spektrum von  $\mathbb{K}$  gleichsam natürlich vorgegeben wurde, von dem Cutoff  $\Lambda$  ab. Es stellt sich nun die Frage, was eine geeignete Wahl für  $\Lambda$  ist. Abbildung 8.1 zeigt das Profil in nullter Ordnung ( $\phi_0$ ) im Vergleich mit dem intrinsischen Profil erster Ordnung ( $\bar{\phi}_{R,\perp\xi_0}$ ) für verschiedene Werte von  $\Lambda/m_R$ .

Man erkennt, dass sich die Grenzfläche mit größerem Cutoff  $l$  (d.h. kleinerem  $\Lambda/m_R$ ) aufweitet und man für  $\Lambda^{-1} = \xi$  ( $\Lambda/m_R = 1$ ) sogar einen schärferen Übergang erhält, also eine schmalere Grenzfläche als beim Kinkprofil. Bei  $\Lambda^{-1} \approx 1,44 \xi$  (s.u.) verschwinden die 1-Loop-Korrekturterme und es bleibt lediglich das Kinkprofil übrig.

## 8 Diskussion der Resultate

Erst ab einem Cutoff  $\Lambda^{-1} \gtrsim 1,44 \xi$  tragen also intrinsische Fluktuationen zur Verbreiterung der Tree-Level-Grenzfläche bei.

Im Folgenden werde ich das intrinsische Profil bei verschiedenen Werten von  $\Lambda$  mit den Resultaten anderer Arbeiten, namentlich von Küster [Kü01] und von Ohta und Kawasaki [OK77], vergleichen, um so einen geeigneten Bereich für dessen Wahl abschätzen zu können.

### Küster

Küster führt im Rahmen einer lokalen Potentialapproximation ein effektives Potential ein und berechnet daraus das intrinsische Profil bis zur 2-Loop-Ordnung. Er kommt so zu dem Ausdruck

$$\phi_{\text{gR}}(t_R) = \sqrt{\frac{3m_R}{u_R}} \left\{ \chi_{\text{gR}}^{(0)}(t_R) + \frac{u_R}{8\pi} \chi_{\text{gR}\leqslant}^{(1)}(t_R) + \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \chi_{\text{gR}\leqslant}^{(2)}(t_R) + \mathcal{O}(u_R^3) \right\}.$$

Dabei gilt auch dort

$$\sqrt{\frac{3m_R}{u_R}} \chi_{\text{gR}}^{(0)}(t_R) = v_R \tanh(t_R).$$

Die Korrektur erster Ordnung lautet für  $|t_R| \leq \operatorname{artanh}(\frac{1}{\sqrt{3}}) = \operatorname{arsinh}(\frac{1}{\sqrt{2}})$

$$\frac{u_R}{8\pi} \chi_{<}(t_R) = \frac{u_R}{8\pi} \left\{ \frac{1}{12} t_R \operatorname{sech}^2 t_R + \frac{2}{9} \sinh t_R \cosh t_R - \frac{2}{3} \tanh t_R \right\} \quad (8.2)$$

und für  $|t_R| > \operatorname{arsinh}(\frac{1}{\sqrt{2}})$

$$\begin{aligned} \frac{u_R}{8\pi} \chi_{>}(t_R) = & \frac{u_R}{8\pi} \left\{ \frac{1}{12} t_R \operatorname{sech}^2 t_R - \frac{1}{12} \operatorname{sech}^2 t_R \operatorname{artanh} \left( \left[ \frac{-1/2 + \sinh^2 t_R}{\sinh^2 t_R} \right]^{1/2} \right) + \right. \\ & + \frac{2}{9} \sinh t_R \cosh t_R - \frac{2}{3} \tanh t_R - \\ & \left. - \sinh t_R \sqrt{-1/2 + \sinh^2 t_R} \left( \frac{2}{9} - \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 t_R \right) \right\}. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Dem entspricht der Ausdruck

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_R} \bar{\phi}_1(t_R) = & \frac{u_R}{8\pi} \left\{ \eta t_R \operatorname{sech}^2 t_R + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3}{2} \frac{\Lambda}{m_R} \right) \tanh t_R \operatorname{sech}^2 t_R \right\} \\ = & \frac{u_R}{8\pi} \underbrace{\left\{ \eta t_R \operatorname{sech}^2 t_R - \kappa \tanh t_R \operatorname{sech}^2 t_R \right\}}_{:= \bar{\varphi}_1}. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Abbildung 8.2 zeigt den Vergleich zwischen der von mir berechneten Korrektur erster Ordnung (für  $\Lambda^{-1} = 3 \xi$  und  $\Lambda^{-1} = 3,5 \xi$ ) und der entsprechenden Korrektur bei Küster. In Abbildung 8.3 ist der Vergleich zwischen dem Resultat von Küster und  $\bar{\varphi}_1$  für  $\Lambda^{-1} \approx 3,27 \xi$  ( $\kappa = 0,39$ ) gezeigt. Für diese Wahl des Cutoffs stimmen die Kurven sehr gut überein.

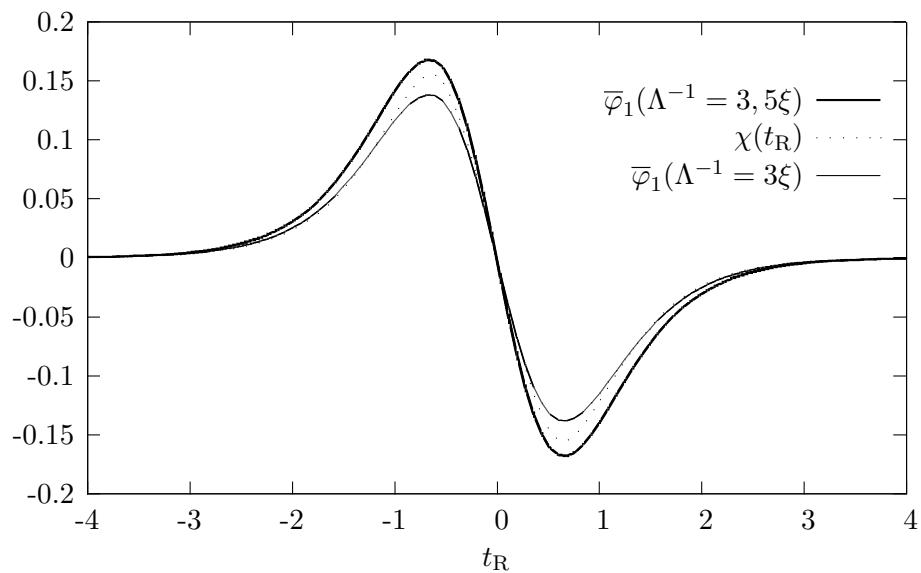


Abbildung 8.2: Vergleich von  $\bar{\varphi}_1(t_R)$  und  $\chi(t_R)$

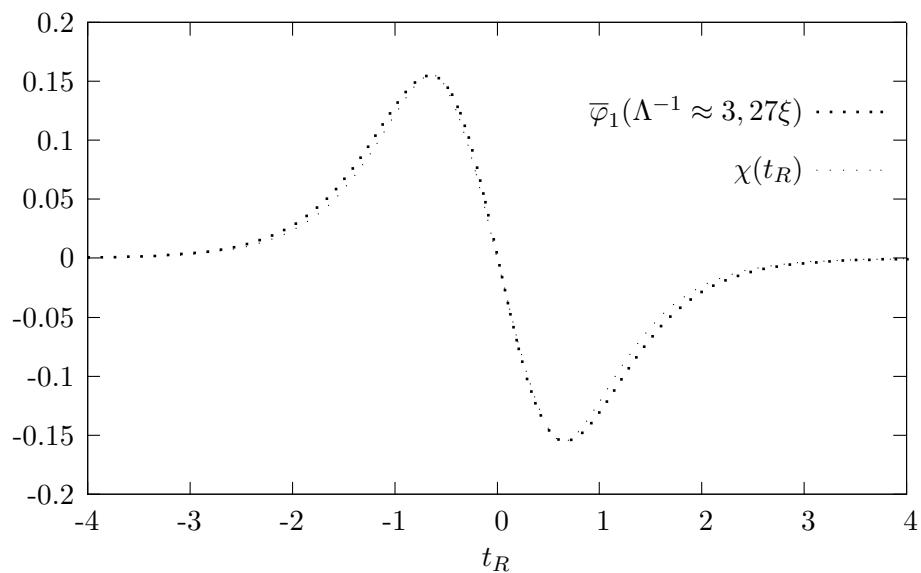


Abbildung 8.3: Vergleich von  $\bar{\varphi}_1(t_R)$  (für  $\kappa = 0, 39$ ) und  $\chi(t_R)$

## 8 Diskussion der Resultate

### Ohta und Kawasaki

Ein weiteres Resultat findet sich bei Ohta und Kawasaki, die in  $(4 - \epsilon)$  Dimensionen rechnen und  $\epsilon = 1$  setzen. Für das Profil erhalten sie den Ausdruck

$$m(r) = \tilde{A} \tanh\left(\frac{r}{2\zeta}\right) \left\{ 1 - \frac{a}{3} \operatorname{sech}^2\left(\frac{r}{2\zeta}\right) \right\},$$

wobei  $\zeta = (1 - 0,047\epsilon) \xi$  und  $a = (\sqrt{3}\pi/6)\epsilon$  gilt. Ferner gilt in der hier verwendeten Notation

$$\frac{r}{2\xi(1 - 0,047\epsilon)} = \frac{r}{2\xi}(1 + 0,047\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2) = t_R(1 + 0,047\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

Damit erhält das Profil (bis zur Ordnung  $\epsilon$ ) die Form

$$m(t_R) = \tilde{A} \left\{ \tanh(t_R) + \underbrace{\epsilon \left[ 0,047t_R \operatorname{sech}^2(t_R) - \frac{\pi}{6\sqrt{3}} \tanh(t_R) \operatorname{sech}^2(t_R) \right]}_{=:m_1} \right\},$$

die dieselben Terme enthält wie das von mir berechnete Profil. Um die Korrektur erster Ordnung

$$m_1(t_R) = 0,047t_R \operatorname{sech}^2(t_R) - \frac{\pi}{6\sqrt{3}} \tanh(t_R) \operatorname{sech}^2(t_R) \quad (8.5)$$

auch quantitativ mit dem Ausdruck (8.4) vergleichen zu können, benötigt man den Wert der Kopplungskonstanten  $u_R$ .

Dieser entspricht in der Nähe der kritischen Temperatur etwa dem Tief temperaturfixpunkt  $u_R^*$  und wurde in verschiedenen Arbeiten unterschiedlich bestimmt. Ich verwende hier ausschließlich den Wert  $u_R^* = 14,3$  aus [CH97] (der stillschweigend auch schon in Abbildung 8.1 verwendet wurde), da dieser z.B. auch in [Kü01] verwendet wird. Allerdings gibt es in verschiedenen anderen Arbeiten numerische Werte, die sich von diesem unterscheiden (z.B.  $u_R^* = 15,1$  in [Mü90]). Der rein qualitative Vergleich der Profile ist von dem genauen Wert für  $u_R$  natürlich unabhängig und da quantitativ lediglich eine grobe Abschätzung für  $\Lambda^{-1}$  getroffen werden soll, würde dieser Vergleich auch für z.B.  $u_R^* = 15,1$  die gleichen Ergebnisse liefern.

Für  $u_R^* = 14,3$  ist

$$(u_R/8\pi)\eta \approx -0,0065$$

und unterscheidet sich sowohl in der Größenordnung als auch im Vorzeichen von dem entsprechenden Faktor 0,047 bei Ohta und Kawasaki. Daher unterscheiden sich auch die 1-Loop-Korrekturen deutlich voneinander, wenn man den Cutoff so wählt, dass

$$(u_R/8\pi)\kappa = \pi/(6\sqrt{3})$$

(bei  $\Lambda^{-1} \approx 2,55 \xi$ ). Erst bei einem Cutoff  $3 \xi < \Lambda^{-1} < 4 \xi$  liegen die Korrekturen dicht beieinander (vgl. Abb. 8.4) und stimmen für  $\Lambda^{-1} \approx 3,5 \xi$  fast vollständig

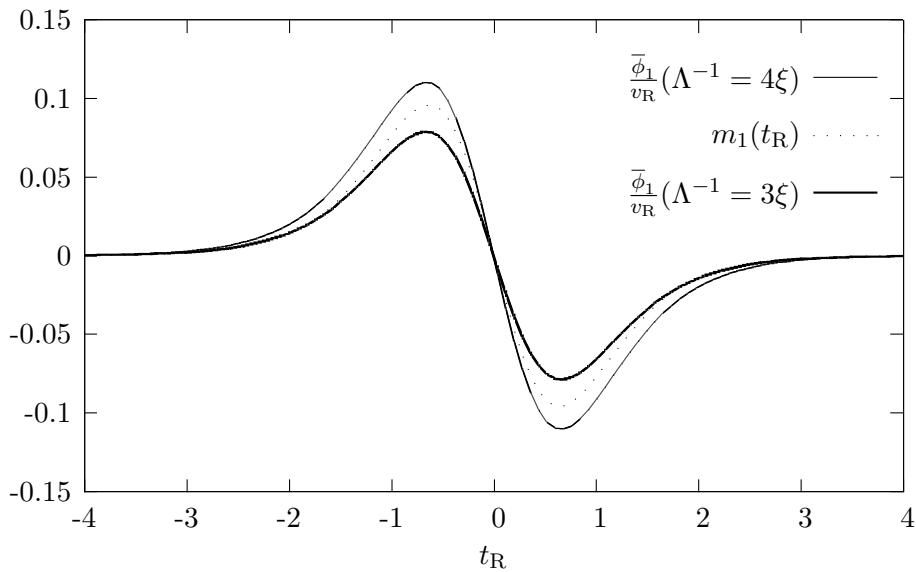


Abbildung 8.4: Vergleich von  $\bar{\phi}_1(t_R)/v_R$  für einen Cutoff  $\Lambda^{-1} = 3 \xi$  bzw.  $\Lambda^{-1} = 4 \xi$  und die von Ohta und Kawasaki bestimmte Korrektur erster Ordnung  $m_1(t_R)$

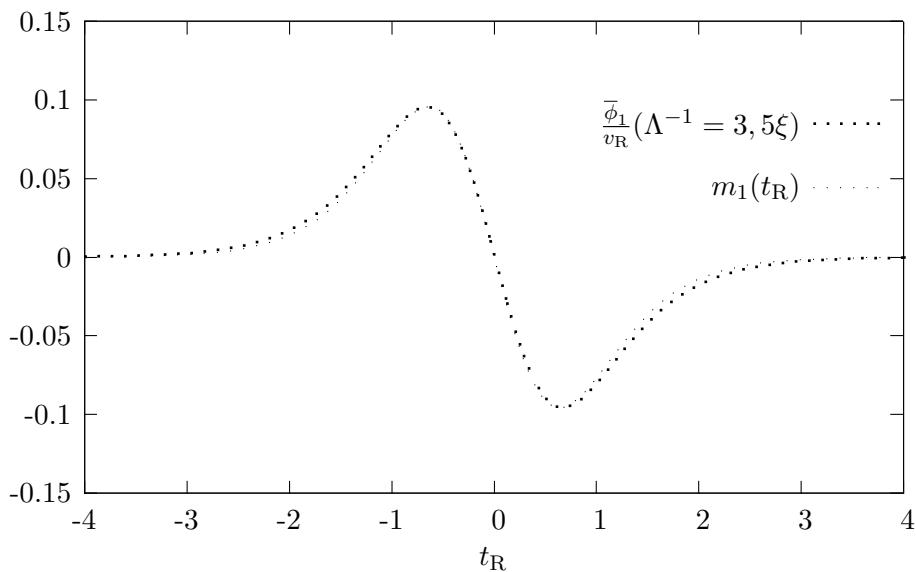


Abbildung 8.5: Bei einem Cutoff von  $\Lambda^{-1} = 3,5 \xi$  stimmen  $\bar{\phi}_1(t_R)/v_R$  und  $m_1(t_R)$  nahezu überein.

## 8 Diskussion der Resultate

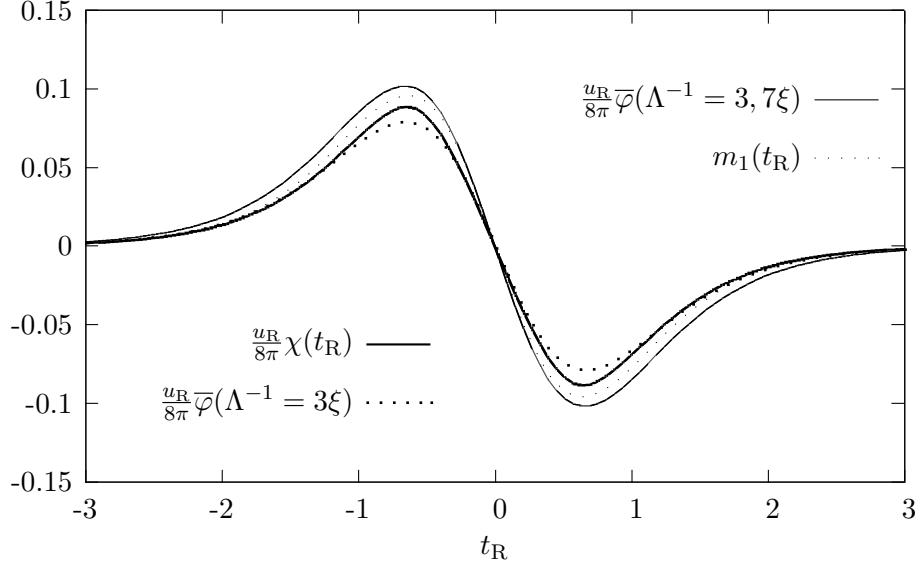


Abbildung 8.6: Vergleich der Ergebnisse der Korrektur erster Ordnung bei Ohta und Kawasaki ( $m_1$ ), Küster ( $\chi$ ) mit den von mir bestimmten Ergebnissen ( $\bar{\varphi}$ ) für einen Cutoff  $\Lambda^{-1} = 3\xi$  und  $\Lambda^{-1} = 3, 7\xi$ .

überein (vgl. Abb. 8.5). Der Vergleich mit den Resultaten von Ohta und Kawasaki, ebenso wie mit den Ergebnissen von Küster legt also die Wahl  $\Lambda^{-1} \sim (3 - 4)\xi$  nahe und damit einen intrinsischen Cutoff von

$$l = \frac{4,164}{\Lambda} \sim (12 - 17)\xi.$$

Müller [Mü04] bestimmt ebenso wie Papenkort [Pa09] einen intrinsischen Cutoff  $B_{\text{intr}}$  von

$$B_{\text{intr}} \sim (3 - 8)\xi,$$

den sie durch den Vergleich der Grenzflächendicke mit der reinen Tree-Level-Dicke erhalten. Die intrinsische Dicke (6.19) nimmt für  $\Lambda^{-1} \approx 1,44\xi$  (s.u.) diesen Wert an. Bei dieser Definition erhalte ich den Cutoff

$$l = \frac{4,164}{\Lambda} \approx 6,0\xi$$

in guter Übereinstimmung mit der Abschätzung von Müller und Papenkort. Für die intrinsische Dicke (6.20) erhält man die reine Tree-Level-Dicke für

$$\Lambda^{-1} = \exp \left( \ln \left( \frac{3}{2} \right) + \frac{5}{9}(\pi^2 - 6)\eta \right) m_R^{-1} \approx 1,46\xi$$

also mit

$$l = \frac{4,164}{\Lambda} \approx 6,1\xi$$

im Wesentlichen denselben Wert. In [Mü04] wird außerdem ein Kapillarwellen-Cutoff abgeschätzt zu

$$B_{\text{KW}} \sim (1 - 9)\xi,$$

der ebenfalls in der gleichen Größenordnung liegt.

### 8.3 Die intrinsische Grenzflächendicke

Mit der Beziehung

$$\frac{1}{2\pi\sigma} = \frac{u_R}{4\pi} m_R^{-2}$$

lautet die intrinsische Dicke (6.19)

$$\langle z^2 \rangle_{1,\perp\xi_0} \approx \left[ \frac{\pi^2}{3} - \frac{u_R}{4\pi} \left( 0,3678 + \ln \left( \frac{\Lambda}{m_R} \right) \right) \right] m_R^{-2}.$$

Dabei ist  $\pi^2/3$  das Quadrat der Tree-Level-Dicke. Auch hier erkennt man, dass erst für

$$\ln \left( \frac{\Lambda}{m_R} \right) < -0,3678 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{\Lambda} \gtrsim 1,44 \xi$$

eine Verbreiterung der Grenzfläche im Vergleich zur nullten Ordnung auftritt. In Tabelle 8.1 ist die Grenzflächendicke  $w_{1,\text{int}} = \sqrt{\langle z^2 \rangle_{1,\perp\xi_0}}$  für verschiedene Werte von  $\Lambda^{-1}$  angegeben.

Analog lässt sich auch aus (6.20) die intrinsische Dicke (bzgl.  $p_2 \sim (\partial_z \bar{\phi})^2$ ) berechnen; die entsprechenden Werte finden sich ebenfalls in Tabelle 8.1. Bei einem Cutoff im Bereich von drei bis vier Korrelationslängen sorgt die Korrektur erster Ordnung also für eine Verbreiterung der intrinsischen Grenzfläche um etwa 15% (bei  $w_1$ ) bzw. 20% (bei  $w_2$ ) gegenüber der Tree-Level-Dicke (s. Tabelle 8.1).

$\Lambda^{-1}$	1,44 $\xi$	1,46 $\xi$	3 $\xi$	3,5 $\xi$	4 $\xi$
$w_{1,\text{int}}$	1,81 $\xi$		2,03 $\xi$	2,07 $\xi$	2,11 $\xi$
$w_{2,\text{int}}$		1,14 $\xi$	1,37 $\xi$	1,39 $\xi$	1,40 $\xi$

Tabelle 8.1: Die Grenzflächendicke  $w_{1,\text{int}}$  bzw.  $w_{2,\text{int}}$  in Abhängigkeit vom Cutoff  $\Lambda^{-1}$ . Die ersten beiden Spalten zeigen die jeweilige Dicke des Kinkprofils.

Diese Ergebnisse liegen im Rahmen der Erwartungen, nämlich in der Größenordnung der Korrelationslänge und werden auch experimentell bestätigt: so messen z.B. McClain et al. [MY99] die Streuung und Reflexion von Röntgenstrahlung an einer Grenzfläche zwischen Hexan ( $C_6H_{14}$ ) und Perfluor-Hexan ( $C_6F_{14}$ ) bei verschiedenen Temperaturen in der Nähe des kritischen Punktes. Ihre Messungen zeigen, dass in diesem Bereich die durch die Kapillarwellen hervorgerufene Rauigkeit gegenüber einer intrinsischen Dicke dominiert. Ihre Ergebnisse lassen sich dennoch nur mit einer

## 8 Diskussion der Resultate

intrinsischen Dicke, die gemäß der Faltungsnäherung zu den Kapillarwellen hinzugefügt wird, sinnvoll interpretieren. Für die Grenzflächendicke (dort  $\sigma$  genannt) finden sie den Ausdruck

$$\sigma = \xi \sqrt{\tilde{w}^2 + 1,58 \ln(L_g/\zeta)}$$

mit der Korrelationslänge  $\xi$  und der intrinsischen Dicke  $\tilde{w}$ . Aus theoretischen Überlegungen erwarten sie einen Wert für die intrinsische Dicke von  $\tilde{w} \approx 2$  und bestätigen diese Erwartung durch ihre Messung, die einen Wert von

$$\tilde{w} = 1,7 \pm 0,5$$

liefert. Sowohl die von mir bestimmten Werte für  $w_{1,\text{int}}$  als auch die für  $w_{2,\text{int}}$  stimmen (für  $3\xi < \Lambda^{-1} < 4\xi$ ) mit diesem Ergebnis überein.

Ein Vergleich der durch die Kapillarwellen verursachten Grenzflächendicke  $\langle h^2 \rangle$  mit anderen Ergebnissen ist nur insofern möglich, als dass sich konstatieren lässt, dass der gefundene Ausdruck die schon in [BLS65] sowie in zahlreichen späteren Arbeiten vorhergesagte Form

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

besitzt. Experimentell lässt sich diese logarithmische Abhängigkeit von der Systemgröße bisher nicht nachweisen, da unter realen Bedingungen der Einfluss des Gravitationsfeldes überwiegt und der Einfluss der Systemgröße daher nicht beobachtbar ist. So wird zum Beispiel in [RW02] für eine Argon-Oberfläche gezeigt, dass unter dem Einfluss des Gravitationsfeldes der Erde eine Vergrößerung der Systemgröße von  $L = 1\text{mm}$  auf  $L = 1\text{m}$  (bei einer Wahl von  $l = 5\text{\AA}$ ) lediglich eine Verbreiterung der Grenzflächendicke von  $4,46\text{\AA}$  auf  $4,74\text{\AA}$  zur Folge hätte.

## 9 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde gezeigt, dass in der statistischen Feldtheorie (zumindest in 1-Loop-Näherung) intrinsische Fluktuationen und Kapillarwellen voneinander getrennt und mit den entsprechenden Moden des Fluktuationsoperators identifiziert werden können. Es wurde ein intrinsisches Grenzflächenprofil

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_{R,\perp\xi_0}(z) = & v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \right. \\ & - \frac{u_R}{8\pi} \frac{1}{2} \left( \ln\left(\frac{2}{3}\right) + \ln\left(\frac{m_R}{\Lambda}\right) \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \\ & \left. + \frac{u_R}{8\pi} \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\} \end{aligned}$$

hergeleitet, das qualitativ sehr gut mit den Ergebnissen von Küster sowie von Ohta und Kawasaki übereinstimmt. Ein Cutoff  $l := 4,164\Lambda^{-1}$  von

$$l \approx (12 - 17)\xi$$

liefert außerdem eine gute quantitative Übereinstimmung. Für diese Werte findet man eine intrinsische Grenzflächendicke, die je nach Definition bei

$$w_{1,int} \approx 2,1\xi \quad \text{bzw.} \quad w_{2,int} \approx 1,4\xi$$

liegt und damit sowohl mit theoretischen Erwartungen als auch experimentellen Beobachtungen übereinstimmt.

Der erwartete Zusammenhang zwischen der Nullmode des Fluktuationsoperators und den Kapillarwellen konnte bestätigt werden und findet seinen Ausdruck in Gleichung (7.4):

$$\tilde{H}[h] = \frac{\sigma L^2}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \sum_{\vec{n}} h(\vec{n}) h(-\vec{n}) \lambda_{\vec{n}\xi_0} |\Psi_{\vec{n}\xi_0}(x)|^2 = \frac{\sigma}{2} \int_0^L d^2 \vec{x} (\vec{\nabla} h(\vec{x}))^2,$$

die einen direkten Bezug zwischen dem Band der Nullmode und dem Hamiltonian der Kapillarwellen-Theorie herstellt. Die Trennung zeigte auch, dass die  $\ln(L)$ -Abhängigkeit des Profils wie vorhergesagt aus den Kapillarwellen stammt.

Zuletzt konnten die getrennt bestimmten Grenzflächendicken des intrinsischen Profils und der Kapillarwellen mit Hilfe der Faltungsnäherung wieder kombiniert werden. Dabei gilt diese für

$$w_1^2 = w_{1,int}^2 + w_{1,KW}^2$$

## 9 Zusammenfassung

exakt, während sie für die nichtlineare Definition der Grenzflächendicke nur Näherungsweise gilt. Das von Köpf bestimmte Grenzflächenprofil entspricht also einer Faltung des von mir bestimmten intrinsischen Grenzflächenprofils mit einem Höhenprofil  $h(\vec{x})$ , das mit dem Boltzmannfaktor  $\exp(-\beta \tilde{H}[h])$  gewichtet ist (7.1):

$$\bar{\phi}(x) = \int \mathcal{D}h \ e^{-\beta \tilde{H}[h]} \bar{\phi}_{\perp \xi_0}(z - h).$$

Weiterhin offen ist die Frage nach einem Grenzflächenprofil bei festen Randbedingungen. In Kapitel 4.3 wurde das Spektrum des Fluktuationsoperators und eine nur noch von  $z$  abhängige Gleichung hergeleitet. Auch scheint es prinzipiell möglich zu sein, ein Profil bei diesen Randbedingungen zu berechnen. Es ist allerdings nicht klar, ob dies einfacher durch das Lösen der Feldgleichung oder mit Hilfe eines analytischen Ausdrucks für  $\mathbb{K}'^{-1}$  geschehen kann. Beide Wege erscheinen keineswegs trivial und erfordern weitere Untersuchungen.

## A Die Entwicklungskoeffizienten $A_{n,m}$

Bei der Entwicklung des  $\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$  nach den Eigenfunktionen

$$\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = \sum_{m \in \mathbb{N}} A_{n,m} \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right)$$

erhalte ich die Entwicklungskoeffizienten  $A_{n,m}$  durch:

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

Dieser Ausdruck verschwindet für gerade  $m$ , daher schreibe ich  $m \rightarrow 2m-1 =: l$  (d.h. weiterhin  $m \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ ) und erhalte damit

$$\begin{aligned} A_{n,l} &= \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{-2}{(2m-1)-2n} - \frac{2}{(2m-1)+2n} + \frac{4}{2m-1} \right\} \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{4n^2}{(2m-1)(4n^2-(2m-1)^2)} = \frac{4n^2}{l(4n^2-l^2)\pi}. \end{aligned}$$

Die Entwicklung lautet also wie in Kapitel 4.3 angegeben:

$$\begin{aligned} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) &= \frac{1}{\pi} \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{4n^2}{(2m-1)(4n^2-(2m-1)^2)} \sin\left(\frac{(2m-1)\pi}{L}x\right) \\ &= \frac{1}{\pi} \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{4n^2}{l(4n^2-l^2)} \sin\left(\frac{l\pi}{L}x\right). \end{aligned}$$



## B Ursprung der Koeffizienten $C_i$

Ich widme mich hier der Frage, aus welchem der drei Bänder von Fluktuationsmoden (proportional zu  $\psi_{\xi_0}$ ,  $\psi_{\xi_1}$  und  $\psi_{\lambda_p}$ ) die Koeffizienten  $C_i$  stammen. Hierzu betrachte ich den Kern des inversen Fluktuationsoperators bei zusammenfallenden Argumenten

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{xx}'^{-1} &= L^{-2} \left\{ \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2} |\psi_{\xi_0}(z)|^2 + \right. \\ &\quad + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4} m_0^2} |\psi_{\xi_1}(z)|^2 + \\ &\quad \left. + \int dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} |\psi_{\lambda_p}(z)|^2 \right\}. \end{aligned}$$

Das Betragsquadrat der Translationsmode lautet

$$|\psi_{\xi_0}(z)|^2 = \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right),$$

das der, auch als *breathing mode* bezeichneten, Mode  $\psi_{\xi_1}$

$$\begin{aligned} |\psi_{\xi_1}(z)|^2 &= \frac{3m_0}{4} \tanh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \\ &= \frac{3m_0}{4} \left\{ \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) - \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \right\} \end{aligned}$$

und das der Mode des kontinuierlichen Spektrums

$$\begin{aligned} |\psi_{\lambda_p}(z)|^2 &= \mathcal{N}_p^2 \left| 2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2} m_0^2 \tanh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + 3i m_0 p \tanh \left( \frac{m_0}{2} z \right) \right|^2 \\ &= -\mathcal{N}_p^2 \left\{ 3(m_0^4 + m_0^2 p^2) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) - \frac{9}{4} m_0^4 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \right\} + \frac{1}{2\pi}. \end{aligned}$$

Setzt man diese Ausdrücke ein und sortiert nach Potenzen des Sekans Hyperbolicus, so erhält man den inversen Fluktuationsoperator in der Form von Gleichung (4.10) mit den Koeffizienten (4.11).

Ein einfacher Vergleich zeigt, dass

$$C_1 = \frac{1}{L^2} \frac{3m_0}{8} \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2}$$

## B Ursprung der Koeffizienten $C_i$

aus der Nullmode  $\psi_{\xi_0}$  stammt,

$$C_2 = \frac{1}{L^2} \frac{3m_0}{4} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4} m_0^2}$$

aus dem Band proportional zu  $\psi_{\xi_1}$ , während die anderen drei Koeffizienten

$$\begin{aligned} C_0 &= \frac{1}{L^2} \frac{1}{2\pi} \int dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \\ C_3 &= -\frac{1}{L^2} 3m_0^2 \int dp \mathcal{N}_p^2 \sum_{\vec{n}} \frac{(m_0^2 + p^2)}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \\ C_4 &= \frac{1}{L^2} \frac{9}{4} m_0^4 \int dp \mathcal{N}_p^2 \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \end{aligned}$$

ihrer Ursprung im kontinuierlichen Spektrum haben.

Noch einfacher lässt sich dies erkennen, wenn man die in den Koeffizienten auftretenden Eigenwerte betrachtet. Man erkennt

$$\frac{1}{\lambda_{\vec{n}\xi_0}} = \frac{L^2}{4\pi^2 n^2}$$

in  $C_1$ ,

$$\frac{1}{\lambda_{\vec{n}\xi_1}} = \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4} m_0^2}$$

in  $C_2$  und

$$\frac{1}{\lambda_{\vec{n}\lambda_p}} = \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2}$$

in den Koeffizienten  $C_0$ ,  $C_3$  und  $C_4$ .

# Literaturverzeichnis

- [Ab84] D. B. ABRAHAM, *Phys. Rev. B* **29**, 525 (1984)
- [BD92] J. J. BINNEY, N. J. DOWRICK, A. J. FISHER, and M. E. J. NEWMAN, *The Theory of Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford (1992)
- [BLS65] F. BUFF, R. LOVETT und F. STILLINGER, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 621 (1965)
- [Br92] L. S. BROWN, *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press (1992)
- [CH58] J. W. CAHN, und J. E. HILLIARD, *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958)
- [CH97] M. CASELLE und M. HASENBUSCH, *J. Phys. A Math. Gen.* **30** 4963 (1997)
- [DK80] H. W. DIEHL, D. M. KROLL und H. WAGNER, *Z. Phys. B* **36**, 329 (1980)
- [Fi67] M. E. FISHER, *Rep. Prog. Phys.* **30**, 615 (1967)
- [FJ91] M. E. FISHER und A. J. JIN, *Phys. Rev. B* **44**, 1430 (1991)
- [FP67] L. D. FADEEV und V. N. POPOV, *Phys. Lett.* **25B**, 29 (1967)
- [GR81] I. S. GRADSTEIN und I. M. RYSHIK, *Summen-, Produkt- und Integraltafeln*, Verlag Harri Deutsch (1981)
- [GS75] J.-L. GERVAIS und B. SAKITA, *Phys. Rev. D* **11**, 2943 (1975)
- [He93] J. HEITGER, *Feldtheoretische Berechnung universeller Amplitudenverhältnisse in 2-Loop-Ordnung beim dreidimensionalen ISING-Modell*, Diplomarbeit, Universität Münster (1993)
- [Ho93] P. HOPPE, *Tunneleffekt und Energieaufspaltung im dreidimensionalen  $\phi^4$ -Modell mit Pauli-Villars-Regularisierung*, Diplomarbeit, Universität Münster (1993)
- [Ho97] P. HOPPE, *Analytische Berechnung der Oberflächenspannung im dreidimensionalen  $\phi^4$ -Modell in 2-Loop-Ordnung*, Dissertation, Universität Münster (1997)
- [HW69] J. S. HUANG und W.W. WEBB, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 160
- [Ja84] D. JASNOW, *Rep. Prog. Phys.* **47**, 1059 (1984)
- [JR78] D. JASNOW und J. RUDNICK, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 698 (1978)
- [KM08] M. H. KÖPF und G. MÜNSTER, *J. Stat. Phys.* **132**, 417 (2008)
- [Kö08] M. H. KÖPF, *Rauhigkeit von Grenzflächen in der Ising-Universalitätsklasse*, Diplomarbeit, Universität Münster (2008)

## Literaturverzeichnis

- [KS01] H. KLEINERT, V. SCHULTE-FROHLINDE, *Critical Properties of  $\phi^4$ -Theories*, World Scientific Publishing, Singapore (2001)
- [Kü01] J. KÜSTER, *Kritisches Verhalten fluktuerender Grenzflächen*, Dissertation, Universität Münster (2001)
- [La37] L. D. LANDAU, *Phys. Z. Sowjetunion* **11**, 556 (1937), englische Übersetzung in “*Collected Papers of L. D. Landau*” (ed. D. ter Haar), Pergamon Press, Oxford (1965)
- [LB91] M. LE BELLAC, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford University Press (1991)
- [LL87] L. D. LANDAU, E. M. LIFSHITZ, *Lehrbuch der Theoretischen Physik V - Statistische Physik*, Akademie-Verlag Berlin (1987)
- [Ma13] L. MANDELSTAM, *Annalen der Physik* **41** 609 (1913)
- [MY99] B. R. MCCLAIN, M. YOON, J. D. LITSTER und S. G. J. MOCHRIE, *Eur. Phys. J. B* **10**, 45 (1999)
- [Mü04] M. MÜLLER, *Fluktuationen kritischer Grenzflächen auf verschiedenen Größenskalen*, Diplomarbeit, Universität Münster (2004)
- [Mü90] G. MÜNSTER, *Nucl. Phys. B* **340** 559 (1990)
- [OK77] T. OHTA und K. KAWASAKI, *Prog. Theor. Phys.* **58** 467 (1977)
- [Pa09] S. PAPENKORT, *Numerische Untersuchung kritischer Grenzflächen in der  $\phi^4$ -Theorie*, Diplomarbeit, Universität Münster (2009)
- [Po31] S. D. POISSON, *Nouvelle Theorie de l'Action Capillaire*, Bachelier, Paris (1931)
- [PS95] M. E. PESKIN und D. V. SCHROEDER, *Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press (1995)
- [PV49] W. PAULI und F. VILLARS, *Rev. Mod. Phys.* **21** 434 (1949)
- [Ra75] R. RAJARAMAN, *Phys. Rep. C* **21** 229 (1975)
- [Ra82] R. RAJARAMAN, *Solitons and Instantons - An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, New York, Oxford (1982)
- [RW02] J. S. ROWLINSON und B. WIDOM, *Molecular Theory of Capillarity*, Dover Publications (2002)
- [Sm08] M. v. SMOLUCHOWSKI, *Annalen der Physik* **25** 225 (1908)
- [vdW93] J. D. VAN DER WAALS, *The Thermodynamic Theory of Capillarity Under the Hypothesis of a Continuous Variation of Density*, englische Übersetzung von (J. S. Rowlinson) in *J. stat. Phys.* **20**, 197 (1979), Original in Verhandl. Konink. Akad. Weten. Amsterdam (sect. 1), Vol. 1, No. 8 (1893)
- [Wa80] D. J. WALLACE, in *Phase Transitions (Cargèse, 1980)*, eds. M. Lévy, J. C. LeGuillou, and J. Zinn-Justin, Plenum Press, New York (1982)

- [Wi72] B. WIDOM, in *Phase Transition and Critical Phenomena, Vol. 2*, eds. C. Domb and M. Green, Academic Press, New York (1972)
- [Yo55] T. YOUNG, in *Miscellaneous Works of the late Thomas Young, Vol. I*, ed. G. Peacock , Murrary, London (1855); Zitat auf S.460.
- [ZJ89] J. ZINN-JUSTIN, *Quantum Field Theorie and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1989)



Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbstständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet zu haben.

Münster, im Januar 2010