

# Rauhigkeit von Grenzflächen in der Ising-Universalitätsklasse

Als Diplomarbeit vorgelegt von  
Michael Hubert Köpf

Januar 2008



Westfälische Wilhelms-Universität Münster



# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>1 Statistische Feldtheorie kritischer Phänomene</b>	<b>5</b>
1.1 Das Landau-Ginzburg-Modell . . . . .	6
1.2 Funktionalmethoden der SFT . . . . .	8
<b>2 Kapillarwellen</b>	<b>13</b>
2.1 Rauhigkeit und Einfluss der Systemgröße . . . . .	14
2.2 Die Faltungsnäherung . . . . .	16
<b>3 Das System mit Grenzfläche</b>	<b>19</b>
3.1 Randbedingungen für Grenzflächenlösungen . . . . .	19
3.2 Das Grenzflächenprofil in Landau-Approximation . . . . .	20
<b>4 Die Feldgleichung für das Grenzflächenprofil</b>	<b>23</b>
4.1 Störungsrechnung . . . . .	24
4.2 Berechnung von $\Gamma_{\perp}[\varphi_C]$ bis zur 1. Ordnung . . . . .	35
4.3 Die Feldgleichung in erster Ordnung der Loop-Entwicklung . . . . .	38
4.4 Das Spektrum des Fluktuationsoperators $\mathbb{K}(\phi_0)$ . . . . .	41
4.5 Die Feldgleichung mit explizitem $\mathbb{K}_{xx}'^{-1}(\phi_0)$ . . . . .	43
<b>5 Lösung der Feldgleichung</b>	<b>47</b>
5.1 Variation der Konstanten . . . . .	47
5.2 Berechnung der Koeffizienten $C_i$ und $\tilde{C}_i$ . . . . .	49
5.3 Renormierung . . . . .	55
<b>6 Diskussion des berechneten Profils</b>	<b>61</b>
6.1 Diskussion der Kurvenschar $\bar{\phi}_R(z, L)$ . . . . .	61
6.2 Dicke der Grenzfläche . . . . .	66
6.3 Gültigkeitsbereich der Approximation . . . . .	75
6.4 Vergleich mit Resultaten anderer Arbeiten . . . . .	77
<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>83</b>
<b>A Dimensionen der vorkommenden Größen</b>	<b>85</b>
<b>B Berechnungen zum naiven Moment</b>	<b>87</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>95</b>



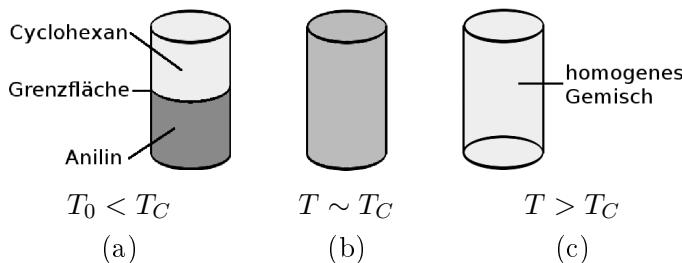
# Einleitung

Gegenstand dieser Arbeit sind Grenzflächen in einer Klasse von zweikomponentigen Systemen. Dazu zählen z.B. Systeme aus zwei Fluiden oder solche aus Ising-Elementarmagneten mit zwei diskreten Spinzuständen.

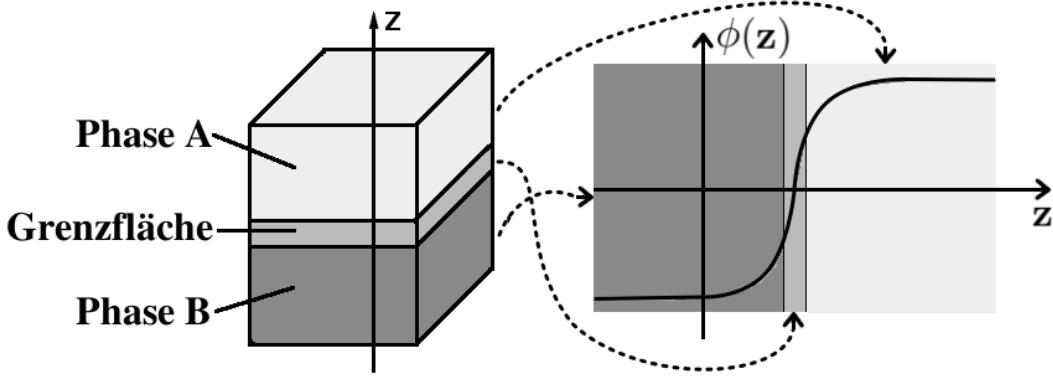
Zur Veranschaulichung denke man dabei konkret an ein Gemisch von Cyclohexan ( $C_6H_{12}$ ) und Anilin ( $C_6H_5NH_2$ ), wie es 1953 von Atack und Rice ([AR53], [AR54]) untersucht wurde. Oberhalb einer kritischen Temperatur von  $T_C = 30.9^\circ\text{C}$  bilden die beiden Fluide ein homogenes Gemisch. Bei tieferen Temperaturen entmischen die Komponenten und bilden zwei getrennte Phasen aus. Nähert man sich dem kritischen Punkt von tiefen Temperaturen her, so beobachtet man zudem in unmittelbarer Nähe von  $T_C$  die 1869 von Andrews entdeckte *kritische Opaleszenz*: Langreichweitige Fluktuationen lassen das gesamte Gemisch milchig bis undurchsichtig erscheinen ([An69]). Dieser Phasenübergang ist in Abb. 1 schematisch dargestellt.

Dem menschlichen Auge stellt sich die Grenzfläche zwischen der Phase reinen Anilins und der reinen Cyclohexans als scharf lokalisierte zweidimensionale Membran dar, wie in Abb. 1 (a) angedeutet. Genauer betrachtet handelt es sich bei der Grenzfläche aber um einen Bereich, in dem sich die Dichtedifferenz beider Komponenten in einer Richtung senkrecht zur Grenzfläche stetig verändert. Abb. 2 zeigt qualitativ, wie der Begriff „Grenzfläche“ in diesem Sinne zu verstehen ist.

Von besonderem Interesse ist dabei die Abhängigkeit der Dicke der auftretenden Grenzfläche von den Systemparametern. Betrachtet man ein System, welches in zur Grenzfläche senkrechter Richtung unendlich weit ausgedehnt und in den beiden anderen Raumrichtungen auf



**Abb. 1:** Phasenübergang eines Cyclohexan-Anilin-Gemisches. (a) Unterhalb von  $T_C$  sind die Komponenten durch einen Grenzflächenbereich getrennt. (b) In unmittelbarer Nähe von  $T_C$  zeigt das System kritische Opaleszenz. (c) Oberhalb von  $T_C$  bilden beide Komponenten ein homogenes Gemisch.



**Abb. 2:** Skizze eines Systems mit Grenzfläche. Der augenscheinlichen Trennung in zwei Bereiche durch eine scharf lokalisierte Grenzfläche entspricht bei genauer Betrachtung ein stetiger Verlauf des Ordnungsparameters  $\phi$ . Für ein binäres Fluidsystem entspricht  $\phi$  der Dichtedifferenz beider Komponenten.

ein Quadrat der Seitenlänge  $L$  begrenzt ist, so ist bekannt, dass sich die Grenzfläche aufgrund von Kapillarwellen logarithmisch mit wachsender Systemgröße  $L$  verbreitert ([BLS65], [RW02]). Dieses Phänomen wird als *Rauhigkeit* bzw. *Roughening* der Oberfläche bezeichnet. Im Vergleich zur großen Wellenlänge der verursachenden Fluktuationen ist die Dicke der Grenzfläche sehr gering, weshalb zur Beschreibung von Kapillarwellen meist Modelle zum Einsatz kommen, die eine Grenzfläche als scharf lokalisierte Membran, ähnlich einem Trommelfell („drum-head“), beschreiben ([Ma13]). Eine weit verbreitete Möglichkeit, dies mit der Idee eines stetigen Verlaufs des Ordnungsparameterfeldes zu kombinieren, beruht auf der Annahme, es bestehe keinerlei Wechselwirkung zwischen dem *intrinsischen*, also von der Systemgröße unabhängigen, Grenzflächenprofil und den Kapillarwellen-Fluktuationen. Die tatsächliche Grenzfläche stellt man sich in diesem Rahmen als eine Faltung der Membran mit dem intrinsischen Profil vor. Auch wenn durch solche Kunstgriffe eine gute Näherung möglich wird, ist damit noch keine befriedigende Theorie des Roughening-Phänomens erreicht, insbesondere, da die Trennung in ein intrinsisches Profil und ein Kapillarwellenprofil immer mit einer gewissen Willkür verbunden ist.

Die statistische Feldtheorie, die den Rahmen dieser Arbeit bildet, berücksichtigt Fluktuationen auf allen Größenordnungen eines zugrundeliegenden physikalischen Systems. Prinzipiell sollte sich das Roughening also direkt aus der Theorie begründen lassen, ohne es dem System *ad hoc* durch heuristische Argumente aufzuprägen. Zu zeigen, dass diese Herleitung aus *First Principles* tatsächlich möglich ist, stellt die zentrale Zielsetzung der vorliegenden Arbeit dar.

Die Tatsache, dass sich, wie eingangs bemerkt, eine ganze Klasse verschiedenartiger Systeme im Rahmen eines einzigen Modells beschreiben lässt, beruht auf dem Gedanken der Universalität. Dieses Konzept aus der Theorie der kritischen Phänomene ist ein immer wiederkehrendes Motiv der modernen Physik.

Den Grundstein dieser Theorie legte Landau 1937, als er den Zusammenhang zwischen Pha-

---

senübergängen zweiter Art und Symmetrieänderungen des betrachteten Systems erkannte. Von großer Bedeutung in der nach ihm benannten Landau-Theorie ist das Konzept des *Ordnungsparameters*  $\phi$ , einer physikalischen Größe, die als Maß für die Symmetrieänderung während des Phasenüberganges dient. Für ein magnetisches System, zum Beispiel, übernimmt die Magnetisierung die Rolle des Ordnungsparameters. In binären Fluidsystemen, wie dem zu Anfang besprochenen Cyclohexan-Anilin-Gemisch, verwendet man stattdessen die Dichtedifferenz der beiden Komponenten abzüglich der kritischen Dichtedifferenz  $\rho_C$  des homogenen Gemisches am kritischen Punkt, also  $\phi = \Delta\rho - \Delta\rho_C$ . Mit Erreichen der kritischen Temperatur  $T_C$  des Phasenüberganges geht der Ordnungsparameter dementsprechend gegen Null.

Je größer der Betrag des Ordnungsparameters, desto weiter ist das System vom Zustand der Phase höherer Symmetrie entfernt. Diesen Zusammenhang zwischen Symmetrie und Ordnungsparameter kann man sich sehr gut am Beispiel der Dichtedifferenz veranschaulichen: Oberhalb von  $T_C$  liegt ein homogenes Gemisch vor, d.h. die Umgebung eines jeden Punktes in der Flüssigkeit sieht - zumindest fern der Gefäßwände - gleich aus. Mit anderen Worten: Es herrscht Translationsinvarianz bzw. -symmetrie. An jedem Punkt in der Flüssigkeit ist die Dichtedifferenz genau gleich, so dass der Ordnungsparameter verschwindet. Unterhalb von  $T_C$  hingegen entmischen die Flüssigkeiten und damit geht die Symmetrie verloren. Die Umgebung eines Punktes im Bereich des reinen Anilins unterscheidet sich nun deutlich von der eines Punktes im Bereich des reinen Cyclohexans. Dies spiegelt sich in der Größe des Ordnungsparameters wieder. Abgesehen von der unmittelbaren Umgebung der Grenzfläche zwischen den beiden Bereichen ist die Dichtedifferenz im gesamten System ungleich Null.

Landaus Hypothese, welche letztlich die Grundlage des Universalitätsgedanken darstellt, besagt nun, dass die Form der thermodynamischen Potenziale in der Nähe des kritischen Punktes allein durch deren Analytizität - die Landau voraussetzt - und einfache Symmetrieargumente bestimmt wird. Aufgrund der Analytizität nämlich lassen sich besagte Potenziale in Potenzreihen des Ordnungsparameters entwickeln. Zudem lassen sich, da das Potenzial insgesamt alle Symmetrien des zugrundeliegenden Systems besitzt, Aussagen zu einzelnen Termen der Reihenentwicklung machen. Das Ising-Modell z.B. ist symmetrisch unter Vertauschung  $\phi \rightarrow -\phi$ , d.h. einer gleichzeitigen Umkehrung der Spins aller Elementarmagnete des Systems. Eine solche Symmetrie kann nur dann realisiert sein, wenn alle ungeraden Potenzen von  $\phi$  in der Reihenentwicklung verschwinden. Zusammengenommen heißt das, dass sich Systeme gänzlich verschiedener mikroskopischer Zusammensetzung in der Nähe der kritischen Temperatur durch ein und dasselbe Potenzial beschreiben lassen, sofern sie in Dimensionalität, Zahl der Spinfreiheitsgrade des Ordnungsparameters und ihrer Symmetrie übereinstimmen. Systeme, für die eine solche Übereinstimmung vorliegt, bilden zusammen eine *Universalitätsklasse*.

Der Gültigkeitsbereich der Landau-Theorie beschränkt sich allerdings auf einen Temperaturbereich in dem der Ordnungsparameter klein und seine Fluktuationen vernachlässigbar sind. In unmittelbarer Nähe des kritischen Punktes, in der sogenannten Fluktuationsumgebung ([LL87], § 146) dominieren jedoch thermische Schwankungen das kritische Verhalten des Systems und müssen in einer erweiterten Theorie berücksichtigt werden. Dies leistet, für das in dieser Arbeit betrachtete Problem, das Landau-Ginzburg-Modell, eine statistische Feldtheorie des lokalen Ordnungsparameterfeldes, die der  $\phi^4$ -Quantenfeldtheorie in euklidischer Raumzeit formal äquivalent ist. Diese Äquivalenz erlaubt es, den gesamten Apparat

der euklidischen Quantenfeldtheorie auf die vorliegende thermodynamische Problemstellung anzuwenden. Damit gelingt ein Brückenschlag zwischen Bereichen der theoretischen Physik, die auf den ersten Blick wenig wesensverwandt erscheinen. Es erschließt sich dabei ein erstaunlich großer Überlapp zwischen der Theorie subatomarer Teilchen und der Beschreibung kritischer Phänomene.

In Rahmen der statistischen Feldtheorie sind Systeme mit Grenzflächen ausführlich untersucht worden (siehe z.B. [Ja84]). Die in Abb. 2 gezeigte Ortsabhängigkeit des Ordnungsparameterfeldes entspricht einem nichttrivialen Vakuum in der euklidischen Quantenfeldtheorie, wie es in der Theorie der Instantonen vorkommt ([Ra82]). Es verwundert deshalb nicht, dass große Fortschritte auf dem Gebiet der statistischen Grenzflächenphysik in den siebziger und frühen achtziger Jahren gemacht wurden, also zu einer Zeit, in der auch die Instantontheorie weitgehend ausgearbeitet wurde.

Das Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf dem Grenzflächenprofil, also dem Verlauf des mittleren Ordnungsparameterfeldes  $\bar{\phi}(x) = \langle \phi(x) \rangle$  und seiner Abhängigkeit von der Systemgröße  $L$ . Ausgangspunkt der Untersuchung des Profiles ist die auch als *Landau-Approximation* bekannte Mean-Field-Theorie, bei der thermische Fluktuationen vernachlässigt werden, also praktisch eine Grenzfläche bei  $T = 0\text{ K}$  betrachtet wird. Zu dem so erhaltenen Profil werden dann mit Mitteln der statistischen Feldtheorie in einer Entwicklung nach Potenzen von  $\beta^{-1} = k_B T$  Korrekturterme berechnet, was in der Quantenfeldtheorie einer Entwicklung nach Potenzen des Planck'schen Wirkungsquantums  $\hbar$ , also einer Loop-Entwicklung um den klassischen Grenzfall  $\hbar = 0$  entspricht.

Dazu wird mittels der Gibbs'schen Freien Energie  $\Gamma$ , die der effektiven Wirkung der Quantenfeldtheorie entspricht, eine Differenzialgleichung für das Grenzflächenprofil hergeleitet.  $\Gamma$  ist nur im Rahmen einer Störungsrechnung zugänglich, die hier bis zur 1-Loop-Ordnung durchgeführt wird.

Es folgt nun ein Überblick über die Gliederung der vorliegenden Arbeit. Im ersten Kapitel wird der effektive Hamilton-Operator der betrachteten Systemklasse vorgestellt und ein kurzer Überblick über die Theorie der Phasenüberänge zweiter Art gegeben. Zum Abschluss des Kapitels werden die Funktionalmethoden der statistischen Feldtheorie bereitgestellt, welche die Grundlage für die folgenden Rechnungen bilden.

Kapitel 2 dient einer kurzen Beschreibung der Theorie der Kapillarwellen. Hier werden gängige Modelle vorgestellt, mit denen die Rauhigkeit von Grenzflächen theoretisch beschrieben wird.

Nachdem in diesen beiden Kapiteln die theoretischen Grundlagen zusammengefasst wurden, wird in Kapitel 3 das zu untersuchende System vorgestellt.

Inhalt des vierten Kapitels ist die störungstheoretische Herleitung einer Feldgleichung für das Grenzflächenprofil, die dann in Kapitel 5 gelöst wird.

Das berechnete Profil wird dann im sechsten Kapitel diskutiert, wobei insbesondere die logarithmische Abhängigkeit der Grenzflächenbreite von der Systemgröße dargestellt und der Gültigkeitsbereich der gewählten 1-Loop-Approximation abgeschätzt wird. Ein Vergleich meiner Ergebnisse mit Resulaten anderer Arbeiten bildet den Abschluss des Kapitels.

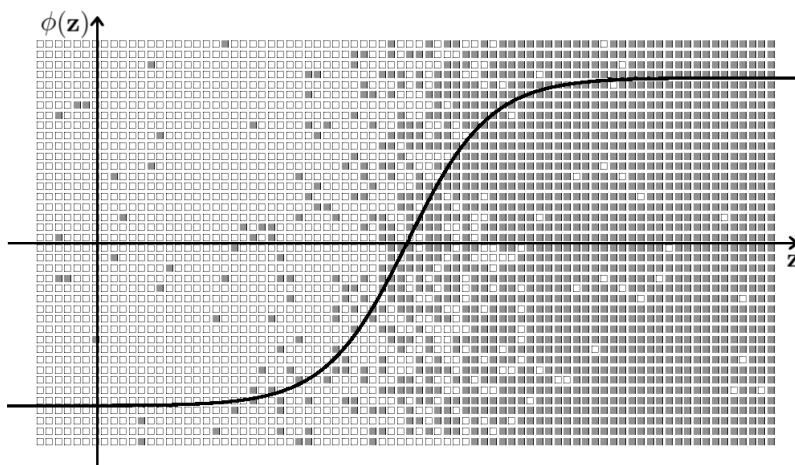
# 1 Statistische Feldtheorie kritischer Phänomene

Das in diesem Kapitel vorgestellte Landau-Ginzburg-Modell bildet die Grundlage für alle weiteren Berechnungen in dieser Arbeit. Einen Überblick über das Thema findet man in den gängigen Büchern über statistische Feldtheorie, z.B. in [KS01], [LB91], [ZJ02] und [Pa88].

Für den hier verwendeten feldtheoretischen Zugang betrachte ich den Ordnungsparameter  $\phi(x)$  als kontinuierliches Skalarfeld im  $D$ -dimensionalen Raum, wobei ich mich letzten Endes für den Fall  $D = 3$  interessiere. Auch Systeme aus diskreten Elementen, wie z.B. das dreidimensionale Ising-Modell, lassen sich auf diesem Wege beschreiben, wobei  $\phi(x)$  dann die mittlere Magnetisierung am Punkte  $x$  angibt:

$$\phi(x) \sim \sum_{S_i \in V_{x,\delta}} S_i \exp\left(-\frac{(x - x_i)^2}{2\delta^2}\right). \quad (1.1)$$

Dabei ist  $\delta$  der Radius des der Mittelung zu Grunde liegenden Volumens  $V_{x,\delta}$  um  $x$ , über dessen Elementarspins  $S_i$  summiert und gemittelt wird. Dieser muss einerseits groß genug sein um die Stetigkeit von  $\phi$  zu gewährleisten, darf aber andererseits die Korrelationslänge nicht überschreiten. In Abbildung 3 wird die Idee eines Grenzflächenprofils  $\phi(z)$  im Rahmen des Ising-Modells veranschaulicht.



**Abb. 3:** Grenzfläche eines zweidimensionalen Ising-Systems. Der Ordnungsparameter  $\phi$  gibt die gemittelte Magnetisierung als Funktion von  $z$  an.

Im Falle binärer Fluidsysteme fungiert die Dichtedifferenz der beiden Komponenten als lokaler Ordnungsparameter:

$$\phi(x) = \rho_A(x) - \rho_B(x) - \Delta\rho_C.$$

Dabei bezeichnet  $\rho_i(x)$  die lokale Dichte der Komponente  $i$ . Die Subtraktion der kritischen Dichtedifferenz  $\Delta\rho_C$ , die am kritischen Punkt in der gesamten Flüssigkeit vorliegt, macht  $\phi(x)$  zu einem Maß für die Abweichung von der Phase höherer Symmetrie, also zu einem vernünftigen Ordnungsparameter.

Als Erweiterung der Theorie auf die Fluktuationsumgebung wurde das Landau-Ginzburg-Modell entwickelt. Dabei handelt es sich um eine statistische Feldtheorie, bei der das Zustandsfunktionalintegral um ein Extremum in Potenzen des inversen Boltzmann-Parameters  $\beta^{-1} = k_B T$  entwickelt werden kann. Formal ist dies der semiklassischen Methode in der Quantenfeldtheorie äquivalent, wobei dort das Funktionalintegral nach Potenzen des Planck'schen Wirkungsquantums  $\hbar$  entwickelt wird. Genau wie in diesem Fall, von einem rein klassischen System bei  $\hbar = 0$  ausgehend, Quantenfluktuationen berücksichtigt werden, fließen in die statistische Feldtheorie thermische Fluktuationen in Form von  $\mathcal{O}(\beta^{-1})$ -Terminen einer Entwicklung um  $T = 0\text{K}$  ein. Im folgenden Abschnitt wird die Hamiltondichte des Landau-Ginzburg-Modells vorgestellt und gezeigt, wie in diesem theoretischen Rahmen ein Phasenübergang beschrieben werden kann. Zum Abschluss dieses Kapitels werden dann in Abschnitt 1.2 die wichtigsten Methoden der statistischen Feldtheorie vorgestellt.

## 1.1 Das Landau-Ginzburg-Modell

### 1.1.1 Die Hamiltondichte des Landau-Ginzburg-Modells

Den Ausgangspunkt bildet eine kanonische Verteilungsfunktion über dem Konfigurationsraum des betrachteten Systems. Eine Konfiguration  $C$  wird dabei jeweils durch ein stetiges Feld  $\phi(x)$  eines Punktes  $x$  im  $D$ -dimensionalen Raum beschrieben. Das statistische Gewicht einer Konfiguration lautet dann

$$H(C) = H[\phi] = \int d^D x \mathcal{H}(\phi(x))$$

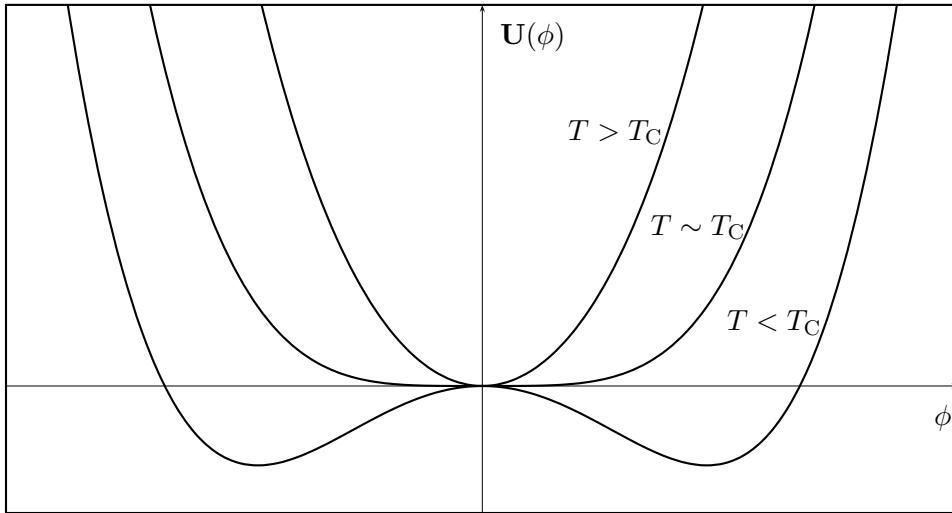
mit der Hamiltondichte  $\mathcal{H}$ . Die Zustandssumme lässt sich nun durch ein Funktionalintegral ausdrücken:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta \int d^D x \mathcal{H}(\phi(x))}. \quad (1.2)$$

Die Hamiltondichte  $\mathcal{H}$  im Landau-Ginzburg-Modell ist definiert als

$$\mathcal{H}(\phi) = \frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{\mu^2}{2}\phi^2 + \frac{g_0}{4!}\phi^4. \quad (1.3)$$

Das Landau-Ginzburg-Modell beschreibt ein System nur in der Nähe des kritischen Punktes  $T = T_C$  korrekt. Daher lässt sich der Faktor  $\beta = 1/k_B T \sim 1/k_B T_C$  als konstant betrachten und wird in der Literatur häufig gleich eins gesetzt, ganz ähnlich der Konvention  $\hbar = 1$  in der Quantenfeldtheorie.



**Abb. 4:** Das temperaturabhängige Potenzial in Umgebung des Phasenüberganges.

### 1.1.2 Landau-Approximation und Phasenübergang

Vernachlässigt man statistische Fluktuationen und betrachtet nur dasjenige Feld  $\phi_0(x)$ , welches den Hamiltonian minimal werden lässt, dann betrachtet man das System in der sogenannten *Landau-Approximation*, die auch als *Mean-Field-Näherung* bezeichnet wird. In dieser Näherung entspricht das Feld  $\phi(x)$  an allen Punkten seinem Gleichgewichtswert.

Das Minimum des Hamiltonian entspricht dem Minimum des Potenzials

$$U(\phi) = \frac{\mu^2}{2}\phi^2 + \frac{g_0}{4!}\phi^4,$$

da jedes nichtkonstante Feld zu einem positiven kinetischen Beitrag  $(\nabla\phi)^2$  führt.

Betrachtet man nun  $\mu^2$  als Kontrollparameter, der monoton mit der Temperatur wächst und bei einer kritischen Temperatur  $T = T_C$  einen Nulldurchgang hat, so weist das durch  $U(\phi)$  beschriebene System einen Phasenübergang zweiter Ordnung auf.

Die Situation ist in Abb. 4 schematisch dargestellt. Für ein  $\mu^2 > 0$  erhält man nur ein Minimum in  $\phi_0 = 0$ . Für ein  $\mu^2 < 0$  schreibt man  $\mu^2 \rightarrow -m_0^2/2$  und erhält ein Maximum in  $\phi_0 = 0$  sowie zwei entartete Minima in

$$\phi_0 = \pm v_0 = \pm \sqrt{\frac{3m_0^2}{g_0}}.$$

In der Phase mit  $\mu^2 < 0$  liegt der klassische Gleichgewichtszustand in einem der beiden Minima von  $U(\phi)$ . Bezuglich dieses Zustandes handelt es sich bei der Spiegelsymmetrie an der Ordinate um eine *versteckte* oder *gebrochene Symmetrie* (siehe z.B. [Co85], Kapitel 5). Diese Phase bezeichne ich deshalb im Folgenden kurz als „gebrochene Phase“ im Gegensatz zur „symmetrischen Phase“ mit  $\mu^2 > 0$ .

Zweckmäßigerweise normiert man das Potenzial, so dass  $U(\pm v_0) = 0$ :

$$U(\phi) = -\frac{m_0^2}{4}\phi^2 + \frac{g_0}{4!}\phi^4 + \frac{3}{8}\frac{m_0^4}{g_0}.$$

Damit gilt dann auch

$$H(\pm v_0) = \int d^D x U(\pm v_0) = 0.$$

Die Höhe der Potenzialbarriere zwischen den beiden entarteten Minima, also

$$U(\phi = 0) = \frac{3}{8}\frac{m_0^4}{g_0} = \frac{g_0 v_0^4}{24}, \quad (1.4)$$

hängt von der Kopplungsstärke  $g_0$  und der Masse bzw. inversen Mean-Field-Korrelationslänge  $m_0$  ab.

## 1.2 Funktionalmethoden der SFT

In diesem Abschnitt wird das Handwerkzeug für die folgenden Rechnungen vorgestellt. Eine ausführliche Darstellung der Funktionalmethoden der Quantenfeldtheorie findet man in allen gängigen Lehrbüchern wie [Br92], [PS95] und [Ry96]. Die enge Beziehung zwischen Quanten- und statistischer Feldtheorie wird z.B. in [LB91] erläutert.

### 1.2.1 Erzeugende Funktionale

Durch Addition eines Quellterms  $J(x)\phi(x)$  zur Hamiltondichte im Zustandsfunktionalintegral erhält man das normierte erzeugende Funktional der Korrelationsfunktionen:

$$Z[J] = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^D x [\mathcal{H} - J(x)\phi(x)] \right\} \quad (1.5)$$

Normiert ist  $Z[J]$  über die Zustandssumme im Falle  $J = 0$ , also

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H} \right\}.$$

Die  $n$ -Punkt Korrelationsfunktionen erhält man durch  $n$ -malige Funktionalableitung von  $Z[J]$  nach der äußeren Quelle  $J(x)$ , wobei man nach erfolgter Ableitung nur den Fall  $J(x) = 0$  betrachtet:

$$\langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle = \beta^{-n} \left( \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \right) \dots \left( \frac{\delta}{\delta J(x_n)} \right) Z[J] \Big|_{J=0}. \quad (1.6)$$

Die Zustandssumme (1.5) lässt sich auch als Reihe darstellen:

$$\begin{aligned} Z[J] &= \langle \exp \beta \int d^D x J(x)\phi(x) \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \int d^D x_1 \dots d^D x_n J(x_1) \dots J(x_n) \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle. \end{aligned}$$

Ein weiteres erzeugendes Funktional definiert man über die Beziehung

$$\beta W[J] = \ln(Z[J]). \quad (1.7)$$

Es gilt

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(x) \delta J(y)} \bigg|_{J=0} &= \beta [\langle \phi(x) \phi(y) \rangle - \langle \phi(x) \rangle \langle \phi(y) \rangle] \\ &=: \beta K_2(x, y) \end{aligned}$$

und allgemeiner

$$\frac{\delta^n W[J]}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} \bigg|_{J=0} = \beta^{n-1} K_n(x_1, \dots, x_n), \quad (1.8)$$

wobei  $K_n(x_1, \dots, x_n)$  die Kumulante  $n$ -ten Grades bezeichnet. Einen Beweis für den allgemeinen Fall (1.8) findet man in [ZJ02], Kapitel 7.4.1.  $W[J]$  ist also das erzeugende Funktional der verbundenen Korrelationsfunktionen oder Kumulanten.

Für den Rest dieses Kapitels setze ich den Faktor  $\beta = 1$ . Von dieser Konvention werde ich auch später nur abweichen, wenn, wie z. B. in Kapitel 4, die Systematik der Störungsrechnung verdeutlicht werden soll.

Zum Schluss dieses Abschnittes sei noch darauf hingewiesen, dass die erzeugenden Funktionale  $Z[J]$  und  $W[J]$  formale Analoga in der Euklidischen Quantenfeldtheorie besitzen. Diese sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned} Z_E[J] &= \frac{1}{Z_{E,0}} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -S_E + \int dx J(x) \phi(x) \right\} \\ \Rightarrow \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle &= \frac{\delta^n Z_E[J]}{\delta \phi(x_1) \dots \delta \phi(x_n)} \bigg|_{J=0}, \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} W_E[J] &= \ln Z_E[J] \\ \Rightarrow \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle_C &= \frac{\delta^n W_E[J]}{\delta \phi(x_1) \dots \delta \phi(x_n)} \bigg|_{J=0}. \end{aligned}$$

Die statistischen Momente entsprechen dort also den  $n$ -Punkt-Greensfunktionen

$$G_n(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle$$

und die Kumulanten sind die statistischen Analoga der verbundenen Korrelatoren

$$G_C(x_1, \dots, x_n) = \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle_C.$$

Aufgrund dieser formalen Ähnlichkeit werden die Worte „Kumulante“, „2-Punkt Greensfunktion“ und „Propagator“ häufig synonym verwendet. Eine Übersicht über die formalen Identitäten findet sich in Tabelle 1.

**Tab. 1:** Formale Identität zwischen statistischer Feldtheorie und euklidischer Quantenfeldtheorie

QFT	SFT
Skalarfeld $\phi(x)$	Lok. Ordnungsparameter, $\phi(x)$ Spin-Variable
Lagrangean $\mathcal{L}_E(\phi)$	Hamiltondichte $\mathcal{H}(\phi)$
Euklidische Wirkung $S_E[\phi]$ $S_E[\phi] = \int d^D x \mathcal{L}(\phi(x))$	Hamiltonian $H[\phi]$ $H[\phi] = \int d^D x \mathcal{H}(\phi(x))$
Planck'sches Wirkungsquantum $\hbar$	Temperatur $\beta^{-1}$
Erzeugendes Funktional der Korrelatoren $Z[J]$	Erzeugendes Funktional der Momente $Z[J]$
Erzeugendes Funktional der verbundenen Korrelatoren $W[J]$	Helmholtzsche Freie Energie, $W[J]$ erzeugendes Funktional der Kumanlanten
Effektive Wirkung $\Gamma[\phi_C]$	Gibbs'sche Freie Energie $\Gamma[\phi_C]$
inverse Masse $m^{-1}$	Korrelationslänge $\xi$
Lagrangesche Formulierung in $d$ Dimensionen	Hamiltonsche Formulierung in $d + 1$ Dimensionen
Klassischer Grenzfall	Landau-Näherung
Quantenfluktuationen	Thermische Fluktuationen

### 1.2.2 Die effektive Wirkung oder Gibbs'sche freie Energie $\Gamma$

In diesem Abschnitt soll der zentrale Begriff der effektiven Wirkung eingeführt und seine physikalische Bedeutung erläutert werden. Zunächst führt man das sogenannte „klassische Feld“<sup>1</sup>  $\phi_C(x)$  ein, welches über die Beziehung

$$\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} = \langle \phi(x) \rangle_J = \phi_C(x) \quad (1.9)$$

definiert ist.  $\phi_C(x)$  ist also selbst ein Funktional von  $J$  mit der Eigenschaft

$$\frac{\delta \phi_C(x)}{\delta J(y)} = \frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(x) \delta J(y)} = K_2(x, y).$$

Für den Vakuumerwartungswert (VEW)  $\bar{\phi}$  gilt damit

$$\bar{\phi}(x) = \langle \phi(x) \rangle = \lim_{J \rightarrow 0} \phi_C(x). \quad (1.10)$$

<sup>1</sup>Die Bezeichnung „klassisches Feld“ ist irreführend, da  $\phi_C(x)$  Quanten- bzw. statistische Fluktuationen enthält. Dennoch hat sie sich in der Literatur durchgesetzt ([PS95],[Ry96]).

$\phi_C(x)$  ist ein gewichtetes Mittel über alle Fluktuationen von  $\phi(x)$  und entspricht damit der Magnetisierung  $M$  im magnetischen System, die ein Mittel über das Spinfeld ist.  $W[J]$  entspricht in diesem Bild - bis auf das Vorzeichen - der Helmholtzschen freien Energie  $F(H)$  mit  $M = -\frac{\partial F}{\partial H}$ , wobei  $H$  das externe Magnetfeld ist. Via Legendre-Transformation gelangt man von ihr zur Gibbs'schen freien Energie  $G(M)$ :

$$\begin{aligned} dF(H) &= \frac{\partial F}{\partial H} dH = -MdH = -d(MH) + HdM \\ \Rightarrow \underbrace{d(F + MH)}_{dG(M)} &= HdM \end{aligned}$$

Die analoge Legendre-Transformation des Funktionals  $W[J]$  liefert die effektive Wirkung  $\Gamma[\phi_C]$ :

$$\begin{aligned} \delta W[J] &= \int d^D x \frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} \delta J(x) = \int d^D x \phi_C(x) \delta J(x) \\ &= \int d^D x \delta(\phi_C(x) J(x)) - \int d^D x J(x) \delta \phi_C(x) \\ \Rightarrow \underbrace{\delta(W[J] - \int d^D x \phi_C(x) J(x))}_{\delta \Gamma[\phi_C]} &= - \int d^D x J(x) \delta \phi_C(x). \end{aligned} \quad (1.11)$$

Im Folgenden soll die physikalische Bedeutung der effektiven Wirkung  $\Gamma[\phi_C]$  herausgestellt werden. Aus Gl. (1.11) folgt

$$\frac{\delta \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(x)} = -J(x). \quad (1.12)$$

Die Abwesenheit äußerer Quellen entspricht damit laut (1.10) dem Fall  $\phi_C = \bar{\phi}$ . An dieser Stelle gilt

$$\left. \frac{\delta \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(x)} \right|_{\phi_C = \bar{\phi}} = 0. \quad (1.13)$$

Diese Gleichung versteht sich als Analogon der klassischen Euler-Lagrange-Gleichung

$$\left. \frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x)} \right|_{\phi = \phi_{\text{real}}} = 0,$$

wobei  $\phi_{\text{real}}$  für das realisierte Feld steht, und liefert so eine Feldgleichung für den VEW  $\bar{\phi}(x)$ . Äquivalent dazu lässt sich (1.13) als Extremalbedingung an das thermodynamische Potenzial  $\Gamma$ , also an die Gibbs'sche freie Energie, lesen. Diese ist bekanntlich im Gleichgewicht extremal. Für die vorliegende Arbeit ist diese Beziehung von zentraler Bedeutung, da die Feldgleichung für das Grenzflächenprofil später auf diesem Wege hergeleitet wird.



**Abb. 5:** Der linke Graph ist 1PI. Im Gegensatz dazu kann man den rechten Graphen splitten, indem man die mittlere Linie entfernt. Deshalb ist er *one particle reducible* (1PR).

Wegen Gl. (1.11) gilt

$$\begin{aligned}
 -\delta(x - y) &= \frac{\delta}{\delta J(y)} \frac{\delta \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(x)} \quad \Bigg| \quad \text{Kettenregel: } \frac{\delta}{\delta J(x)} F[\phi] = \int d^D w \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(w)} \frac{\delta \phi(w)}{\delta J(x)} \\
 &= \int d^D w \frac{\delta \phi_C(w)}{\delta J(y)} \frac{\delta^2 \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(w) \delta \phi_C(x)} \quad \Bigg| \quad \text{Gl. (1.9)} \\
 &= \int d^D w \frac{\delta^2 W}{\delta J(y) \delta J(w)} \frac{\delta^2 \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(w) \delta \phi_C(x)} \\
 &= \left( \frac{\delta^2 W}{\delta J \delta J} \right)_{yw} \left( \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \phi_C \delta \phi_C} \right)_{wx}.
 \end{aligned}$$

Die letzte Zeile der Umformung versteht sich als symbolische Matrixmultiplikation. Es gilt also

$$\left( \frac{\delta^2 W}{\delta J \delta J} \right) = - \left( \frac{\delta^2 \Gamma}{\delta \phi_C \delta \phi_C} \right)^{-1}. \quad (1.14)$$

Wie bereits (siehe Gl. (1.8)) erwähnt wurde, ist  $W[J]$  das erzeugende Funktional der verbundenen Greensfunktionen bzw. der Kumulantengraphen. Insbesondere gilt

$$\frac{\delta^2 W[J]}{\delta J(x) \delta J(y)} = K_2(x, y),$$

womit wegen Gl. (1.14)

$$\frac{\delta^2 \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(x) \delta \phi_C(y)} = -K_2^{-1}(x, y) \quad (1.15)$$

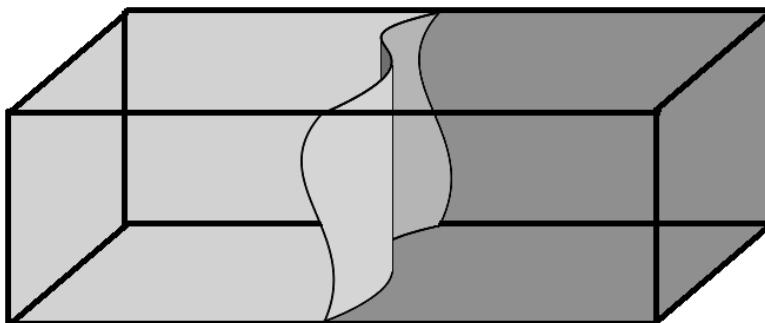
folgt. Die zweite Funktionalableitung der effektiven Wirkung  $\Gamma$  nach dem klassischen Feld  $\phi_C$  entspricht also der inversen Kumlante.

Für die höheren Ableitungen lässt sich allgemein beweisen, dass  $\Gamma[\phi_C]$  das erzeugende Funktional der  $n$ -Punkt 1PI (*one particle irreducible*) Korrelatoren darstellt ([AL64]). Damit sind diejenigen  $n$ -Punkt-Graphen gemeint, die sich nicht durch Entfernen einer Linie in zwei Graphen aufsplitten lassen, die beide mit äußeren Linien verbunden sind (siehe Abb. 5). Es gilt also

$$\frac{\delta^n \Gamma[\phi_C]}{\delta \phi_C(x_1) \dots \delta \phi_C(x_n)} = \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle_{1PI}.$$

## 2 Kapillarwellen

Die Theorie der Kapillarwellen beschäftigt sich mit Fluktuationen einer Grenzfläche zwischen zwei Komponenten eines Fluidsystems. Die beiden Fluide betrachtet man dabei als hydrodynamische Kontinua und lässt mikroskopische Vorgänge außer acht. Die Skalen, auf denen eine solche Betrachtungsweise angemessen ist, sind weit größer als die intrinsische Grenzflächendicke von der Größenordnung einer Korrelationslänge. Deshalb betrachtet man die Grenzfläche in diesem Rahmen nicht als kontinuierlichen Übergang eines Ordnungsparameterfeldes, sondern als scharf lokalisiert, d.h. als Fläche im mathematischen Sinne. Zur Veranschaulichung stelle man sich eine (unendlich) dünne Membran zwischen den beiden Komponenten des Systems vor, wie in Abb. 6 dargestellt. Im Gleichgewichtszustand ist diese völlig plan und thermische Fluktuationen treten als Deformation der Grenzfläche in Erscheinung. Diese statistische Verformung, also die Abweichung von der im Gleichgewicht glatten Gestalt, bezeichnet man als *Rauhigkeit* ([Ma13]). Jede Deformation der Grenzfläche erfordert den Einsatz einer gewissen Arbeit gegen die Oberflächenspannung  $\sigma$  und ein eventuell vorhandenes äußeres Feld, wie zum Beispiel das Gravitationsfeld. Wird die Grenzfläche an einer Stelle aus ihrer Ruhelage ausgelenkt, so breitet sich diese Störung in Form von Wellen über die Fläche aus. In der Hydrodynamik unterscheidet man Kapillar- und Schwerewellen, je nachdem ob ihre Dynamik von der Oberflächenspannung oder von einem äußeren Feld dominiert wird. Hier gebrauche ich den Begriff Kapillarwellen aber allgemein für langwellige Fluktuationen, also solche, die sich als Deformationen einer Membran beschreiben lassen.



**Abb. 6:** Die Grenzfläche als dünne Membran (*drum-head*) zwischen den beiden Komponenten des Fluidsystems, „eingespannt“ durch periodische Randbedingungen.

## 2.1 Rauhigkeit und Einfluss der Systemgröße

Unter Vernachlässigung von Überhängen und Volumenfluktuationen (Blasen) stelle man sich die fluktuiierende Grenzfläche nun als Höhenkarte  $h(x_1, x_2)$  vor, also als Abbildung jedes Punktes  $\vec{x} = (x_1, x_2)$  der planen Gleichgewichtsgrenzfläche auf eine Auslenkung in  $z$ -Richtung. Nach einer Fouriertransformation lässt sich eine Fluktuation wie folgt schreiben:

$$h(\vec{x}) = \int d^D k e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} h(\vec{k}).$$

Bei der Betrachtung eines Systems mit endlicher Ausdehnung in  $x_1$ - und  $x_2$ -Richtung erhält man aufgrund der periodischen Randbedingungen anstelle des Integrals eine Summe und schreibt

$$h(\vec{x}) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} e^{i\frac{2\pi}{L} \vec{n} \cdot \vec{x}} h(\vec{n}). \quad (2.1)$$

Die mit der Deformation  $h(\vec{x})$  verbundene Arbeit gegen die Oberflächenspannung hängt von der Zunahme der Oberfläche gegenüber dem idealen Gleichgewichtsfall, also der planen Fläche, ab. Diese beträgt

$$\Delta A = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_2}\right)^2}.$$

In Anwesenheit eines Schwerefeldes beträgt die Arbeit gegen dieses

$$w_g = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \int_0^{h(\vec{x})} dz (\Delta\rho) g z,$$

so dass sich die gesamte Arbeit als

$$w = \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 \left[ \int_0^{h(\vec{x})} dz (\Delta\rho) g z + \sigma \sqrt{1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_2}\right)^2} \right]$$

schreiben lässt. Entwickelt man die Wurzel im zweiten Summanden dieser Gleichung in Potenzen von  $\partial_{x_1}^2 h$  und  $\partial_{x_2}^2 h$  bis zur ersten Ordnung und setzt (2.1) in diese Gleichung ein, so gewinnt man unter Ausnutzung von

$$\int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 e^{i\frac{2\pi}{L} (\vec{n} + \vec{m}) \cdot \vec{x}} = L^2 \delta_{\vec{n}, -\vec{m}}$$

den Ausdruck

$$w = \sigma A \left\{ 1 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} h(\vec{n}) h(-\vec{n}) \left[ \frac{(\Delta\rho)g}{\sigma} + \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 \right] \right\}, \quad (2.2)$$

wobei  $A = L^2$  den Inhalt der planen Fläche bezeichnet. Die Wahrscheinlichkeit einer Amplitude  $h(\vec{n})$  ist dann durch den entsprechenden Boltzmann-Faktor  $\exp(-\beta w)$  gegeben. Als Maß

für die Rauigkeit der Oberfläche verwendet man deren mittlere quadratische Fluktuation, die man in der Form

$$\langle h^2 \rangle = \frac{1}{\beta\sigma A} \sum_{\vec{n}, n_i > 0} \left[ \frac{(\Delta\rho)g}{\sigma} + \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 \right]^{-1} \quad (2.3)$$

erhält. Die Summe über die Wellen lässt sich noch eingrenzen. Die minimale Wellenzahl ist aufgrund der periodischen Randbedingungen  $k_{\min} = 2\pi/L$ . Des Weiteren muss eine obere Grenze  $k_{\max} = 2\pi/l$  festgelegt werden, wobei  $l$  typischerweise in der Größenordnung der intrinsischen Grenzflächendicke gewählt wird. Mit Berücksichtigung kleinerer Längen  $l$  würde man den Gültigkeitsbereich der Theorie verlassen, in welcher die Grenzfläche als Membran angesehen wird. Den genauen Wert von  $l$  gibt die Theorie jedoch nicht an, so dass seine Wahl immer mit einer gewissen Willkür verbunden ist. Für die in diesem Abschnitt dargestellten Zusammenhänge ist dies aber unerheblich. Für hinreichend große  $L$  geht (2.3) in den Ausdruck

$$\langle h^2 \rangle \approx \frac{1}{4\pi\beta\sigma} \ln \left[ \frac{1 + 4 \frac{(\Delta\rho)\pi^2\sigma}{l^2 g}}{1 + 4 \frac{(\Delta\rho)\pi^2\sigma}{L^2 g}} \right]. \quad (2.4)$$

über.

Die charakteristische Eigenschaft dieses Ausdruckes ist seine Divergenz für  $L \rightarrow \infty$  bei verschwindendem  $g$ . Diese lässt sich auf zwei Wegen herauszustellen. Zum einen kann man (2.4) mit  $g$  erweitern und dann den Grenzfall  $g \rightarrow 0$  betrachten:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \langle h^2 \rangle \approx \lim_{g \rightarrow 0} \frac{1}{4\pi\beta\sigma} \ln \left[ \frac{g + 4 \frac{(\Delta\rho)\pi^2\sigma}{l^2}}{g + 4 \frac{(\Delta\rho)\pi^2\sigma}{L^2}} \right] = \frac{1}{2\pi\beta\sigma} \ln \left( \frac{L}{l} \right). \quad (2.5)$$

$\langle h^2 \rangle$  divergiert in diesem Fall also logarithmisch mit  $L$ .

Andererseits kann man, wieder von (2.4) ausgehend den Limes  $L \rightarrow \infty$  bilden, wobei man

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \langle h^2 \rangle = \frac{1}{4\pi\beta\sigma} \ln \left( 1 + 4 \frac{(\Delta\rho)\pi^2\sigma}{l^2 g} \right) \quad (2.6)$$

erhält. Dieser Ausdruck wiederum divergiert bei Verschwinden des äußeren Feldes.

Das asymptotische Verhalten der Grenzflächendicke lässt sich für die beiden betrachteten Fälle also wie folgt zusammenfassen:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \langle h^2 \rangle \approx \frac{1}{2\pi\beta\sigma} \ln(L) \text{ für } L \gg l \quad (2.7)$$

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \langle h^2 \rangle \approx -\frac{1}{4\pi\beta\sigma} \ln(g) \text{ für } g \ll \frac{(\Delta\rho)l^2}{4\pi^2\sigma}. \quad (2.8)$$

Daraus folgt, dass die Grenzfläche entweder durch ein äußeres Feld, ein sogenanntes „pinning field“, oder durch Finite-Size-Effekte stabilisiert werden muss.

## Dimensionsbetrachtung

Die im letzten Abschnitt beschriebene Divergenz von  $\langle h^2 \rangle$  steht in direktem Zusammenhang mit der Dimensionalität des betrachteten Systems. Um diese Beziehung näher zu beleuchten, gehe ich vom dreidimensionalen Fall zum  $D$ -dimensionalen Problem über. Im Gegensatz zur Rechnung im letzten Abschnitt betrachte ich direkt den thermodynamischen Limes  $L \rightarrow \infty$  und erhalte so anstelle von (2.3) den Ausdruck

$$\langle h^2 \rangle = \int \frac{d^{D-1}k}{(2\pi)^{D-1}} \frac{1}{Qk^2 + R}$$

mit  $R = (\Delta\rho)g$  und  $Q = \sigma A$ . Das Integral wird nach oben hin durch einen *Cut-Off*  $\Lambda = 2\pi l^{-1}$  begrenzt. Dies geschieht genau wie im letzten Abschnitt, um mit der Vorstellung einer unendlich dünnen Grenzfläche konsistent zu bleiben. Man findet so

$$\langle h^2 \rangle \sim \int_0^\Lambda dk \frac{k^{D-2}}{Qk^2 + R}.$$

Neben der bereits erwähnten logarithmischen Divergenz für  $D = 3$  findet man für  $D < 3$  Potenzgesetze vor. Interessanter ist hier aber der höherdimensionale Fall: Das Integral konvergiert für  $D > 3$ . Offenbar gibt es also in mehr als drei Dimensionen kein Roughening-Problem.

## 2.2 Die Faltungsnäherung

Die in diesem Kapitel vorgestellte Kapillarwellentheorie hat nicht nur die angenehme Eigenschaft sehr anschaulich zu sein, sondern befindet sich auch in guter Übereinstimmung mit Experimenten und numerischen Simulationen ([Mü04]). Vom Ansatz her ist sie aber, wie zu Eingang des Kapitels bemerkt, vom feldtheoretischen Zugang, der die Grenzfläche mittels eines stetigen Ordnungsparameterfeldes beschreibt, grundverschieden.

Einen zwar rein heuristischen, aber durchaus erfolgreichen, Ansatz die Idee einer schwingenden Grenzfläche mit den Ergebnissen der Feldtheorie zu kombinieren, stellt die Faltungsnäherung ([Ja84]) dar. Grundlage dieser Näherung ist die Vorstellung, die kapillarwellenartigen Fluktuationen von den *intrinsischen* Fluktuationen trennen zu können. Letztere berücksichtigt man im Rahmen der Feldtheorie und ermittelt so ein intrinsisches Profil  $\bar{\phi}_{\text{int}}$ , während man die Kapillarwellen getrennt davon als Fluktuationen der Schwerpunkt- oder Gibbs-Grenzfläche  $h(\vec{x})$ ,  $\vec{x} \in \mathbb{R}^{D-1}$ , also der in Abb. 6 gezeigten Membran, ansieht. Eine Momentaufnahme des resultierenden Profils hat dann die Gestalt

$$\phi(x) = \bar{\phi}_{\text{int}}(z - h(\vec{x})).$$

Eine scharfe Grenzfläche, wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, entspricht dem Grenzfall eines stufenförmigen intrinsischen Profils  $\phi_{\text{int}}(z) = \Theta(z)$  mit der Heaviside'schen Stufenfunktion  $\Theta(z)$ . Vorausgesetzt, Feld- und Kapillarwellentheorie seien beide gültig und miteinander vereinbar, müsste nun jede solche Fluktuation mit einer Wahrscheinlichkeit entsprechend der

Boltzmann-Gewichtung der Grenzflächenenergie (2.2) von  $h(\vec{x})$  in die Zustandssumme eingehen. Letzten Endes hat das Profil also die Form

$$\begin{aligned}
 \bar{\phi}(x) &= \langle \bar{\phi}_{\text{int}}(z - h(\vec{x})) \rangle_h \\
 &= \int \mathcal{D}h \bar{\phi}_{\text{int}}(z - h(\vec{x})) \rho[h] \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dh \bar{\phi}_{\text{int}}(z - h) \underbrace{e^{-\beta C \langle h^2 \rangle}}_{=: P(h)} \\
 &= \bar{\phi}_{\text{int}}(z) * P(z)
 \end{aligned}$$

und entspricht damit einer Faltung des intrinsischen Profils mit dem statistischen Gewicht der langwelligen Grenzflächenschwingungen. Im Rahmen der Faltungsnäherung erhält man das Quadrat der Grenzflächendicke als Summe der Dicke des intrinsischen Anteils und des Kapillarwellenbeitrages, also

$$w^2 = w_{\text{intr}}^2 + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \left( \frac{L}{l} \right), \quad (2.9)$$

wobei wie in Abschnitt 2.1 die Oberflächenspannung mit  $\sigma$  und der Kapillarwellen-Cut-Off mit  $l$  bezeichnet wird.



# 3 Das System mit Grenzfläche

Untersucht werden sollen Grenzflächen in Landau-Ginzburg-Systemen, also solchen, die durch die Hamiltondichte (1.3) beschrieben werden. In Kapitel 1 wurde das Landau-Ginzburg-Modell als Theorie zur Beschreibung kritischer Phänomene ganz allgemein eingeführt. In den beiden Abschnitten dieses Kapitels soll nun konkret das betrachtete Modellsystem vorgestellt werden.

## 3.1 Randbedingungen für Grenzflächenlösungen

Untersucht werden soll das Roughening von Grenzflächen. Dementsprechend muss ein System modelliert werden, welches

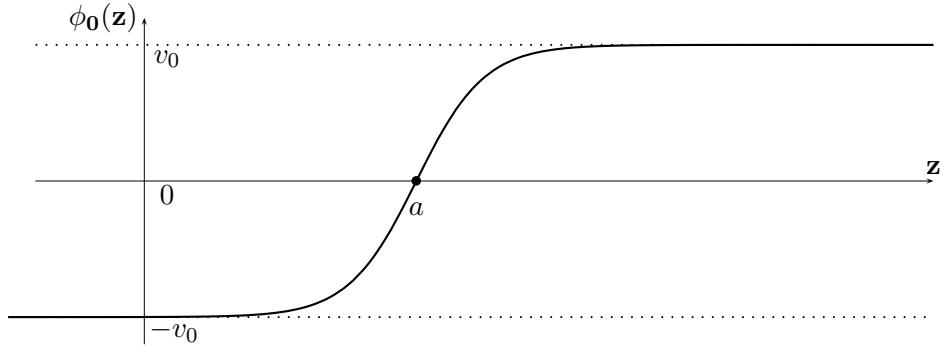
1. mindestens eine Grenzfläche aufweist und
2. in der Grenzflächenebene endlich ist, damit die in Kapitel 2 beschriebene logarithmische Systemgrößenabhängigkeit untersucht werden kann.

Eine Grenzfläche kann nur in der gebrochenen Phase eines Landau-Ginzburg-Systems vorliegen, bei Vorhandensein zweier Potenzialminima bei  $\phi = \pm v_0$ . Das System muss sich also in dieser Phase befinden. Es habe zudem folgende der Fragestellung genügende Geometrie: In einer Richtung sei es unendlich ausgedehnt, während es in den dazu senkrechten Richtungen, auf ein Quadrat mit der Kantenlänge  $L$  beschränkt sei. Zur deutlichen Abgrenzung wähle ich die folgende Notation: die Richtung unendlicher Ausdehnung nenne ich die  $z$ -Richtung, während ich die dazu senkrechten Richtungen mit  $x_1$  und  $x_2$  bezeichne. Beziehe ich mich nur auf die  $x_1$ - $x_2$ -Ebene, so schreibe ich  $\vec{x} = (x_1, x_2)$ . Einen beliebigen Punkt des betrachteten Systems schreibe ich entsprechend als  $x = (x_1, x_2, z) = (\vec{x}, z)$  mit  $\vec{x} \in [0, L]^2$ ,  $z \in \mathbb{R}$ .

Es fehlen nun noch geeignete Randbedingungen. Auch wenn die in  $x_1$ - $x_2$ -Richtung endliche Ausdehnung des Systems für die vorliegende Fragestellung von zentraler Bedeutung ist, sollen keine Oberflächeneffekte des  $L \times L \times \infty$ -Quaders berücksichtigt werden. Dementsprechend empfiehlt sich die Verwendung periodischer Randbedingungen  $\phi(x_1 + L, x_2, z) = \phi(x_1, x_2 + L, z) = \phi(x_1, x_2, z)$ . Um die Existenz einer Grenzfläche zu erzwingen, wählt man zudem in  $z$ -Richtung die Randbedingungen

$$\phi(x) = \begin{cases} v_0, & z \rightarrow +\infty \\ -v_0, & z \rightarrow -\infty \end{cases}. \quad (3.1)$$

Diese zu erfüllen erfordert die Ausbildung mindestens eines stetigen Überganges von  $\phi_0 = -v_0$  nach  $\phi_0 = v_0$ . Ein solcher Übergang ist das, was hier im Sinne von Abb. 2 als Grenzfläche



**Abb. 7:** Die klassische Kink-Lösung beschreibt das Mean-Field-Profil.

bezeichnet wird. Natürlich können die Randbedingungen (3.1) im Allgemeinen durch Ausbildung jeder ungeraden Anzahl von Grenzflächen erfüllt werden. Da aber jede solche Fläche mit einem Bereich verbunden ist, in dem das Profil deutlich außerhalb der Potenzialminima verläuft - es muss schließlich bei jedem Übergang die Potenzialbarriere (1.4) zwischen den Minima überwinden - werden die energetisch günstigsten Zustände, welche die Statistik wegen ihres Boltzmann-Gewichtes dominieren, jeweils nur eine einzige Grenzfläche aufweisen.

Nachdem durch die Konstruktion eines geeigneten Systems der Rahmen für die weiteren Untersuchungen gesteckt ist, geht es im Folgenden um die Details des Grenzflächenverlaufes. Erste Aussagen dazu lassen sich mit Hilfe der Landau-Näherung machen.

## 3.2 Das Grenzflächenprofil in Landau-Approximation

Im Rahmen der Landau-Approximation wird das System den Zustand maximaler Wahrscheinlichkeit annehmen. Gesucht ist also ein Feld  $\phi_0$ , welches die geforderten Randbedingungen erfüllt und dessen Energie minimal ist. Damit erhält man für  $\phi_0$  folgende Bestimmungsgleichung:

$$\frac{\delta H[\phi_0]}{\delta \phi_0(x)} = (-\nabla^2 + \mu^2) \phi_0(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^3(x) = 0.$$

Mit der Hamiltondichte des Landau-Ginzburg-Modells in der gebrochenen Phase entspricht dies der Gleichung

$$-\nabla^2 \phi_0(x) - \frac{m_0^2}{2} \phi_0(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^3(x) = 0. \quad (3.2)$$

Eine mit den Randbedingungen (3.1) verträgliche Lösungsmenge entspricht dem bekannten Cahn-Hilliard-Profil ([CH57]) und lautet

$$\phi_0^{(a)}(z) = v_0 \tanh \left[ \frac{m_0}{2}(z - a) \right], \quad (3.3)$$

wobei  $a \in \mathbb{R}$  den Schnittpunkt des Grenzflächenprofils mit der  $z$ -Achse angibt und beliebig gewählt werden kann. Es bezeichne im Folgenden  $\phi_0$  ohne einen Index  $(a)$  die Lösung mit  $a = 0$ , also  $\phi_0 := \phi_0^{(0)}$ .

Eine Lösung der Form (3.3) bezeichnet man als *Kink*. Sie hat die in Abbildung 7 gezeigte Gestalt. Es sei noch erwähnt, dass bei umgekehrter Wahl der Randbedingungen, also  $\phi_0(z \rightarrow \pm\infty) = \mp v_0$ , die Lösung  $\phi_0(z) = -v_0 \tanh(mz/2)$  gefunden wird. Diese wird als *Anti-Kink* bezeichnet. Auch wenn ich mich im Folgenden auf die Betrachtung der Kink-Lösung konzentriere, lassen sich alle Resultate natürlich auf die Anti-Kink-Lösung übertragen.

Um zu bestimmen, wieviel ein solcher Kink-Übergang das System energetisch kostet, berechne ich den Hamiltonian  $H[\phi_0^{(a)}]$ . Da sich die  $z$ -Integration der Hamiltondichte über ganz  $\mathbb{R}$  erstreckt, lässt sich der Parameter  $a$  dabei durch eine einfache Substitution eliminieren. Es gilt deshalb  $H[\phi_0^{(a)}] = H[\phi_0]$  unabhängig von der Position des Kinks. Auf diese Translationsinvarianz der Grenzfläche, die direkt mit der Symmetrie des Modellsystems zusammenhängt, werde ich Kapitel 4 ausführlicher zurückkommen. Die Energie eines Kinks berechne ich zu

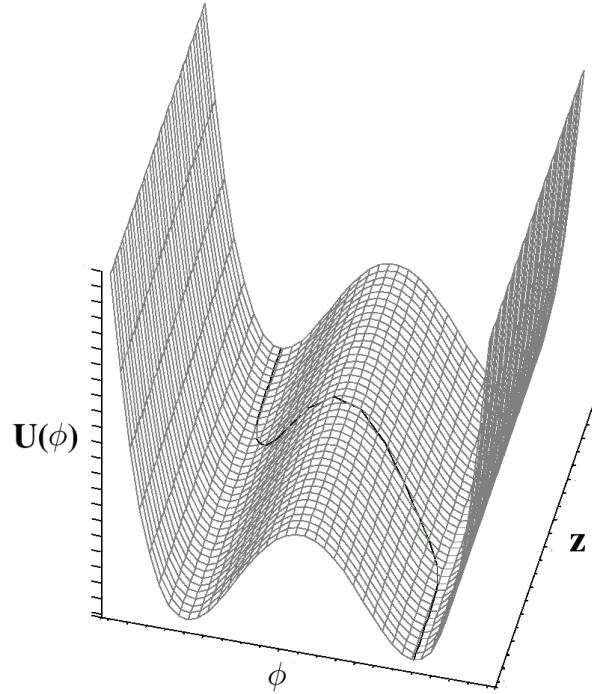
$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi_0)^2 - \frac{m_0^2}{4} \phi_0^2 + \frac{g_0}{4!} \phi_0^4 + \frac{3m_0^4}{8g_0} \right\} \\ &= \int d^D x \left\{ \phi_0 (-\nabla^2) \phi_0 - \frac{1}{2} \phi_0 \underbrace{\left( \frac{m_0^2}{2} \phi_0 - \frac{g_0}{3!} \phi_0^3 \right)}_{= -\nabla^2 \phi_0, \text{ siehe (3.2)}} - \frac{g_0}{4!} \phi_0^4 + \frac{3m_0^4}{8g_0} \right\} \\ &= -L^{D-1} \frac{3m_0^4}{8g_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left\{ \tanh^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) - 1 \right\} \\ &= -L^{D-1} \frac{3m_0^4}{8g_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( 1 - 1 - 2 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \right). \end{aligned}$$

Das Integral im letzten Summanden ergibt

$$\begin{aligned} &- L^{D-1} \frac{3m_0^4}{8g_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \\ &\left| \begin{array}{l} \text{Subst. : } z \rightarrow \tilde{z} = \frac{m_0}{2} z \\ \hline \end{array} \right. \\ &= -L^{D-1} \frac{3m_0^3}{4g_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z} \operatorname{sech}^4(\tilde{z}) \\ &= -L^{D-1} \frac{3m_0^3}{4g_0} \left( \underbrace{\left[ \frac{1}{3} \tanh(\tilde{z}) \operatorname{sech}^2(\tilde{z}) \right]_{-\infty}^{\infty}}_{= 0} + \frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z} \operatorname{sech}^2(\tilde{z}) \right). \end{aligned} \tag{3.4}$$

Damit bleibt also insgesamt

$$\begin{aligned} H[\phi_0] &= L^{D-1} \frac{3m_0^3}{4g_0} \frac{4}{3} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z} \operatorname{sech}^2(\tilde{z}) \\ &= L^{D-1} \frac{m_0^3}{g_0} \tanh(\tilde{z}) \Big|_{-\infty}^{\infty} \\ &= L^{D-1} \frac{2m_0^3}{g_0}. \end{aligned} \tag{3.5}$$



**Abb. 8:** Die Kink-Lösung in der Potenziallandschaft

Obwohl ein Kink demnach energetisch höher liegt als die konstanten Lösungen  $\phi_0 = \pm v_0$ , ist er dennoch stabil, da ein unendlich langer Teil des Profils von einem Minimum über die Potenzialbarriere auf die andere Seite „gehoben“ werden müsste, um ihn in eine der beiden energetisch günstigeren Lösungen zu überführen. Kein endlicher Energieaufwand kann dies leisten. Man kann auch sagen, dass die Lösungen von Gl. (3.2) unter der Bedingung  $H[\phi] < \infty$  in vier Homotopie-Klassen zerfallen, die verschiedenen Randbedingungen genügen:  $\phi(z) = \pm v_0$  sowie Kink- und Anti-Kink-Lösungen ([Hi78]).

Die Rauhigkeit der Grenzfläche wird, wie in Kapitel 2 beschrieben, durch Kapillarwellen, also Fluktuationen verursacht. Diese werden natürlich nicht durch eine Mean-Field-Näherung beschrieben. Die Berücksichtigung thermischer Fluktuationen erfolgt deshalb in den nächsten Kapiteln mittels einer Störungsrechnung.

## 4 Die Feldgleichung für das Grenzflächenprofil

Ziel dieses Kapitels ist es, eine Feldgleichung für das Grenzflächenprofil  $\bar{\phi} = \langle \phi \rangle$  herzuleiten, in der thermische Fluktuationen berücksichtigt werden. Dieses gelingt im Rahmen einer Störungsrechnung, wobei thermische Fluktuationen als Störungen der Mean-Field-Theorie angesehen werden. Entwickelt wird deshalb in Potenzen von  $\beta^{-1} = k_B T$ . Das erzeugende Funktional der  $\phi^4$ -Theorie lässt sich in der Form

$$Z[J] = \frac{1}{Z_0} \exp \left\{ - \int d^D x \beta \mathcal{H}_I \left( \beta^{-1} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ - \frac{1}{2} (\phi, \beta G_0^{-1} \phi) + \beta(J, \phi) \right\}.$$

schreiben. In diesem Ausdruck verwende ich die abkürzende Schreibweise

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

im Sinne eines Skalarproduktes zweier Felder, die i. Allg. komplexwertig sind.

Wie später explizit gezeigt wird, lässt sich der freie Anteil des Funktionalintegrals ausführen. Nach einer Skalierung des Quellfeldes  $J \rightarrow \beta J$  erhält man

$$Z[J] = \frac{1}{Z_0} \exp \left\{ - \int d^D x \beta \mathcal{H}_I \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \exp \left\{ \frac{1}{2} (J, \beta^{-1} G_0 J) \right\}. \quad (4.1)$$

Wegen der Skalierung des Quellfeldes geht die Vorschrift zur Berechnung der Korrelationsfunktionen (1.6) über in

$$\langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle = \frac{\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(x_n)} Z[J] \Big|_{J=0}.$$

Eine Taylor-Entwicklung des exponenzierten Wechselwirkungshamiltonians führt auf eine Reihe, deren einzelne Glieder sich durch Feynman-Graphen beschreiben lassen. Jeder Vertex wird dabei entsprechend Gl. (4.1) mit  $\beta$  und jeder Propagator mit  $\beta^{-1}$  multipliziert.

Die Zahl der Impulsintegrationen oder *Loops* hängt nur von der Zahl der Vertizes und der internen Linien, also der Propagatoren, die zwei Vertizes miteinander verbinden, ab. Ein Graph mit  $I$  internen Linien und  $n$  Vertizes hat  $L = I - (n - 1)$  Loops. Ist  $E$  die Zahl der externen Linien, so hat der Graph insgesamt die Ordnung  $\beta^{-(I-n+E)} = \beta^{-(L+1-E)}$ . Damit ist eine Entwicklung von  $\langle \phi \rangle$  bis zu einer bestimmten Ordnung von  $\beta^{-1}$  eine Entwicklung bis zu einer bestimmten Anzahl von Loops. Für das Grenzflächenprofil  $\langle \phi \rangle$  ist insbesondere  $E = 1$  und die auftretenden Graphen haben die Ordnung  $\beta^{-L}$ .

Die Berechnung des Grenzflächenprofils verläuft nun wie folgt: Zuerst wird das Hamiltonfunktional um die klassische Kink-Lösung (3.3) entwickelt. Ein allgemeines Feld  $\phi$  wird dabei in seinen klassischen Anteil und eine Fluktuationskorrektur  $\varphi$  zerlegt, so dass  $\phi = \phi_0 + \varphi$  gilt. Daraus resultiert eine Feldtheorie für die Fluktuation  $\varphi$ , deren Vakuumerwartungswert  $\langle \varphi \rangle$  i. Allg. von Null verschieden ist. Das Profil der Grenzfläche ist dann gegeben durch

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

Die thermischen Fluktuationen werden dann bis zur 1-Loop-Ordnung, also bis zur Ordnung  $\beta^{-1}$ , berechnet. Dazu ist ein Tadpole-Graph auszuwerten. Es erweist sich jedoch als einfacher, wie in den Abschnitten 4.2 und 4.3 durchgeführt, stattdessen aus der effektiven Wirkung  $\Gamma[\phi_C]$  anhand von Gl. (1.13) eine Differenzialgleichung für  $\bar{\phi}$  herzuleiten und diese zu lösen. Beide Wege sind äquivalent, wie am Ende von Abschnitt 4.3 gezeigt wird.

## 4.1 Störungsrechnung

### 4.1.1 Die Sattelpunkte des Hamiltonian

In Abschnitt 3.2 wurde im Rahmen der Landau-Näherung die Invarianz des Systems gegenüber Translationen der Grenzfläche in  $z$ -Richtung festgestellt. Für die Lösungen der Feldgleichungen resultiert daraus ein Freiheitsgrad, was sich in der Freiheit der Wahl des Parameters  $a$  in Gl. (3.3) wiederholt. Statt um Minima handelt es sich bei den gefundenen Lösungen der Extremalbedingung (3.2) also um ein Kontinuum entarteter Sattelpunkte. Um ein Bild von Rajamaran ([Ra75]) zu gebrauchen:  $U[\phi]$  weist ein „Tal“ lokaler Minima auf und die  $\phi_0^{(a)}$  bilden den „Talboden“. Die korrekte Behandlung des Problems im Rahmen einer Störungsrechnung um eine Kink-Lösung erfordert die Verwendung einer *kollektiven Koordinate* nach [GS75]. In diesem Fall handelt es sich bei der kollektiven Koordinate um den Parameter  $a$  der Translation in  $z$ -Richtung. Ohne dieses Hilfsmittel trifft man, wie weiter unten in Abschnitt 4.1.2 gezeigt wird, auf ein divergentes Integral. Berechnungen mit der Methode der kollektiven Koordinaten wurden zu dem hier betrachteten System in [Mü89] und [Ho97] durchgeführt. Bevor das Problem aber in Abschnitt 4.1.2 explizit behandelt wird, soll es in diesem Abschnitt zunächst eingehender beschrieben werden.

Den Ausgangspunkt der Betrachtung bildet die Zustandssumme für die gebrochene Phase

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\beta \int d^D x \left[ \frac{1}{2} (\nabla \phi(x))^2 - \frac{m_0^2}{4} \phi^2(x) + \frac{g_0}{4!} \phi^4(x) + \frac{3m_0^4}{8g_0} \right] \right\}.$$

Dabei wird über alle Konfigurationen integriert, die mit den Randbedingungen (siehe Abschnitt 3.1) verträglich sind. Für einen Sattelpunkt  $\phi_0(x)$  wird das Funktional  $H[\phi]$  extremal und erfüllt die Gleichung

$$\frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(x)} \bigg|_{\phi=\phi_0} = \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) \phi_0(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^3(x) = 0, \quad (4.2)$$

deren Lösung (3.3) zu den betrachteten Randbedingungen in Form der Felder  $\phi_0^{(a)}$  bereits aus Abschnitt 3.2 bekannt ist. Im Folgenden möchte ich explizit zeigen, dass, wie oben angedeutet, eine kontinuierliche Entartung der Sattelpunkte  $\phi_0^{(a)}(x)$  vorliegt.

Dazu betrachte ich zuerst ein beliebiges Extremum  $\phi_E$  des Funktionalen  $H[\phi]$  und variiere  $\phi_E \rightarrow \phi'_E = \phi_E + \delta\phi_E$  wobei ich Verträglichkeit von  $\phi'_E$  mit der Extremalbedingung fordere:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\delta H[\phi]}{\delta\phi} \Big|_{\phi'_E} = 0 \\
 \Leftrightarrow & -\nabla^2\phi'_E - \frac{m_0^2}{2}\phi'_E + \frac{g_0}{3!}\phi'^3_E = 0 \\
 \Leftrightarrow & -\nabla^2(\phi_E + \delta\phi_E) - \frac{m_0^2}{2}(\phi_E + \delta\phi_E) + \frac{g_0}{3!}(\phi_E + \delta\phi_E)^3 = 0 \\
 \Leftrightarrow & \underbrace{-\nabla^2\phi_E - \frac{m_0^2}{2}\phi_E + \frac{g_0}{3!}\phi^3_E}_{= 0, \text{ siehe Gl. (4.2)}} - \nabla^2\delta\phi_E - \frac{m_0^2}{2}\delta\phi_E + \frac{g_0}{3!}(3\phi_E(\delta\phi_E)^2 + 3\phi_E^2\delta\phi_E + (\delta\phi_E)^3) = 0.
 \end{aligned}$$

Für eine infinitesimale Verschiebung des Extremums gilt damit ganz allgemein in erster Ordnung

$$\begin{aligned}
 & \left[ -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_E^2 \right] \delta\phi_E = 0 \\
 \Leftrightarrow & \mathbb{K}(\phi_E) \delta\phi_E = 0.
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Dabei ist der sogenannte Fluktuationsoperator  $\mathbb{K}$  definiert durch

$$\mathbb{K}(\phi) = -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi^2,$$

bzw. seinen Kern

$$\begin{aligned}
 \mathbb{K}_{xy}(\phi) &= \left[ \nabla_x \nabla_y - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi^2(x) \right] \delta^D(x-y) \\
 &= \left[ -\nabla_x^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi^2(x) \right] \delta^D(x-y).
 \end{aligned}$$

Jede Nullmodenlösung des Eigenwertproblems (4.3) steht demnach für eine infinitesimale Verrückung der Lösung  $\phi_E$ , die auf einen neuen Sattelpunkt führt, also für eine kontinuierliche Symmetrie der Lösungen der klassischen Feldgleichung. Dieser Zusammenhang gilt allgemein, unabhängig von  $H[\phi]$  und den genauen Randbedingungen. Nun betrachte ich aber speziell den Fall  $\phi_E = \phi_0$ , also die infinitesimale Verrückung der Kink-Lösung. Das Spektrum von  $\mathbb{K}(\phi_0)$  wird Gegenstand von Abschnitt 4.4 sein. Hier sei aber bereits gesagt, dass  $\mathbb{K}(\phi_0)$  genau eine Nullmode  $\Psi_{0\xi_0}(z) \sim \text{sech}^2(m_0 z/2)$  aufweist. Die infinitesimale Variation der Lösung  $\phi_0$  entspricht im Funktionenraum also einer infinitesimalen Translation in Richtung dieser Nullmode von  $\mathbb{K}(\phi_0)$ . Entsprechend ist die mit den Extremalbedingungen verträgliche Verschiebung einer Lösung  $\phi_0^{(a)}$ ,  $a \in \mathbb{R}$  eine Nullmode des Operators  $\mathbb{K}(\phi_0^{(a)})$ . Dass eine mit

der klassischen Extremalbedingung verträgliche infinitesimale Variation hier tatsächlich im Ortsraum einer Translation entlang der  $z$ -Achse entspricht, sieht man explizit, wenn man eine solche infinitesimale Translation durch Anwendung eines Operators  $T$  beschreibt:

$$\phi_0(z + \delta z) = T\phi_0(z) = \left(1 + \delta z \frac{\partial}{\partial z}\right) \phi_0(z) = \phi_0(z) + \delta z \frac{m_0}{2} v_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Dies ist - bis auf konstante Vorfaktoren - die  $\mathbb{K}(\phi_0)$ -Eigenfunktion  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}(z)$  und so schreibe ich

$$T\phi_0(z) = \phi_0(z) + c_0(\delta z) \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z).$$

Damit wird folgender Zusammenhang deutlich:

$$\begin{array}{ccc} \text{Ortsraum} & & \text{Funktionenraum} \\ \text{Infinitesimale Translation von } \phi_0 & \longleftrightarrow & \text{Infinitesimale Translation von } \phi_0 \\ \text{in } z\text{-Richtung} & & \text{in } \Psi_{\vec{0}\xi_0}\text{-Richtung.} \end{array} \quad (4.4)$$

Translationen endlicher Länge  $\Delta z$  lassen sich wie üblich über die Exponenzierung des Operators  $\Delta z \partial_z$  darstellen, also

$$\phi_0(z + \Delta z) = \phi_0(z) + \frac{\partial \phi_0(z)}{\partial z} \Delta z + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi_0(z)}{\partial z^2} (\Delta z)^2 + \dots = \exp\left\{\Delta z \frac{\partial}{\partial z}\right\} \phi_0(z).$$

Eine beliebige Funktion  $\phi$  lässt sich in der Basis der Eigenfunktionen  $\Psi_\lambda$  von  $\mathbb{K}(\phi_0)$  darstellen als

$$\phi(x) = \sum_{\lambda} (\Psi_{\lambda}, \phi) \Psi_{\lambda} = \sum_{\lambda} c_{\lambda} \Psi_{\lambda}.$$

So schreibe ich mit Zusammenhang (4.4) eine infinitesimale Verschiebung einer Sattelpunktlösung  $\phi_0^{(a)}$  in  $z$ -Richtung als

$$d\phi_0^{(a)} = dc_0(a) \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} = dz \partial_z \phi_0^{(a)} = dz \|\partial_z \phi_0^{(a)}\| \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} = \sqrt{H[\phi_0]} dz \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}, \quad (4.5)$$

wobei  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}$  die normierte Nullmode des Operators  $\mathbb{K}(\phi_0^{(a)})$  ist und das letzte Gleichheitszeichen folgt, da  $\|\partial_z \phi_0^{(a)}\| = \sqrt{H[\phi_0]}$  unabhängig von  $a$  gilt. Dies zeigt, nachdem  $a$  durch eine Substitution eliminiert wurde, die Rechnung

$$\begin{aligned} (\partial_z \phi_0, \partial_z \phi_0) &= \int d^D x (\partial_z \phi_0(x))^2 = \frac{m_0^2 v_0^2}{4} \underbrace{\int d^D x \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right)}_{= \frac{8}{3m_0}, \text{ siehe Gl. (3.4)}} = L^{D-1} \frac{2m_0^3}{g_0} \\ &\Rightarrow \|\partial_z \phi_0\| = L^{(D-1)/2} \sqrt{\frac{2m_0^3}{g_0}} = \sqrt{H[\phi_0]}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Bis jetzt habe ich ein System in Abwesenheit einer äußeren Quelle betrachtet. Fügt man eine solche hinzu, so gelten ähnliche Zusammenhänge wie im quellfreien Fall. So liefert die Funktionalableitung von  $H_J[\phi] := H[\phi] - (J(x), \phi(x))$  die Extremalbedingung

$$\frac{\delta H_J[\phi]}{\delta \phi(x)} \bigg|_{\phi=\phi_{0,J}} = \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) \phi_{0,J}(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_{0,J}^3(x) - J = 0. \quad (4.7)$$

Eine Variation  $\phi_{0,J} \rightarrow \phi'_{0,J} = \phi_{0,J} + \delta\phi_{0,J}$  ergibt die Funktionalableitung

$$\begin{aligned} \frac{\delta H_J[\phi]}{\delta \phi} \bigg|_{\phi'_{0,J}} &= \underbrace{-\nabla^2 \phi_{0,J} - \frac{m_0}{2} \phi_{0,J} + \frac{g_0}{3!} \phi_{0,J}^3 - J - \nabla^2 \delta\phi_{0,J} - \frac{m_0}{2} \delta\phi_{0,J} +} \\ &= 0, \text{ siehe Gl. (4.7)} \\ &\quad + \frac{g_0}{3!} (3\phi_{0,J}(\delta\phi_{0,J})^2 + 3\phi_{0,J}^2 \delta\phi_{0,J} + (\delta\phi_{0,J})^3). \end{aligned}$$

Damit ist eine infinitesimale Verschiebung  $\delta\phi_{0,J}$ , die mit der Extremalbedingung (4.7) verträglich ist, eine Nullmode des Operators  $\mathbb{K}(\phi_{0,J})$ :

$$\begin{aligned} \left[ -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2} \phi_{0,J}^2 \right] \delta\phi_{0,J} &= 0 \\ \Leftrightarrow \mathbb{K}(\phi_{0,J}) \delta\phi_{0,J} &= 0. \end{aligned}$$

In Anwesenheit eines äußeren Quellfeldes  $J(x)$  liegt also nur dann eine kontinuierliche Entartung der Lösung  $\phi_{0,J}$  vor, falls die Quelle so geartet ist, dass  $\mathbb{K}(\phi_{0,J})$  mindestens eine Nullmode besitzt.

Nachdem die Entartung der Sattelpunkte untersucht wurde, kann ich diese nun in der Berechnung der Zustandssumme im folgenden Abschnitt entsprechend berücksichtigen.

### 4.1.2 Berechnung des erzeugenden Funktional

Thermische Fluktuationen werden in der Landau-Approximation vernachlässigt. Sie lassen sich im Rahmen einer Störungsrechnung berücksichtigen, wobei man das Feld  $\phi(x)$  als um eine klassische Lösung schwankend ansieht. In der symmetrischen Phase, in der die einzige klassische Lösung  $\phi = 0 = \text{const.}$  lautet, erhält man so die Störungstheorie mit der Hamiltondichte (1.3). Da diese für die Betrachtung von Grenzflächen irrelevant ist, soll in diesem Abschnitt nur die Störungsrechnung in der gebrochenen Phase behandelt werden.

Dabei betrachte ich die beiden in Abschnitt 3.2 beschriebenen Arten von klassischen Lösungen, nämlich zum einen die konstanten Felder  $\phi = \pm v_0$  und zum anderen die (Anti-)Kink-Lösungen  $\phi(x) = \pm v_0 \tanh(m_0(z-a)/2)$ , deren kontinuierliche Entartung Gegenstand des letzten Abschnittes war. Obwohl nur letztere eine Grenzfläche aufweisen, ist eine Störungsrechnung um eines der konstanten Felder sehr instruktiv, da der Fall mit ortsabhängigem  $\phi$  davon lediglich eine Verallgemeinerung darstellt. Zudem geht die Kink-Lösung für  $z \rightarrow \pm\infty$  in die konstanten Felder  $\pm v_0$  über.

### Entwicklung um $\phi = \pm v_0$

Ich beginne deshalb mit den konstanten Lösungen  $\phi = \pm v_0$ , wobei ich mich auf das positive Vorzeichen beschränke. Die Rechnung im Falle negativen Vorzeichens verläuft analog. Für die Störungsrechnung führe ich die Fluktuation  $\varphi(x)$  ein, so dass für ein beliebiges Feld  $\phi$  die Beziehung

$$\phi(x) = v_0 + \varphi(x)$$

gilt. Eingesetzt in den Hamiltonian der gebrochenen Phase liefert dies

$$\begin{aligned} H &= \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 - \frac{m_0^2}{4} \phi^2 + \frac{g_0}{4!} \phi^4 \right\} \\ &= \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 - \frac{m_0^2}{4} (v_0^2 + 2v_0 \varphi + \varphi^2) + \frac{g_0}{4!} (v_0^4 + 4v_0^3 \varphi + 6v_0^2 \varphi^2 + 4v_0 \varphi^3 + \varphi^4) \right\} \\ &= \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 - \frac{m_0^2}{2} v_0 \varphi - \frac{m_0^2}{4} \varphi^2 + \frac{g_0}{3!} v_0^3 \varphi + \frac{g_0}{4} v_0^2 \varphi^2 + \frac{g_0}{3!} v_0 \varphi^3 + \frac{g_0}{4!} \varphi^4 - \right. \\ &\quad \left. - \underbrace{\frac{m_0^2}{4} v_0^2 + \frac{g_0}{4!} v_0^4}_{= \mathcal{H}[v_0]} \right\} \\ &= H[v_0] + \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{m_0^2}{2} \varphi^2 + \frac{\sqrt{3g_0}}{3!} m_0 \varphi^3 + \frac{g_0}{4!} \varphi^4 \right\} \\ &= H[v_0] + H_I[\varphi] + \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{m_0^2}{2} \varphi^2 \right\}. \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet

$$H_I[\varphi] = \int d^D x \left\{ \frac{\sqrt{3g_0}}{3!} m_0 \varphi^3 + \frac{g_0}{4!} \varphi^4 \right\}$$

die Wechselwirkungs-Hamiltondichte der Fluktuation  $\varphi$ . Mit der Definition des inversen freien Propagators

$$G_0^{-1} = -\nabla^2 + m_0^2$$

lässt sich die Zustandssumme in die Form

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]} = e^{-\beta H[v_0]} \int \mathcal{D}\varphi e^{-\beta H_I[\varphi]} e^{-\frac{1}{2}\beta(\varphi, G_0^{-1}\varphi)}$$

bringen. Betrachtet man den Fall  $H_I = 0$ , also die freie Theorie, so lässt sich deren Zustandssumme nach einer Skalierung  $\varphi \rightarrow \beta^{-1/2}\varphi$  der Integrationsvariable des verbleibenden Funktionalintegrals zu

$$Z_0^{(0)} = e^{-\beta H[v_0]} \int \mathcal{D}\varphi \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\varphi, G_0^{-1} \varphi) \right\} = \frac{e^{-\beta H[v_0]}}{\sqrt{\det G_0^{-1}}}$$

berechnen. Als normiertes erzeugendes Funktional erhalte ich nach Einführung eines Quellfeldes  $J(x)$  den Ausdruck

$$Z[J] = \frac{e^{-\beta H_J[v_0]}}{Z_0} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_I \left( \beta^{-1} \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \int \mathcal{D}\varphi e^{-\frac{1}{2}\beta(\varphi, G_0^{-1}\varphi) + \beta(J, \varphi)},$$

wobei ich die Bezeichnung  $H_J[v_0] := H[v_0] - (J, v_0)$  verwende. Mit der Skalierung  $J \rightarrow \beta J$  lässt sich  $Z[J]$  umschreiben zu

$$Z[J] = \frac{e^{-\beta H_J[v_0]}}{Z_0} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_I \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} \int \mathcal{D}\varphi e^{-\frac{1}{2}\beta(\varphi, G_0^{-1}\varphi) + (J, \varphi)}.$$

Eine quadratische Ergänzung isoliert den freien Anteil des Funktionalintegrals. Dazu führe ich die Verschiebung

$$\tilde{\varphi} = \varphi - \beta^{-1}G_0J$$

ein und verwende

$$(\tilde{\varphi}, G_0^{-1}\tilde{\varphi}) = (\varphi, G_0^{-1}\varphi) - 2\beta^{-1}(\varphi, J) + \beta^{-2}(J, G_0, J),$$

um das erzeugende Funktional in die Form

$$\begin{aligned} Z[J] &= \frac{e^{-\beta H_J[v_0]}}{Z_0} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_I \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} e^{\frac{1}{2}(J, \beta^{-1}G_0J)} \int \mathcal{D}\tilde{\varphi} e^{-\frac{1}{2}\beta(\tilde{\varphi}, G_0^{-1}\tilde{\varphi})} \\ &= \frac{Z_0^{(0)}}{Z_0} e^{\beta(J, v_0)} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_I \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} e^{\frac{1}{2}(J, \beta^{-1}G_0J)} \end{aligned}$$

zu bringen. Mit expliziter Angabe des Wechselwirkungs-Hamiltonians erhalte ich schließlich

$$\begin{aligned} Z[J] &= \frac{Z_0^{(0)}}{Z_0} e^{\beta(J, v_0)} \exp \left\{ -\beta \frac{\sqrt{3g_0}m_0}{3!} \int d^D x \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right)^3 \right\} \times \\ &\quad \times \exp \left\{ -\beta \frac{g_0}{4!} \int d^D x' \left( \frac{\delta}{\delta J(x')} \right)^4 \right\} e^{\frac{1}{2}(J, \beta^{-1}G_0J)}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Aus diesem Ausdruck lassen sich die Feynman-Regeln für eine systematische Entwicklung des exponentiellen Wechselwirkungs-Hamiltonians direkt ablesen. Die Fluktuationen sind durch ein massives Feld mit einem Dreier- und einem Vierervertex gegeben. Der freie Propagator lautet

$$G_0(x - y) = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{e^{-ik \cdot (x-y)}}{k^2 + m_0^2} \quad \text{bzw.} \quad G_0(k) = \frac{1}{k^2 + m_0^2}. \quad (4.9)$$

Die Vertexfaktoren sind

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} \text{Diagram:} \\ \text{Vertikale Linie} \\ \text{mit zwei} \\ \text{seitlichen} \\ \text{Linien} \end{array} & = -\sqrt{3g_0}m_0 = -g_0v_0 & \text{und} \\ & & \begin{array}{c} \text{Diagram:} \\ \text{Vier Linien} \\ \text{die} \\ \text{in einem} \\ \text{Punkt} \\ \text{münden} \end{array} & = -g_0. \end{array}$$

Aus dem Vorhandensein des Dreiervertex resultiert insbesondere ein nichtverschwindender Beitrag zu  $\langle \varphi \rangle$  und damit eine Korrektur  $\langle \phi \rangle = v_0 + \langle \varphi \rangle$ . Entsprechend der aus 4.8 gefolgerten Regeln kann dabei bis zur 1-Loop Ordnung nur ein Diagramm mit einem Dreiervertex

auftreten. Ausgedrückt durch Feynman-Graphen bedeutet dies

$$\langle \varphi(x) \rangle = \text{Diagramm mit gestrichelter Kreisfläche} = \text{Diagramm mit '1PI' in Kreis} = \text{Diagramm mit Kreisfläche} + \mathcal{O}(\beta^{-2}).$$

Es muss demnach ein Tadpole-Diagramm berechnet werden. Ausgehend vom erzeugenden Funktional (4.8) berechne ich explizit

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi(x) \rangle &= \frac{\delta}{\delta J(x)} \left( -\beta \frac{g}{2} v_0 \int d^D x' \frac{\delta^3}{\delta J(x')^3} \right) e^{\frac{1}{2}(J, \beta^{-1} G_0 J)} \Big|_{J=0} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= -\frac{\delta}{\delta J(x)} \left( \beta \frac{g_0}{2} v_0 \int d^D x' \frac{\delta^3}{\delta J(x')^3} \right) \times \\
 &\quad \times \left\{ 1 + \frac{1}{2} \beta^{-1} (J, G_0 J) + \frac{1}{4} \beta^{-2} (J, G_0 J)(J, G_0 J) \right\} \Big|_{J=0} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= -\beta^{-1} \frac{g_0}{2} v_0 \int d^D y G_0(x-y) G_0(0) + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= -\beta^{-1} \frac{g_0}{2} v_0 G_0(0) \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{e^{ik \cdot x}}{k^2 + m^2} \underbrace{\int d^D y e^{ik \cdot y}}_{= (2\pi)^D \delta^{(D)}(k)} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= -\beta^{-1} \frac{g_0}{2} v_0 G_0(0) \frac{1}{m^2} + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \tag{4.10}
 \end{aligned}$$

Der kombinatorische Faktor 1/2 tritt auf, da es drei mögliche Kontraktionen von  $\varphi(x)$  mit den drei  $\varphi(y)$  des Vertex gibt und der Dreier-Wechselwirkungsterm mit dem Faktor 1/3! in die Rechnung eingeht.

Bei den folgenden Rechnungen verwende ich dimensionale Regularisierung mit  $D = 3 - \epsilon$  Dimensionen, um mit den auftretenden Divergenzen umzugehen. Den Propagator  $G_0(0)$  berechne ich via Schwinger-Parametrisierung:

$$\begin{aligned}
 G_0(0) &= \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{k^2 + m_0^2} = \int_0^\infty ds \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{-(k^2 + m_0^2)s} = \int_0^\infty ds e^{-m_0^2 s} \underbrace{\left[ \int_{-\infty}^\infty d\bar{k} e^{-\bar{k}^2 s} \right]^D}_{= \frac{1}{(4\pi)^{D/2}} s^{-D/2}} \\
 &= \frac{1}{(4\pi)^{D/2}} \int_0^\infty ds e^{-m_0^2 s} s^{-D/2}.
 \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet  $\bar{k}$  eine Komponente des  $D$ -Vektors  $k$ . Nach der Substitution

$$s \rightarrow \tilde{s} = m_0^2 s, \quad \Rightarrow \quad ds = m_0^{-2} d\tilde{s}, \quad s^{-D/2} = m_0^D \tilde{s}^{-D/2}$$

erhalte ich

$$\begin{aligned} G_0(0) &= \frac{m_0^{D-2}}{(4\pi)^{D/2}} \underbrace{\int_0^\infty d\tilde{s} e^{-\tilde{s}} \tilde{s}^{-D/2}}_{= \Gamma\left(1 - \frac{D}{2}\right)} \\ &= \frac{m_0^{D-2}}{(4\pi)^{D/2}} \Gamma\left(1 - \frac{D}{2}\right). \end{aligned}$$

In drei Dimensionen ergibt sich wegen  $\Gamma(-1/2) = -2\Gamma(1/2) = -2\sqrt{\pi}$

$$G_0(0) = -\frac{m_0}{4\pi}.$$

Eingesetzt in (4.10) liefert dies schließlich

$$\langle \varphi \rangle = \beta^{-1} \frac{g_0 v_0}{8\pi m_0} + \mathcal{O}(\beta^{-2})$$

und damit als Erwartungswert des vollständigen Feldes  $\phi$

$$\begin{aligned} \langle \phi \rangle &= v_0 + \beta^{-1} \frac{g}{m_0} v_0 \frac{1}{8\pi} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= \underbrace{v_0 \left\{ 1 + \beta^{-1} \frac{u_0}{8\pi} \right\}}_{=: v} + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Dabei verwende ich die dimensionslose Kopplung  $u_0 = g_0/m_0$ .

Das hier vorgeführte Schema der Berechnung von  $\langle \varphi \rangle$  wird auch im allgemeineren Fall eines nichttrivialen Vakuums, also eines ortsabhängigen Vertexfaktors, beibehalten. Wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, gestaltet sich die Rechnung dabei aber deutlich komplizierter.

### Entwicklung um die Kink-Lösung

Nun führe ich die Störungsrechnung unter Randbedingungen durch, die eine Grenzfläche erzwingen. Zur Behandlung der in Abschnitt 4.1.1 beschriebenen Entartung füge ich, entsprechend der Methode der kollektiven Koordinaten nach [GS75] eine Identität in das Zustandsintegral ein:

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]} = \int \mathcal{D}\phi \int dc_0(a) \delta(c_0(a)) e^{-\beta H[\phi]} \quad (4.12)$$

mit

$$\begin{aligned} c_0(a) &= \left( \varphi^{(a)}, \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} \right) \quad \left| \quad \varphi^{(a)} := \phi - \phi_0^{(a)}, \quad \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} := \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z - a) \right. \\ &= \int d^D x (\phi(x) - \phi_0(z - a)) \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z - a) \\ &= \int d^D x (\phi(x_1, \dots, x_{D-1}, z + a) - \phi_0(z)) \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z). \end{aligned}$$

Ich substituiere nun  $c_0$  durch  $a$ . Die dabei auftretende Funktionaldeterminante forme ich wie folgt um:

$$\begin{aligned}
 \frac{dc_0(a)}{da} &= \left( \frac{\partial \varphi^{(a)}}{\partial a}, \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} \right) + \left( \varphi^{(a)}, \frac{\partial \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}}{\partial a} \right) \\
 &= \left( -\frac{\partial \phi_0^{(a)}}{\partial a}, \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} \right) + \left( \varphi^{(a)}, \frac{\partial \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}}{\partial a} \right) \\
 &= \left( \partial_z \phi_0^{(a)}, \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} \right) - \left( \varphi^{(a)}, \frac{\partial \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}}{\partial z} \right) \\
 &= \sqrt{H[\phi_0]} - \left( \varphi^{(a)}, \frac{\partial \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}}{\partial z} \right).
 \end{aligned}$$

Im letzten Schritt nutze ich dabei die Beziehung (4.5) aus. Damit lautet die Zustandssumme

$$\begin{aligned}
 Z_0 &= \int da \int \mathcal{D}\phi \left\{ \sqrt{H[\phi_0]} - \left( \varphi^{(a)}, \frac{\partial \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)}}{\partial z} \right) \right\} \times \\
 &\quad \times \delta \left\{ \int d^D x (\phi(x_1, \dots, x_{D-1}, z+a) - \phi_0(z)) \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z) \right\} e^{-\beta H[\phi]} \\
 &= \sqrt{H[\phi_0]} \int da \int \mathcal{D}\phi \delta \left\{ \int d^D x (\phi(x_1, \dots, x_{D-1}, z+a) - \phi_0(z)) \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z) \right\} e^{-\beta H[\phi]} + \Delta.
 \end{aligned}$$

Die Größe  $\Delta$  beinhaltet dabei den Term mit  $(\varphi^{(a)}, \partial \Psi_{\vec{0}\xi_0}^{(a)} / \partial z)$ , der in erster Ordnung vernachlässigt werden kann. Da  $H[\phi]$  invariant gegenüber Translationen von  $\phi$  ist, lässt eine Verschiebung  $\phi(x) \rightarrow \phi(x_1, \dots, x_{D-1}, z+a)$  den Wert des Integrals unverändert, so dass dieser von  $a$  unabhängig ist. Erstreckt sich die Integration des Parameters  $a$  über ein Intervall  $[-T/2, T/2]$ , so ergibt sich

$$\begin{aligned}
 Z_0 &= \sqrt{H[\phi_0]} \int \mathcal{D}\phi \delta \left\{ (\varphi, \Psi_{\vec{0}\xi_0}) \right\} e^{-\beta H[\phi]} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} da \\
 &= T \sqrt{H[\phi_0]} \int \mathcal{D}\phi \delta \left\{ (\varphi, \Psi_{\vec{0}\xi_0}) \right\} e^{-\beta H[\phi]} \\
 &= T \sqrt{H[\phi_0]} \int_{N^\perp} \mathcal{D}\phi e^{-\beta H[\phi]}.
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Hierbei bezeichnet das Symbol  $N^\perp$  den zur Nullmode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}$  senkrechten Unterraum des Raumes aller Fluktuationen und  $\int_{N^\perp} \mathcal{D}\phi \dots$  bedeutet, dass die Funktionalintegration auf eben diesen Teilraum beschränkt wird. Mit Einführung der Identität in Gleichung (4.12) gelingt es also, den problematischen Teil des Funktionalintegrals durch die einfach handhabbare

Konstante  $T$  zu ersetzen. Anschaulich bedeutet dies eine Summation der überabzählbar unendlich vielen Sattelpunkte, von denen jeder einzelne den gleichen, durch das auf  $\mathbb{N}^\perp$  beschränkte Funktionalintegral gegebenen, Beitrag zur Zustandssumme liefert. Mit der Zerlegung  $\phi = \phi_0 + \varphi$  schreibe ich  $H[\phi]$  als Volterra-Reihenentwicklung um  $\phi_0$ , also

$$\begin{aligned} H[\phi_0 + \varphi] &= H[\phi_0] + \int d^D x \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(x)} \bigg|_{\phi_0} \varphi(x) + \frac{1}{2} \int d^D x d^D x' \frac{\delta^2 H[\phi]}{\delta \phi(x) \delta \phi(x')} \bigg|_{\phi_0} \varphi(x) \varphi(x') + \dots + \\ &+ \frac{1}{n!} \int d^D x d^D x' \dots d^D x^{(n)} \frac{\delta^n H[\phi]}{\delta \phi(x) \delta \phi(x') \dots \delta \phi(x^{(n)})} \bigg|_{\phi_0} \varphi(x) \varphi(x') \dots \varphi(x^{(n)}) + \dots \end{aligned}$$

Im Falle der  $\phi^4$ -Theorie hat diese Reihe neben dem ersten Glied  $H[\phi_0]$  noch genau vier weitere nichtverschwindende Glieder. Die darin auftretenden Funktionalableitungen haben in der gebrochenen Phase folgende Gestalt:

$$\begin{aligned} \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(x)} \bigg|_{\phi_0} &= \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) \phi_0(x) + \frac{g_0}{3!} \phi_0^3(x), \\ \frac{\delta^2 H[\phi]}{\delta \phi(x) \delta \phi(x')} \bigg|_{\phi_0} &= \left[ \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(x) \right] \delta(x - x') = \mathbb{K}_{xx'}(\phi_0), \\ \frac{\delta^3 H[\phi]}{\delta \phi(x) \delta \phi(x') \delta \phi(x'')} \bigg|_{\phi_0} &= g_0 \phi_0(x) \delta(x - x') \delta(x - x''), \\ \frac{\delta^4 H[\phi]}{\delta \phi(x) \delta \phi(x') \delta \phi(x'') \delta \phi(x''')} \bigg|_{\phi_0} &= g_0 \delta(x - x') \delta(x - x'') \delta(x - x'''). \end{aligned} \quad (4.14)$$

In der zweiten Funktionalableitung erkennt man den Kern des aus Abschnitt 4.1.1 bekannten Fluktuationsoperators. Die vollständige Reihenentwicklung lautet demnach

$$\begin{aligned} H[\phi_0 + \varphi] &= H[\phi_0] + \int d^D x \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(x)} \bigg|_{\phi_0} \varphi(x) + \frac{1}{2} (\varphi, \mathbb{K}(\phi_0) \varphi) + \\ &+ \frac{g_0}{3!} \int d^D x \phi_0(x) \varphi^3(x) + \frac{g_0}{4!} \int d^D x \varphi^4(x). \end{aligned}$$

Diese Reihenentwicklung gilt unabhängig von der speziellen Wahl von  $\phi_0$ . Sie hätte also dieselbe Gestalt, würde es sich bei  $\phi_0$  um eine beliebige Funktion und nicht um eine Extremstelle von  $H[\phi]$  handeln. Da aber nun  $\phi_0$  ein Sattelpunkt des Hamiltonfunktional ist, verschwindet der zweite Term der Reihe und es bleibt der Ausdruck

$$H[\phi_0 + \varphi] = H[\phi_0] + \frac{1}{2} (\varphi, \mathbb{K}(\phi_0) \varphi) + H_I[\varphi]. \quad (4.15)$$

Der Wechselwirkungs-Hamiltonian ist gegeben als Volumenintegral der Dichte

$$\mathcal{H}_I(x) = \frac{g_0}{3!} \phi_0(x) \varphi^3(x) + \frac{g_0}{4!} \varphi^4(x).$$

Setze ich (4.15) nun in die Zustandssumme (4.13) ein, so erhalte ich

$$Z_0 = T \sqrt{H[\phi_0]} e^{-\beta H[\phi_0]} \int_{N^\perp} \mathcal{D}\varphi e^{-\beta \frac{1}{2} (\varphi, \mathbb{K}(\phi_0)\varphi) - \beta H_I[\varphi]}. \quad (4.16)$$

Wie bei der Entwicklung um  $v_0$  betrachte ich an dieser Stelle den freien Fall  $H_I = 0$ . Die Zustandssumme der freien Theorie  $Z_0^{(0)}$  ist nach Behandlung der Nullmode im Wesentlichen ein auf  $N^\perp$  beschränktes Gauß'sches Integral, welches sich nach einer Skalierung der Integrationsvariable  $\varphi \rightarrow \beta^{-1/2}\varphi$  zu

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

auswerten lässt. Dabei bezeichnet  $\mathbb{K}'(\phi_0)$  die Beschränkung des Operators  $\mathbb{K}(\phi_0)$  auf den Unterraum  $N^\perp$  senkrecht zur Nullmode  $\Psi_{\tilde{\phi}_{\xi_0}}$ . Ohne die oben durchgeführte Sonderbehandlung der Nullmode wäre über den gesamten Raum der Fluktuationen  $\varphi$  zu integrieren, so dass der Ausdruck  $\det(\mathbb{K}(\phi_0))^{-1/2}$  wegen des Eigenwerts  $\lambda = 0$  gar nicht definiert bzw. das Gauß'sche Integral divergent wäre. Die Zustandssumme des hier betrachteten Systems, welches eine in  $z$ -Richtung unendliche Ausdehnung besitzt, also den Limes  $T \rightarrow \infty$  beschreibt, ist natürlich trotzdem unendlich. Für das freie Feld ( $H_I = 0$ ) beträgt sie

$$Z_0^{(0)} = \lim_{T \rightarrow \infty} T \sqrt{H[\phi_0]} e^{-\beta H[\phi_0]} (\det \mathbb{K}'(\phi_0))^{-1/2}.$$

In die Zustandssumme (4.16) gehen alle Kink-Lösungen  $\phi_0^{(a)}$  mit dem gleichen Gewicht ein. Der Erwartungswert des Feldes  $\phi$  für das beschriebene Modellsystem ist deshalb eine Mitteilung aller Translationen der Grenzfläche, inklusive Fluktuationen, entlang der  $z$ -Achse:

$$\langle \phi \rangle(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} da \underbrace{(\phi_0^{(a)}(x) + \langle \varphi \rangle^{(a)}(x))}_{=: \langle \phi \rangle_{\perp}^{(a)}}.$$

Aus Symmetriegründen sind diese Flächen aber alle formgleich, unterscheiden sich also lediglich in ihrer Position  $a$ . Im Folgenden soll aber gerade die Form *einer* solchen Fläche untersucht werden. Es genügt deshalb die Betrachtung des Falles  $a = 0$ .

Um  $\langle \phi \rangle_{\perp} := \langle \phi \rangle_{\perp}^{(0)}$  zu berechnen, formuliere ich eine Störungstheorie auf dem Raum  $N^\perp$ . Ihr erzeugendes Funktional lautet

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

mit der Normierung

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

und dem Hamiltonian

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

Die Wahl des Quellfeldes  $J(x)$  erfolgt dabei aus dem Raum derjenigen Quellen, welche keine Fluktuationen in Richtung der Nullmode  $\Psi_{0\xi_0}$  erzeugen. Nach einer quadratischen Ergänzung und Skalierung von  $J$ , wie in (4.8) erhalte ich  $Z_{\perp}[J]$  in der Form

$$Z_{\perp}[J] = \frac{1}{Z_{\perp,0}} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_I \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} e^{\frac{1}{2} (J, \beta^{-1} \mathbb{K}'^{-1}(\phi_0) J)} \times \times \int_{N^{\perp}} \mathcal{D}\varphi \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} (\varphi, \mathbb{K}(\phi_0) \varphi) \right\}. \quad (4.17)$$

Nach Auswertung des Gauß'schen Funktionalintegrals bleibt also

$$Z_{\perp}[J] = \frac{1}{Z_{\perp,0} \sqrt{\det \mathbb{K}'(\phi_0)}} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_I \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} e^{\frac{1}{2} (J, \beta^{-1} \mathbb{K}'^{-1}(\phi_0) J)}.$$

Wie bei (4.8) handelt es sich auch in diesem Falle um das erzeugende Funktional einer Störungstheorie mit einem Dreier- und einem Vierervertex, wobei ersterer wieder von der klassischen Lösung abhängt. Die Faktoren lauten

$$\begin{array}{ccc} \text{Diagramm: Dreiervertex} & = -\sqrt{3g_0} m_0 \tanh \left( \frac{m_0}{2} z \right) = -g_0 \phi_0(z) & \text{und} \\ \text{Diagramm: Vierervertex} & = -g_0. \end{array}$$

Anders als im Fall der konstanten klassischen Lösung ist der Dreier-Vertexfaktor nun also  $z$ -abhängig. Ebenso ist der Propagator  $G_0(x - x') = \mathbb{K}'_{xx'}^{-1}(\phi_0)$  deutlich komplizierter als sein Gegenstück (4.9). Analog zu (4.10) ist der Erwartungswert der Fluktuation in diesem Falle gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle \varphi \rangle_{\perp} &= \text{Diagramm: Vierervertex} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= -\beta^{-1} \frac{g_0}{2} \int d^D x' \mathbb{K}'_{xx'}^{-1}(\phi_0) \mathbb{K}'_{x'x'}^{-1}(\phi_0) \phi_0(z') + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \end{aligned} \quad (4.18)$$

$\mathbb{K}(\phi_0)$  und  $\mathbb{K}'^{-1}(\phi_0)$  spielen bei der Bestimmung des Grenzflächenprofils offensichtlich eine große Rolle, weshalb sie in den Abschnitten 4.4 und 4.5 genauer behandelt werden.

## 4.2 Berechnung von $\Gamma_{\perp}[\varphi_C]$ bis zur 1. Ordnung

Zur Herleitung einer Feldgleichung für das Grenzflächenprofil greife ich auf den in Abschnitt 1.2.2 beschriebenen Formalismus der effektiven Wirkung bzw. der Gibbs'schen freien Energie zurück. Diese berechne ich mit Hilfe der Sattelpunktmethode, auch bekannt als Methode

des steilsten Abfallens (*steepest descent*) und folge damit letztlich einem Schema von Jackiw [Ja74]. Dabei entwickle ich das erzeugende Funktional (4.17) um ein Extremum  $\varphi_J$ , also eine Lösung der Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\delta H_\perp[\varphi]}{\delta \varphi} \bigg|_{\varphi_J} &= 0 \\ \Leftrightarrow -\nabla^2 \varphi_J(x) - \frac{m_0^2}{2} \varphi_J(x) + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(x) \varphi_J(x) + \frac{g_0}{3!} \varphi_J^3(x) - J(x) &= 0. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Für  $J = 0$  löst  $\varphi = 0$  diese Gleichung trivial. Dies ist konsistent mit der Definition des Feldes  $\varphi(x)$  als Fluktuation um die klassische Kink-Lösung  $\phi_0(x)$ . Im Folgenden ziehe ich nur Quellen  $J(x)$  in Betracht, für die  $\varphi_J(x)$  klein ist, die also nur zu geringfügigen Abweichungen von der Kink-Lösung führen.

Nun soll  $H_\perp$  um  $\varphi_J$  entwickelt werden. Dazu schreibe ich  $\varphi(x) = \varphi_J(x) + \tilde{\varphi}(x)$ . Bevor ich auf die Details der Entwicklung eingehe, möchte ich kurz die Beziehungen zwischen den Feldern  $\phi(x)$ ,  $\varphi(x)$  und  $\tilde{\varphi}(x)$  verdeutlichen. Die vollständige Feldkonfiguration  $\phi(x)$  des Systems wurde gemäß  $\phi(x) = \phi_0(x) + \varphi(x)$  in die klassische Kink-Lösung  $\phi_0(x)$  sowie eine Korrektur  $\varphi(x)$  zerlegt. Dabei wird nur der Fall  $\varphi \in N^\perp$  betrachtet. Der Term  $\varphi(x) = \varphi_J(x) + \tilde{\varphi}(x)$  besteht dabei aus einem Beitrag nullter Ordnung,  $\varphi_J(x)$ , der angibt, wie sich die Kink-Lösung beim Einschalten eines schwachen äußeren Feldes verändert, und Fluktuationen  $\tilde{\varphi}(x)$ . Zusammengefasst gilt demnach

$$\phi(x) = \phi_0(x) + \varphi(x) = \phi_0(x) + \varphi_J(x) + \tilde{\varphi}.$$

Die Felder  $\phi(x)$  und  $\varphi(x)$  stimmen in allen außer der nullten Ordnung überein. Schreibe ich sie als Potenzreihen von  $\beta^{-1}$ , also

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \phi_0(x) + \varphi_J(x) + \beta^{-1} \phi_1 + \mathcal{O}(\beta^{-2}), \\ \varphi(x) &= \varphi_J(x) + \beta^{-1} \varphi_1(x) + \mathcal{O}(\beta^{-2}), \end{aligned}$$

so gilt insbesondere  $\phi_1(x) = \varphi_1(x)$ . Um den 1-Loop-Beitrag zu  $\phi(x)$  zu berechnen, muss also  $\varphi_1(x)$  bestimmt werden.

Für die Entwicklung von  $H_\perp$  um  $\varphi_J$  berechne ich eine Volterra-Reihe analog zu (4.14). Deren nichtverschwindende Glieder lauten

$$\begin{aligned} \frac{\delta^2 H_\perp[\varphi]}{\delta \varphi(x) \delta \varphi(x')} \bigg|_{\varphi_J} &= \left[ \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) + \frac{g_0}{2} \phi_0^2(x) \right] \delta(x - x') + \\ &\quad + g_0 \phi_0(x) \varphi_J^2(x) \delta(x - x') + \frac{g_0}{2} \varphi_J^2(x) \delta(x - x'), \\ &= \left[ \left( -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} \right) + \frac{g_0}{2} (\phi_0(x) + \varphi_J(x))^2 \right] \delta(x - x') \\ &= \mathbb{K}_{xx'}(\phi_0 + \varphi_J), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta^3 H_{\perp}[\varphi]}{\delta \varphi(x) \delta \varphi(x') \delta \varphi(x'')} \bigg|_{\varphi_J} &= g_0 (\phi_0(x) + \varphi_J(x)) \delta(x - x') \delta(x - x''), \\ \frac{\delta^4 H_{\perp}[\varphi]}{\delta \varphi(x) \delta \varphi(x') \delta \varphi(x'') \delta \varphi(x''')} \bigg|_{\varphi_J} &= g_0 \delta(x - x') \delta(x - x'') \delta(x - x'''). \end{aligned}$$

Damit schreibe ich das erzeugende Funktional in der Form

$$Z_{\perp}[J] = \frac{e^{-\beta H_{\perp,J}[\varphi_J]}}{Z_{\perp,0}} \int_{N^{\perp}} \mathcal{D}\tilde{\varphi} \exp \left[ -\frac{\beta}{2} (\tilde{\varphi}, \mathbb{K}(\phi_0 + \varphi_J) \tilde{\varphi}) \right] \exp \left[ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_{\perp,I}(x) \right] e^{\beta(J, \tilde{\varphi})},$$

wobei ich die Definitionen  $H_{\perp,J}[\varphi_J] := H_{\perp}[\varphi_J] - (J, \varphi_J)$  und

$$\mathcal{H}_{\perp,I}(x) = \frac{g_0}{3!} [\phi_0(x) + \varphi_J(x)] \tilde{\varphi}^3(x) + \frac{g_0}{4!} \tilde{\varphi}^4(x)$$

verwende. Da  $\varphi_J$  klein ist, darf ich annehmen, dass mit  $\mathbb{K}(\phi_0)$  auch  $\mathbb{K}(\phi_0 + \varphi_J)$  auf  $N^{\perp}$  invertierbar ist. Nach einer quadratischen Ergänzung und Skalierung von  $J$ , wie in (4.8) und (4.17) schreibe ich

$$Z_{\perp}[J] = \frac{e^{-\beta H_J[\varphi_J]}}{Z_{\perp,0} \sqrt{\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)}} \exp \left\{ -\beta \int d^D x \mathcal{H}_{\perp,I} \left( \frac{\delta}{\delta J(x)} \right) \right\} e^{\frac{1}{2} (J, \beta^{-1} \mathbb{K}'^{-1}(\phi_0 + \varphi_J) J)}. \quad (4.20)$$

Um via Legendre-Transformation (1.11) an die effektive Wirkung in 1-Loop Ordnung zu gelangen, bilde ich nun das erzeugende Funktional  $W_{\perp}[J]$ . Dieses lässt sich nach Potenzen von  $\beta^{-1}$  entwickeln, also

$$W_{\perp}[J] = W_0[J] + \beta^{-1} W_1[J] + \beta^{-2} W_2[J] + \dots$$

Mit (4.20) und der allgemeinen Beziehung (1.7) zwischen  $Z_{\perp}[J]$  und  $W_{\perp}[J]$  finde ich

$$\begin{aligned} \beta W_{\perp}[J] &= \ln(Z_{\perp}[J]) = \ln \left( \frac{e^{-\beta H_{\perp,J}[\varphi_J]}}{Z_{\perp,0} \sqrt{\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)}} \right) + \mathcal{O}(\beta^{-1}) \\ \Rightarrow W_{\perp}[J] &= \beta^{-1} \ln \left( \frac{e^{-\beta H_{\perp,J}[\varphi_J]}}{Z_{\perp,0} \sqrt{\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)}} \right) + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \end{aligned}$$

Den Logarithmus-Term schreibe ich wie folgt:

$$\ln \left( \frac{e^{-\beta H_{\perp,J}[\varphi_J]}}{Z_{\perp,0} \sqrt{\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)}} \right) = -\beta H_{\perp,J}[\varphi_J] - \ln(Z_{\perp,0}) - \frac{1}{2} \ln(\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)).$$

Damit erhalte ich das erzeugende Funktional der verbundenen Korrelatoren in 1-Loop-Ordnung (Helmholtz'sche Freie Energie)

$$W_{\perp}[J] = -H_{\perp,J}[\varphi_J] - \beta^{-1} \left\{ \frac{1}{2} \ln(\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)) + \ln(Z_{\perp,0}) \right\} + \mathcal{O}(\beta^{-2}).$$

Mit der Legendre-Transformation (1.11) lässt sich daraus die effektive Wirkung in erster Ordnung zu

$$\begin{aligned}\Gamma_{\perp}[\varphi_C] &= W_{\perp}[J] - (J, \varphi_C) \\ &= -H_{\perp,J}[\varphi_J] - (J, \varphi_C) - \beta^{-1} \left\{ \frac{1}{2} \ln(\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)) + \ln(Z_{\perp,0}) \right\} + \mathcal{O}(\beta^{-2})\end{aligned}$$

bestimmen. Auf der rechten Seite dieser Gleichung ist die Abhängigkeit von  $\varphi_C$  noch nicht explizit. Ich nutze deshalb aus, dass  $\varphi_C(x)$  und  $\varphi_J(x)$  in nullter Ordnung übereinstimmen und sich das exakte klassische Feld  $\varphi_C(x)$  als Potenzreihe von  $\beta^{-1}$  in der Form

$$\varphi_C(x) = \varphi_J(x) + \beta^{-1} \varphi_1(x) + \dots \quad (4.21)$$

schreiben lässt. Damit bringe ich den Hamiltonian  $H_{\perp,J}[\varphi_J]$  in die Form

$$\begin{aligned}H_{\perp,J}[\varphi_J] &= H_{\perp,J}[\varphi_C - \beta^{-1} \varphi_1 - \dots] \\ &= H_{\perp,J}[\varphi_C] - \int d^D x \frac{\delta H_{\perp,J}[\varphi]}{\delta \varphi(x)} \bigg|_{\varphi_C} (\beta^{-1} \varphi_1(x) + \dots) + \\ &\quad + \int d^D x \int d^D x' \frac{\delta^2 H_{\perp,J}[\varphi]}{\delta \varphi(x) \delta \varphi(x')} \bigg|_{\varphi_C} (\beta^{-1} \varphi_1(x) + \dots) (\beta^{-1} \varphi_1(x') + \dots) + \mathcal{O}(\beta^{-3}) \\ &= H_{\perp,J}[\varphi_C] - \beta^{-1} \int d^D x \varphi_1(x) \frac{\delta H_{\perp,J}[\varphi]}{\delta \delta \varphi} \bigg|_{\varphi_C} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= H_{\perp,J}[\varphi_C] - \beta^{-1} \int d^D x \varphi_1(x) \underbrace{\frac{\delta H_{\perp,J}[\varphi]}{\delta \delta \varphi}}_{\varphi_J} \bigg|_{\varphi_J} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= 0, \text{ siehe Gl. (4.19)} \\ &= H_{\perp,J}[\varphi_C] + \mathcal{O}(\beta^{-2}).\end{aligned}$$

Insgesamt erhalte ich damit die effektive Wirkung

$$\begin{aligned}\Gamma_{\perp}[\varphi_C] &= W_{\perp}[J] - (J, \varphi_C) \\ &= -H_{\perp,J}[\varphi_C] - (J, \varphi_C) - \beta^{-1} \left\{ \frac{1}{2} \ln(\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_C)) + \ln(Z_{\perp,0}) \right\} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= -H_{\perp}[\varphi_C] - \beta^{-1} \left\{ \frac{1}{2} \ln(\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_C)) + \ln(Z_{\perp,0}) \right\} + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \quad (4.22)\end{aligned}$$

Analog zum Prinzip der kleinsten Wirkung wird nun im folgenden Abschnitt aus diesem Ausdruck eine Differenzialgleichung für das Grenzflächenprofil hergeleitet.

### 4.3 Die Feldgleichung in erster Ordnung der Loop-Entwicklung

Funktionalableitung der effektiven 1-Loop-Wirkung (4.22) bezüglich des klassischen Feldes  $\varphi_C(x)$  liefert

$$\frac{\delta \Gamma_{\perp}[\varphi_C]}{\delta \varphi_C(x)} = -\frac{\delta H_{\perp}[\varphi_C]}{\delta \varphi_C(x)} + \beta^{-1} \frac{1}{2} \frac{\delta}{\delta \varphi_C(x)} \ln(\det \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_C)) + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \quad (4.23)$$

Zunächst betrachte ich den ersten Summanden auf der rechten Seite dieser Gleichung:

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta H_{\perp}[\varphi_C]}{\delta \varphi_C(x)} &= \mathbb{K}'(\phi_0)\varphi_C(x) + \frac{g_0}{2}\phi_0\varphi_C^2(x) + \frac{g_0}{3!}\varphi_C^3(x) + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= \mathbb{K}'(\phi_0)\varphi_J(x) + \frac{g_0}{2}\phi_0(x)\varphi_J^2(x) + \frac{g_0}{3!}\varphi_J^3(x) + \\
 &\quad + \beta^{-1} \underbrace{\left\{ \mathbb{K}'(\phi_0)\varphi_1(x) + g_0\phi_0(x)\varphi_J(x)\varphi_1(x) + \frac{g_0}{2}\varphi_J^2(x)\varphi_1(x) \right\}}_{= \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)\varphi_1(x)} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= \mathbb{K}'(\phi_0)\varphi_J(x) + \frac{g_0}{2}\phi_0(x)\varphi_J^2(x) + \frac{g_0}{3!}\varphi_J^3(x) + \beta^{-1}\mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)\varphi_1(x) + \mathcal{O}(\beta^{-2}).
 \end{aligned}$$

Mit der bekannten Formel

$$\ln \det A = \text{Sp} \ln A$$

schreibe ich dann den zweiten Summanden der rechten Seite von Gleichung (4.23) als

$$\begin{aligned}
 -\frac{1}{2}\text{Sp} \frac{\delta}{\delta \varphi_C(x)} \ln \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_C) &= -\frac{1}{2}\text{Sp} \mathbb{K}'^{-1}(\phi_0 + \varphi_C) \frac{\delta \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)}{\delta \varphi_C} \\
 &= -\frac{1}{2} \int d^D x' \int d^D x'' \mathbb{K}'_{x'x''}(\phi_0 + \varphi_C) \frac{\delta \mathbb{K}'_{x''x'}(\phi_0 + \varphi_C)}{\delta \varphi_C(x)}. \tag{4.24}
 \end{aligned}$$

Dabei ist  $\mathbb{K}'_{x'x''}(\phi_0 + \varphi_C)$  als  $\left( (\mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_C))^{-1} \right)_{x'x''}$  zu lesen. Führe ich die Ableitung aus, so erhalte ich

$$\begin{aligned}
 &\frac{\delta}{\delta \varphi_C(x)} \left[ \left( -\nabla^2 - \frac{m_0}{2} + \frac{g_0}{2} (\phi_0(x') + \varphi_C(x'))^2 \right) \delta(x' - x'') \right] \\
 &= g_0 (\phi_0(x') + \varphi_C(x')) \delta(x' - x) \delta(x' - x'').
 \end{aligned}$$

Die Berechnung der Integrale über  $x'$  und  $x''$  in (4.24) liefert

$$\begin{aligned}
 &g_0 \int d^D x' \int d^D x'' \mathbb{K}'_{x'x''}(\phi_0 + \varphi_C) (\phi_0(x') + \varphi_C(x')) \delta(x' - x) \delta(x' - x'') \\
 &= g_0 \int d^D x' \mathbb{K}'_{x'x}(\phi_0 + \varphi_C) (\phi_0(x') + \varphi_C(x')) \delta(x' - x) \\
 &= g_0 \mathbb{K}'_{xx}(\phi_0 + \varphi_C) (\phi_0(x) + \varphi_C(x)) \\
 &= g_0 \mathbb{K}'_{xx}(\phi_0 + \varphi_J) (\phi_0(x) + \varphi_J(x)) + \mathcal{O}(\beta^{-1}).
 \end{aligned}$$

Mit den beschriebenen Umformungen schreibe ich Gleichung (4.23) nun wie folgt:

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta \Gamma_{\perp}[\phi_C]}{\delta \phi_C(x)} &= \underbrace{\mathbb{K}'(\phi_0)\varphi_J(x) + \frac{g_0}{2}\phi_0(x)\varphi_J^2(x) + \frac{g_0}{3!}\varphi_J^3(x)}_{= J(x) \text{ siehe Gl. (4.19)}} - \\
 &\quad - \beta^{-1} \left\{ \frac{g_0}{2} \mathbb{K}'_{xx}(\phi_0 + \varphi_J) (\phi_0(x) + \varphi_J(x)) + \mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)\varphi_1(x) \right\} + \\
 &\quad + \mathcal{O}(\beta^{-2}).
 \end{aligned}$$

Laut Gleichung (1.12) darf auf der rechten Seite dieser Gleichung nur das Quellfeld  $J(x)$  stehen, so dass die geschwungene Klammer verschwinden muss. Es bleibt also in erster Ordnung eine Differenzialgleichung für  $\varphi_1$ :

$$\mathbb{K}'(\phi_0 + \varphi_J)\varphi_1(x) + \frac{g_0}{2}\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0 + \varphi_J)(\phi_0(x) + \varphi_J(x)) = 0. \quad (4.25)$$

Die Funktionalableitung an der Stelle  $\varphi_C = \bar{\varphi}$  entspricht dem Fall  $J(x) \rightarrow 0$ . Wie aus der Definition von  $J(x)$  und  $\varphi_J(x)$  in Abschnitt 4.2 hervorgeht, gilt dann  $\bar{\varphi}_J(x) \rightarrow 0$ . Demnach folgt

$$\left. \frac{\delta \Gamma_\perp[\varphi_C]}{\delta \varphi_C(x)} \right|_{\bar{\varphi}} = -\beta^{-1} \left\{ \frac{g_0}{2} \mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)(\phi_0(x)) + \mathbb{K}'(\phi_0)\bar{\varphi}_1(x) \right\} + \mathcal{O}(\beta^{-2}).$$

und statt der Differenzialgleichung (4.25) erhält man

$$\mathbb{K}'(\phi_0)\bar{\varphi}_1(x) + \frac{g_0}{2}\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)\phi_0(x) = 0. \quad (4.26)$$

Dies ist die gesuchte Feldgleichung für das Grenzflächenprofil. Um aus der Fluktuation  $\varphi(x)$  das vollständige Feld  $\phi(x)$  zu erhalten, muss lediglich die klassische Lösung addiert werden. Da  $\varphi(x)$  und  $\phi(x)$  in allen Ordnungen außer der nullten übereinstimmen, gilt für die 1-Loop-Korrektur  $\bar{\phi}_1(x) := \bar{\varphi}_1(x)$ . Damit ist das Grenzflächenprofil durch  $\bar{\phi}(x) = \phi_0(x) + \beta^{-1}\bar{\phi}_1(x) + \mathcal{O}(\beta^{-2})$  gegeben.

An dieser Stelle sei noch gezeigt, dass diese Gleichung mit dem durch Graphenberechnung in Abschnitt 4.1 gewonnenen Ergebnis konsistent ist. Anwendung des Fluktuationsoperators  $\mathbb{K}'(\phi_0)$  auf beiden Seiten von (4.18) liefert

$$\begin{aligned} \mathbb{K}'(\phi_0)\langle\varphi\rangle_\perp(x) &= -\beta^{-1}\frac{g_0}{2}\int d^D x'' \mathbb{K}'_{xx''}(\phi_0)\langle\varphi\rangle_\perp(x'')\phi_0(z) \\ &= -\beta^{-1}\frac{g_0}{2}\int d^D x' \int d^D x'' \mathbb{K}'_{xx''}(\phi_0)\mathbb{K}'_{x''x'}^{-1}(\phi_0)\mathbb{K}_{x'x'}^{-1}(\phi_0)\phi_0(z) \\ &= -\beta^{-1}\frac{g_0}{2}\int d^D x' \delta(x - x')\mathbb{K}_{x'x'}^{-1}(\phi_0)\phi_0(z') \\ &= -\beta^{-1}\frac{g_0}{2}\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)\phi_0(z). \end{aligned}$$

Der Erwartungswert der Fluktuationen  $\langle\varphi\rangle_\perp$  definiert ja gerade  $\bar{\varphi}$  und lässt sich nach Potenzen von  $\beta^{-1}$  entwickeln:

$$\langle\varphi\rangle_\perp = \beta^{-1}\bar{\phi}_1 + \mathcal{O}(\beta^{-2})$$

Damit folgt

$$\begin{aligned} \mathbb{K}'(\phi_0)\langle\varphi\rangle_\perp(x) &= -\beta^{-1}\frac{g_0}{2}\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)\phi_0(z) \\ \Leftrightarrow \beta^{-1}\mathbb{K}'(\phi_0)\bar{\phi}_1(x) &= -\beta^{-1}\frac{g_0}{2}\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)\phi_0(z) + \mathcal{O}(\beta^{-2}), \end{aligned}$$

was in erster Ordnung wiederum äquivalent ist zur Differenzialgleichung (4.26), die als Feldgleichung für die mittlere Fluktuation  $\langle\varphi\rangle_\perp$  bis zur 1-Loop-Ordnung verwendet werden kann. Damit ist die Konsistenz der Graphenberechnung mit Gl. (4.26) gezeigt.

Um die Feldgleichung besser zu verstehen und letztlich zu lösen, untersuche ich im Folgenden das Eigenwertspektrum des Operators  $\mathbb{K}(\phi_0)$ .

## 4.4 Das Spektrum des Fluktuationsoperators $\mathbb{K}(\phi_0)$

Hier betrachte ich  $\mathbb{K}(\phi_0)$  mit der um  $z = 0$  zentrierten klassischen Kink-Lösung  $\phi_0(x)$ , also

$$\begin{aligned}\mathbb{K}(\phi_0) &= -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}\phi_0^2(x) \\ &= -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g_0}{2}v_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad \Bigg| \quad v_0^2 = \frac{3m_0^2}{g_0}.\end{aligned}$$

Das Spektrum von  $\mathbb{K}(\phi_0)$  erhält man, indem man die Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned}\mathbb{K}(\phi_0)(x)\psi &= \lambda\psi(x) \\ \Leftrightarrow \left[-\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{3m_0^2}{2} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)\right]\psi(x) &= \lambda\psi(x)\end{aligned}$$

löst. Dieses Eigenwertproblem ist gut verstanden und wird z.B. in [Ho97] ausführlich behandelt. Für eine detaillierte Darstellung verweise ich auf diese Arbeit sowie die dort genannten Quellen und fasse hier lediglich die Ergebnisse zusammen.

$\mathbb{K}(\phi_0)$  lässt sich als Summe zweier Operatoren, nämlich

$$\mathbb{K}(\phi_0) = -\Delta^{(D-1)} + \tilde{\mathbb{K}}$$

schreiben, wobei der Operator

$$\tilde{\mathbb{K}} = -\partial_z^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{3m_0^2}{2} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

ausschließlich von der  $z$ -Komponente von  $x$  abhängt. Da das von mir betrachtete System in allen Richtungen außer der  $z$ -Richtung räumlich auf die Länge  $L$  begrenzt ist, also  $\vec{x} \in [0, L]^{D-1}$  gilt, erhält man für  $-\Delta^{(D-1)}$  das diskrete Spektrum

$$k^2 \text{ mit } \vec{k} = \frac{2\pi}{L}\vec{n}, \vec{n} \in \mathbb{Z}^{D-1}$$

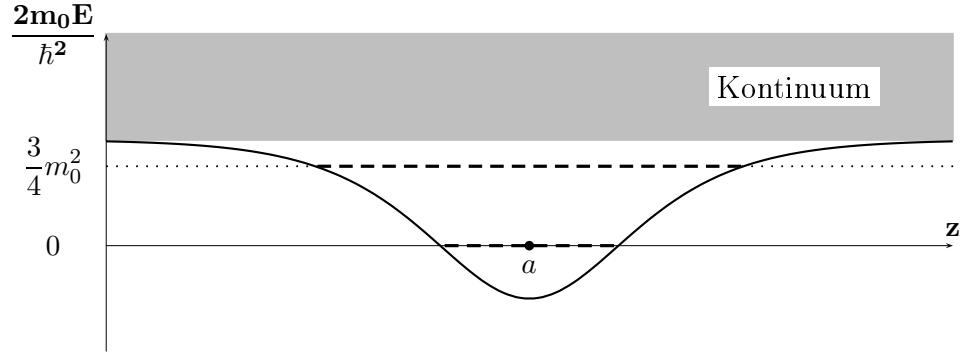
zu den Eigenfunktionen

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

Jeder Eigenwert  $k^2$  ist damit  $l$ -fach entartet, wobei sich  $l$  nach der Zahl der Kombinationen der  $n_i$  richtet, deren Quadrate summiert  $n^2 = k^2 L^2 / 4\pi^2$  ergeben.

Das Eigenwertproblem zu  $\tilde{\mathbb{K}}$  lässt sich auf ein Problem aus der Quantenmechanik, genauer gesagt eine Schrödinger-Gleichung, zurückführen:

$$\begin{aligned}\left\{-\partial_z^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{3m_0^2}{2} \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)\right\}\psi_\lambda(z) &= \lambda\psi_\lambda(z) \\ \Leftrightarrow \left\{\frac{-\hbar^2}{2m_0}\partial_z^2 - \frac{\hbar^2 m_0}{4} \left[3 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) - 1\right]\right\}\psi_\lambda(z) &= \frac{\hbar^2}{2m_0}\lambda\psi_\lambda(z).\end{aligned}$$



**Abb. 9:** Das Spektrum von  $\tilde{K}$  entspricht dem eines Teilchens im Potenzial (4.27). Es besitzt zwei gebundene Zustände sowie ein Kontinuum von Streuzuständen.

Hierbei handelt es sich um die Schrödingergleichung

$$\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(z) \right\} \psi_E(z) = E \psi_E(z)$$

mit dem Potenzial

$$V(z) = \frac{\hbar^2 m_0}{4} \left[ 3 \tanh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) - 1 \right] \quad (4.27)$$

und den Energieniveaus

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \lambda.$$

Das Spektrum weist sowohl kontinuierliche als auch zwei diskrete Eigenwerte  $\lambda$  auf und ist in Abbildung 9 dargestellt. Zur deutlichen Abgrenzung der diskreten Eigenwerte vom kontinuierlichen Spektrum bezeichne ich diese mit  $\xi_1$  und  $\xi_2$ . Es gilt also  $\lambda \in \{\xi_0, \xi_1, [\lambda_0, \lambda_\infty]\}$  mit  $\xi_0 < \xi_1 < \lambda_0$ .

Die diskreten Eigenwerte und ihre Eigenfunktionen sind

$$\begin{aligned} \xi_0 &= 0, & \psi_{\xi_0}(z) &= \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right), \\ \xi_1 &= \frac{3}{4}m_0^2, & \psi_{\xi_1}(z) &= \sqrt{\frac{3m_0}{4}} \tanh \left( \frac{m_0}{2} z \right) \operatorname{sech} \left( \frac{m_0}{2} z \right). \end{aligned}$$

Das kontinuierliche Spektrum lautet

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

$$\psi_{\lambda_p}(z) = \mathcal{N}_p e^{ipz} \left[ 2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + 3im_0 p \tanh \left( \frac{m_0}{2} z \right) \right]$$

mit der Normierungskonstanten

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

Diese ist so gewählt, dass für die Eigenfunktionen

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_{\lambda_p}^*(z) \psi_{\lambda_{p'}}(z) = \delta(p - p')$$

gilt. Mit diesen Ergebnissen lässt sich nun das Spektrum des Operators  $\mathbb{K}$  zusammenstellen. Für die Eigenwerte und Eigenfunktionen gilt dabei

$$\lambda_{\vec{n}\lambda} = \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 + \lambda, \quad \Psi_{\vec{n}\lambda}(x) = \varphi_{\vec{n}}(\vec{x}) \psi_{\lambda}(z).$$

Insgesamt erhält man das folgende Spektrum:

Diskreter Anteil:

$$\begin{aligned} \lambda_{\vec{n}\xi_0} &= \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 & \Psi_{\vec{n}\xi_0}(x) &= L^{(1-D)/2} \sqrt{\frac{3m_0}{8}} e^{i(2\pi/L)\vec{n}\cdot\vec{x}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \\ \lambda_{\vec{n}\xi_1} &= \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 + \frac{3}{4}m_0^2 & \Psi_{\vec{n}\xi_1}(x) &= L^{(1-D)/2} \sqrt{\frac{3m_0}{4}} e^{i(2\pi/L)\vec{n}\cdot\vec{x}} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}\left(\frac{m_0}{2}z\right) \end{aligned}$$

Kontinuierlicher Anteil:

$$\begin{aligned} \lambda_{\vec{n}\lambda_p} &= \frac{4\pi^2}{L^2} n^2 + m_0^2 + p^2 \\ \Psi_{\vec{n}\lambda_p}(x) &= L^{(1-D)/2} \mathcal{N}_p e^{i(2\pi/L)\vec{n}\cdot\vec{x}} e^{ipz} \left[ 2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + 3im_0 p \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \end{aligned}$$

Hier sieht man, dass  $\mathbb{K}(\phi_0)$ , wie in den vorangegangenen Abschnitten dieses Kapitels bereits erwähnt und berücksichtigt wurde, mit  $\lambda_{\vec{0}\xi_0}$  eine Nullmode aufweist, nämlich

$$\Psi_{\vec{0}\xi_0}(x) = L^{(1-D)/2} \sqrt{\frac{3m_0}{8}} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

## 4.5 Die Feldgleichung mit explizitem $\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)$

In die Differenzialgleichung für das Grenzflächenprofil (4.26) geht der inverse Fluktuationsooperator in Form des Ausdrucks  $\mathbb{K}'_{xx}^{-1}(\phi_0)$  ein. Nachdem im letzten Abschnitt das Spektrum von  $\mathbb{K}(\phi_0)$  bestimmt wurde, lässt sich dieser nun berechnen. Zunächst bestimme ich dafür ganz allgemein den Operatorkern  $\mathbb{K}'_{xx'}^{-1}(\phi_0)$ , um mich dann schließlich auf den Fall zusammenfallender Argumente  $x = x'$  zu konzentrieren.

Ein beliebiger Operator  $A$  besitze ein Spektrum mit diskreten und kontinuierlichen Anteilen. Seine Eigenwerte heißen  $\lambda$  und die dazugehörigen Eigenfunktionen  $\psi_\lambda$ . Dann gilt für seinen Kern

$$A_{xx'} = \sum_{\lambda} \psi_\lambda(x) \psi_\lambda^*(x') \lambda.$$

Für den Kern seines Inversen  $A^{-1}$  gilt die Gleichung

$$A_{xx'}^{-1} = \sum_{\lambda} \psi_\lambda(x) \psi_\lambda^*(x') \frac{1}{\lambda}.$$

Mit den Eigenwerten und -funktionen aus Abschnitt 4.4 erhalte ich den Ausdruck

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{xx'}'^{-1}(\phi_0) = & L^{1-D} \left\{ \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2} \frac{3m_0}{8} e^{i(2\pi/L)\vec{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z'\right) + \right. \\ & + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4}m_0^2} \frac{3m_0}{4} e^{i(2\pi/L)\vec{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \frac{\tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_0}{2}z'\right)}{\cosh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \cosh\left(\frac{m_0}{2}z'\right)} + \\ & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} e^{i(2\pi/L)\vec{n} \cdot (\vec{x} - \vec{x}')} \psi_{\lambda_p}(z) \psi_{\lambda_p}^*(z') \right\}. \end{aligned}$$

Für zusammenfallende Argumente  $x = x'$  ergibt sich demnach

$$\begin{aligned} \mathbb{K}_{xx'}'^{-1}(\phi_0) = & L^{1-D} \left\{ \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2} \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \right. \\ & + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4}m_0^2} \frac{3m_0}{4} \frac{\tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)}{\cosh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)} + \\ & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} |\psi_{\lambda_p}(z)|^2 \right\}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Zur besseren Übersicht ordne ich alle Beiträge zu  $\mathbb{K}_{xx'}'^{-1}(\phi_0)$  nach Potenzen von  $\operatorname{sech}(m_0 z/2)$ . Das Betragsquadrat  $|\psi_{\lambda_p}(z)|^2$  schreibe ich dazu folgendermaßen:

$$\begin{aligned} |\psi_{\lambda_p}(z)|^2 &= \mathcal{N}_p^2 \left| \left( 2p^2 + \frac{m_0^2}{2} - \frac{3}{2}m_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + 3im_0 p \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right) \right|^2 \\ &= \mathcal{N}_p^2 \left\{ 4p^4 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4 - 3(m_0^4 + m_0^2 p^2) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \frac{9}{4}m_0^4 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} - \mathcal{N}_p^2 \left\{ 3(m_0^4 + m_0^2 p^2) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) - \frac{9}{4}m_0^4 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right\}. \end{aligned}$$

Eingesetzt in (4.28) ergibt das

$$\begin{aligned}
 \mathbb{K}_{xx}'^{-1}(\phi_0) = & L^{1-D} \left\{ \sum_{\vec{n} \neq \vec{0}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2} \frac{3m_0}{8} \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + \right. \\
 & + \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4} m_0^2} \frac{3m_0}{4} \frac{\tanh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right)}{\cosh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right)} - \\
 & - \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \mathcal{N}_p^2 \times \\
 & \times \left[ 3 (m_0^4 + m_0^2 p^2) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) - \frac{9}{4} m_0^4 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \right] \\
 & \left. + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \right\}.
 \end{aligned}$$

Insgesamt kann man also

$$\begin{aligned}
 \mathbb{K}_{xx}'^{-1}(\phi_0) = & C_0 + C_1 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + C_2 \frac{\tanh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right)}{\cosh^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right)} + C_3 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + C_4 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) \\
 = & C_0 + (C_1 + C_4 - C_2) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right) + (C_2 + C_3) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_0}{2} z \right)
 \end{aligned}$$

schreiben, wobei ich die Summen und Integrale zu den Koeffizienten  $C_i$  zusammengefasst habe. Diese sind entsprechend definiert als

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

Die nichttriviale Berechnung der Koeffizienten wird später in Kapitel 5.2 erfolgen. Um den Ausdruck für  $\mathbb{K}_{xx}'^{-1}(\phi_0)$  noch übersichtlicher zu schreiben, verwende ich die Definitionen

$$\tilde{C}_0 = \frac{g_0}{2} v_0 C_0 \tag{4.29}$$

$$\tilde{C}_1 = \frac{g_0}{2} v_0 (C_1 + C_4 - C_2) \tag{4.30}$$

$$\tilde{C}_2 = \frac{g_0}{2} v_0 (C_2 + C_3). \tag{4.31}$$

Damit nimmt die Differenzialgleichung (4.26) eine überschaubare Form an:

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{K}(\phi_0)\bar{\varphi}_1(x) + \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \left[ \tilde{C}_1 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \tilde{C}_2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \tilde{C}_0 \right] = 0 \\
 \Leftrightarrow & \left[ -\nabla^2 - \frac{m_0^2}{2} + \frac{g}{2}v_0^2 \tanh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \right] \bar{\varphi}_1(x) + \\
 & + \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \left[ \tilde{C}_1 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \tilde{C}_2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \tilde{C}_0 \right] = 0. \tag{4.32}
 \end{aligned}$$

Im Folgenden soll nun eine Lösung dieser Gleichung gefunden werden.

# 5 Lösung der Feldgleichung

Bei Gleichung (4.26) handelt es sich um eine inhomogene lineare Differenzialgleichung. Der Lösungsraum einer solchen ist i. Allg. ein zur Lösungsmenge der homogenen Gleichung affiner Raum, wobei dessen Stützvektor durch eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung gegeben ist. Durch die Einschränkung der Störungsrechnung auf  $N^\perp$  besitzt die Gleichung jedoch keine homogene Lösung, denn

$$\mathbb{K}'(\phi_0)\bar{\phi}_1(x) = 0,$$

würde bedeuten, dass  $\mathbb{K}'(\phi_0)$  mindestens eine Nullmode besitzt, was per Konstruktion gerade ausgeschlossen ist. Damit gibt es auf  $N^\perp$  wenn überhaupt nur *eine* inhomogene Lösung. Diese ließe sich zum Beispiel mit Hilfe der Greens-Funktion  $\mathbb{K}'^{-1}(\phi_0)$  konstruieren, womit man wieder genau bei der Graphenberechnung von  $\langle \varphi \rangle$  (4.18) angelangt wäre. Deutlich einfacher zum Ziel führt aber eine andere Methode: die Variation der Konstanten. Um die Lösung zu finden, betrachte ich dabei zunächst eine Erweiterung der Gleichung (4.26) auf den gesamten Raum der Fluktuationen, nämlich

$$\mathbb{K}(\phi_0)\bar{\phi}_1(x) = \frac{g_0}{2}\mathbb{K}'^{-1}(\phi_0)\phi_0(z).$$

Jede spezielle Lösung dieser Gleichung ließe sich nötigenfalls durch Addition eines Vielfachen von  $\Psi_{0\xi_0}$  auf die spezielle Lösung aus  $N^\perp$  verschieben. Per Variation der Konstanten erhält man jedoch direkt eine zur Nullmode senkrechte Lösung, wie sich im folgenden Abschnitt zeigen wird.

## 5.1 Variation der Konstanten

Sei  $\bar{\phi}_1 = y_0$  eine Lösung der homogenen Differenzialgleichung

$$\mathbb{K}(\phi_0)y_0 = 0 \Rightarrow -y_0'' - \frac{m_0^2}{2}y_0 - \frac{g_0}{2}\phi_0^2y_0 = 0. \quad (5.1)$$

Dann gilt für eine Funktion  $\bar{\phi} = y_0f$  mit einer beliebigen Funktion  $f$

$$\begin{aligned} \mathbb{K}(\phi_0)(y_0f) &= -y_0''f - 2y_0'f' - y_0f'' - \frac{m_0^2}{2}y_0f + \frac{g}{2}\phi_0^2y_0f \\ &= \underbrace{\left(-y_0'' - \frac{m_0^2}{2}y_0 + \frac{g_0}{2}\phi_0^2y_0\right)}_{=0, \text{ siehe Gl. (5.1)}} f - 2y_0'f' - y_0f''. \end{aligned}$$

Eine Lösung der homogenen Gleichung ist die Nullmode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}(z)$ . Ich wähle deshalb

$$y_0 = \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \sim \Psi_{\vec{0}\xi_0}(z)$$

und erhalte so

$$\mathbb{K}(\phi_0)(y_0 f) = 2m_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) f' - \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) f''. \quad (5.2)$$

Wenn es gelingt, eine Funktion  $f(x)$  zu finden, für welche die rechte Seite von Gleichung (5.2) genau dem Negativen der Inhomogenität in der Differenzialgleichung (4.32) entspricht, so ist eine spezielle Lösung bestimmt.

Die Inhomogenität besteht aus drei Summanden. Gesucht sind deshalb drei Ansatzfunktionen  $h(z)$ ,  $k(z)$  und  $l(z)$ , so dass  $\mathbb{K}(\phi_0)y_0h(z)$ ,  $\mathbb{K}(\phi_0)y_0k(z)$  und  $\mathbb{K}(\phi_0)y_0l(z)$  jeweils einen dieser Summanden ergeben. Die Funktion  $\bar{\phi}(z) = y_0(h(z) + k(z) + l(z))$  ist dann eine spezielle Lösung.

Der erste Summand der Inhomogenität ist proportional zu  $\tanh(m_0z/2) \operatorname{sech}^4(m_0z/2)$ . Mit dem Ansatz  $h(z) = A \tanh(m_0z/2)$ , erhalte ich wegen

$$h' = A \frac{m_0}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) \quad \text{und} \quad h'' = -A \frac{m_0^2}{2} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

aus Gleichung (5.2)

$$\mathbb{K}(\phi_0)(y_0 h) = \frac{3}{2} A m_0^2 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Der zweite Summand ist proportional zu  $\tanh(m_0z/2) \operatorname{sech}^2(m_0z/2)$ . Der Ansatz  $f(x) = k(z) = Bz$  mit  $k' = B$  und  $k'' = 0$ , ergibt

$$\mathbb{K}(\phi_0)(y_0 k) = 2Bm_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Den dritten Summanden, proportional zu  $\tanh(m_0z/2)$ , erhalte ich mit dem Ansatz

$$l(z) = \frac{C}{m_0^2} \left( \cosh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \sinh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \frac{m_0}{2}z \right).$$

Dann folgt nämlich

$$l' = \frac{C}{m_0} \cosh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

und

$$l'' = C \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \cosh^2\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Eingesetzt in Gl. (5.2) ergibt sich damit

$$\mathbb{K}(\phi_0)(y_0 l) = C \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Das heißt, eine Funktion  $\bar{\phi}_1 = y_0(h + k + l)$  liefert

$$\begin{aligned}\mathbb{K}(\phi_0)\bar{\phi}_1 &= \mathbb{K}(\phi_0)y_0(h + k + l) \\ &= \frac{3}{2}Am_0^2 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right) + 2Bm_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \\ &\quad + C \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right).\end{aligned}$$

Durch Koeffizientenvergleich mit Gleichung (4.32) bestimme ich

$$A = -\frac{2\tilde{C}_1}{3m_0^2}, \quad B = -\frac{\tilde{C}_2}{2m_0}, \quad C = -\tilde{C}_0$$

und erhalte so die spezielle Lösung

$$\bar{\phi}_1(z) = -\left[\frac{2\tilde{C}_1}{3m_0^2} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) + \left(\frac{\tilde{C}_0}{m_0^2} + \frac{\tilde{C}_2}{m_0^2}\right) \left(\frac{m_0}{2}z\right)\right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right) - \frac{\tilde{C}_0}{m_0^2} \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right). \quad (5.3)$$

Diese Lösung ist offensichtlich aus  $N^\perp$ , da alle Summanden von  $\bar{\phi}_1(z)$  ungerade sind, die Nullmode  $\Psi_{\vec{0}\xi_0}(z)$  jedoch gerade. Damit folgt

$$(\bar{\phi}_1, \Psi_{\vec{0}\xi_0}) = 0 \Leftrightarrow \bar{\phi}_1 \perp \Psi_{\vec{0}\xi_0}.$$

Mit (5.3) ist das Grenzflächenprofil nun im Prinzip bekannt: Es hat die Form  $\bar{\phi}(z) = \phi_0(z) + \beta^{-1}\bar{\phi}_1(z) + \mathcal{O}(\beta^{-2})$ . Allerdings lassen sich keine näheren Aussagen über die Eigenschaften des Profils machen, ohne die darin auftretenden Koeffizienten  $\tilde{C}_i$  zu berechnen.

## 5.2 Berechnung der Koeffizienten $C_i$ und $\tilde{C}_i$

An dieser Stelle soll die Berechnung der aus Abschnitt 4.5 bekannten Koeffizienten  $C_i$  erfolgen. Die  $C_i$  enthalten Divergenzen, die sich mit Hilfe dimensionaler Regularisierung in  $D = 3 - \epsilon$  Dimensionen herausstellen und adäquat behandeln lassen. In die Differenzialgleichung (4.32), also folglich auch in das Grenzflächenprofil  $\bar{\phi}$ , fließen die  $C_i$  in Form der drei in den Gln. (4.29) bis (4.31) definierten  $\tilde{C}_i$  ein. Wie sich in diesem Abschnitt zeigen wird, kombinieren sie dabei gerade so, dass sich ihre divergenten Anteile gegenseitig aufheben. Damit sind die physikalisch relevanten  $\tilde{C}_i$  letztlich allesamt endlich.

Der Koeffizient  $C_0$  lässt sich wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned}
 C_0 &= \frac{1}{2\pi L^{D-1}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \\
 &= \frac{1}{2\pi L^{D-3}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_0^{\infty} dt e^{-(m_0^2 + p^2)L^2 t} \sum_{\vec{n}} e^{-4\pi^2 n^2 t} \\
 &\quad \left| \begin{array}{l} \text{Substitution: } v := \frac{p}{m_0} \\ [Ho97]: (5.118) \end{array} \right. \\
 &= \frac{m_0}{L^{D-3}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{2\pi} \int_0^{\infty} dt e^{-(1+v^2)m_0^2 L^2 t} \sum_{\vec{n}} e^{-4\pi^2 n^2 t} \\
 &= -\frac{m_0}{4\pi} + \mathcal{O}\left(\frac{e^{-m_0 L}}{m_0 L}\right) + \mathcal{O}(\epsilon).
 \end{aligned}$$

Im Limes  $\epsilon \rightarrow 0$  und unter Vernachlässigung von Fehlern der Ordnung  $\exp(-m_0 L)/m_0 L$  erhalte ich so das Ergebnis

$$C_0 = -\frac{m_0}{4\pi} \quad \Rightarrow \quad \tilde{C}_0 = -\frac{g_0 v_0}{2} \frac{m_0}{4\pi}. \quad (5.4)$$

Bei der Berechnung von  $C_1$  tritt ein Pol in  $\epsilon$  auf:

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \frac{1}{L^{D-1}} \sum_{\vec{n} \neq 0} \frac{L^2}{4\pi n^2} \frac{3m_0}{8} = \frac{3m_0}{8L^{D-3}} \int_0^{\infty} dt \sum_{\vec{n} \neq 0} e^{-4\pi^2 n^2 t} \\
 &= \frac{3m_0}{8L^{D-3}} \left\{ \int_0^{\infty} dt \left[ \sum_{\vec{n} \neq 0} e^{-4\pi^2 n^2 t} - \theta(1-t) \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{D-1}{2}}} \right] + \int_0^1 dt \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{D-1}{2}}} \right\}.
 \end{aligned}$$

Die Integration über  $t$  lässt sich auswerten zu (siehe C.11 bis C.18 sowie 5.279 bei [Ho97])

$$\begin{aligned}
 Z_{0,0} &:= \int_0^{\infty} dt \left[ \sum_{\vec{n} \neq 0} e^{-4\pi^2 n^2 t} - \theta(1-t) \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{D-1}{2}}} \right] \\
 &= \frac{1}{2\pi} \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)} \right) + \frac{\gamma}{4\pi}.
 \end{aligned}$$

Mit  $D = 3 - \epsilon$  erhalte ich dann

$$C_1 = \frac{3}{8} m_0 L^\epsilon Z_{0,0} + \frac{3}{8} m_0 L^\epsilon \int_0^1 dt \frac{1}{(4\pi t)^{1-\epsilon/2}}.$$

Der divergente Anteil lässt sich in der Form

$$\int_0^1 dt \frac{1}{(4\pi t)^{1-\epsilon/2}} = \frac{1}{2\pi\epsilon} + \frac{\ln(4\pi)}{4\pi} + \mathcal{O}(\epsilon)$$

darstellen. Damit erhalte ich insgesamt den Ausdruck

$$C_1 = \frac{3}{8}m_0L^\epsilon Z_{0,0} + \frac{3}{8}m_0L^\epsilon \left\{ \frac{1}{2\pi\epsilon} + \frac{\ln(4\pi)}{4\pi} + \mathcal{O}(\epsilon) \right\}.$$

Nach dem selben Schema fahre ich mit der Berechnung von  $C_2$  fort und finde

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{1}{L^{D-1}} \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + \frac{3}{4}m_0^2} \frac{3m_0}{4} \\ &= \frac{3m_0}{4} \frac{1}{L^{D-1}} \sum_{\vec{n}} \frac{L^2}{4\pi^2 n^2 + \frac{3}{4}m_0^2 L^2} \\ &= \frac{3m_0}{4L^{D-3}} \int_0^\infty dt e^{-\frac{3}{4}m_0^2 L^2 t} \sum_{\vec{n}} e^{-4\pi^2 n^2 t} \\ &= \frac{3m_0}{4L^{D-3}} \int_0^\infty dt e^{-\frac{3}{4}m_0^2 L^2 t} \underbrace{\left[ \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-4\pi^2 n^2 t} \right]^{D-1}}_{= A^{D-1}(4\pi t)}. \end{aligned}$$

Dabei ist  $A(t)$  mit Hilfe der Jacobi'schen-Thetafunktion

$$\vartheta(z, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\pi n^2 \tau + 2\pi i n z}$$

definiert:

$$A(t) = \vartheta(0, it) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\pi n^2 t}.$$

Unter Ausnutzung der Transformationseigenschaften der Theta-Funktion schreibe ich

$$A^{D-1}(4\pi t) = (4\pi t)^{(1-D)/2} A^{D-1} \left( \frac{1}{4\pi t} \right)$$

und erhalte so

$$C_2 = \frac{3m_0}{4L^{D-3}} \int_0^\infty dt e^{-\frac{3}{4}m_0^2 L^2 t} \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{D-1}{2}}} \sum_{\vec{n}} e^{-n^2/4t}.$$

Mit  $D = 3 - \epsilon$  und nach expliziter Herausstellung des divergenten Anteils wird daraus

$$\begin{aligned} C_2 &= \frac{3}{4}m_0L^\epsilon \left\{ \int_0^\infty dt \left[ e^{-\frac{3}{4}m_0^2 L^2 t} \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^2} e^{-4\pi^2 n^2 t} - \frac{\theta(1-t)}{(4\pi t)^{1-\epsilon/2}} \right] + \int_0^1 dt \frac{1}{(4\pi t)^{\epsilon/2}} \right\} \\ &= \frac{3}{4}m_0L^\epsilon \left\{ -\frac{1}{4\pi} \left[ \gamma + \ln \left( \frac{3}{4}m_0^2 L^2 \right) \right] + \int_0^1 dt \frac{1}{(4\pi t)^{1-\epsilon/2}} + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{2}m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Die Divergenz hat die bereits aus der Berechnung von  $C_1$  bekannte Struktur. Unter Verwendung des dort gefundenen Ergebnisses erhalte ich zunächst

$$\int_0^1 dt \frac{1}{(4\pi t)^{1-\epsilon/2}} = \frac{1}{2\pi\epsilon} \frac{\ln(4\pi)}{4\pi} + \mathcal{O}(\epsilon),$$

und damit insgesamt

$$C_2 = \frac{3}{4} m_0 L^\epsilon \left\{ -\frac{1}{4\pi} \left[ \gamma + \ln \left( \frac{3}{4} m_0^2 L^2 \right) \right] + \frac{1}{2\pi\epsilon} + \frac{\ln(4\pi)}{4\pi} + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-\frac{\sqrt{3}^4}{2} m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) \right\} + \mathcal{O}(\epsilon).$$

Die Berechnung von  $C_3$  liefert

$$C_3 = -\frac{3}{L^{D-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \sum_{\vec{n}} \frac{m_0^4 + m_0^2 p^2}{\left( \frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2 \right) (4p^4 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4)}.$$

Mit der Substitution  $v = p/m_0$  wird daraus

$$\begin{aligned} C_3 &= -\frac{3m_0}{L^{D-1}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{2\pi} \frac{1+v^2}{4v^4 + 5v^2 + 1} \underbrace{\sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + m_0^2 v^2}}_{=: D_1 \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{1+v^2} m_0 L \right)} . \end{aligned}$$

Der Summenterm  $D_1((2/\sqrt{3})\sqrt{1+v^2} m_0 L)$  lässt sich auswerten zu (siehe [Ho97])

$$D_1 \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{1+v^2} m_0 L \right) = \frac{1}{2\pi\epsilon} - \frac{1}{4\pi} \left[ \gamma + \ln \left( \frac{3}{16\pi} \right) \right] - \frac{\ln \left( \frac{2}{\sqrt{3}} \right)}{2\pi} - \frac{\ln(m_0 L)}{2\pi} - \frac{\ln(1+v^2)}{4\pi}.$$

Mit den beiden Integralen

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

und

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

von denen letzteres mit Hilfe des Programms Maple ([MAP]) berechnet wurde, erhalte ich für  $D = 3 - \epsilon$

$$C_3 = -\frac{3m_0}{2\pi} L^\epsilon \left( \frac{1}{4\epsilon} - \frac{\ln(m_0 L)}{4} - \frac{1}{8} [\gamma - \ln(4\pi)] - \frac{\ln(\frac{3}{2})}{4} + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right).$$

Den verbleibenden Koeffizienten  $C_4$  bestimme ich zu

$$\begin{aligned}
 C_4 &= \frac{1}{L^{D-1}} \frac{9}{4} m_0^4 \int_{-\infty}^{\infty} dp \mathcal{N}_p^2 \sum_{\vec{n}} \frac{1}{\frac{4\pi^2 n^2}{L^2} + m_0^2 + p^2} \\
 &= \frac{9}{4} \frac{m_0^4}{L^{D-3}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \mathcal{N}_p^2 \int_0^{\infty} dt e^{-(m_0^2 + p^2)L^2 t} \sum_{\vec{n}} e^{-4\pi^2 n^2 t} \\
 &\quad \left| \begin{array}{l} \text{Substitution: } v := \frac{p}{m_0}, \\ \mathcal{N}_p^2 = [2\pi (4p^4 + 5m_0^2 p^2 + m_0^4)]^{-1} = m_0^{-4} [2\pi (4v^4 + 5v^2 + 1)]^{-1} \end{array} \right. \\
 &= \frac{9}{4} \frac{m_0}{L^{D-3}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dv}{2\pi} \frac{D_1\left(\frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{1+v^2}m_0L\right)}{4v^4 + 5v^2 + 1}.
 \end{aligned}$$

Mit den beiden Integralen

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

von denen ich letzteres erneut mit Maple berechnet habe, erhalte ich damit für  $D = 3 - \epsilon$  den Ausdruck

$$\begin{aligned}
 C_4 &= \frac{9}{8\pi} m_0 L^\epsilon \left[ \frac{1}{6\epsilon} - \frac{\ln(m_0 L)}{6} - \frac{1}{12} [\gamma - \ln(4\pi)] + \frac{\ln\left(\sqrt{\frac{8}{9}}\right)}{3} + \mathcal{O}\left(\frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}}\right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right] \\
 &= \frac{3}{8\pi} m_0 L^\epsilon \left[ \frac{1}{2\epsilon} - \frac{\ln(m_0 L)}{2} - \frac{1}{4} [\gamma - \ln(4\pi)] + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{8}{9}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}}\right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right].
 \end{aligned}$$

Nun, da alle  $C_i$  bestimmt und die auftretenden Divergenzen isoliert wurden, lassen sie sich zu Ausdrücken für die  $\tilde{C}_i$  kombinieren.

Die Größe  $\tilde{C}_1$  ist im Wesentlichen die Summe  $C_1 + C_4 - C_2$ . Interessant ist nun, wie sich die Divergenzen der drei beteiligten Größen auf  $\tilde{C}_1$  auswirken. Ich führe die Berechnung in zwei Schritten durch und addiere zunächst  $C_1$  und  $C_4$ :

$$\begin{aligned}
 C_1 + C_4 &= \frac{3}{8\pi} m_0 L^\epsilon \left\{ \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right) + \frac{\gamma}{4} + \frac{1}{2\epsilon} + \frac{\ln(4\pi)}{4} + \mathcal{O}(\epsilon) - \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{2\epsilon} - \frac{\ln(m_0 L)}{2} - \frac{1}{4} [\gamma - \ln(4\pi)] + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{8}{9}\right) - \mathcal{O}\left(\frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}}\right) \right\} \\
 &= \frac{3}{8\pi} m_0 L^\epsilon \left\{ \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2\left(\frac{1}{4}\right)}\right) + \frac{1}{\epsilon} + \frac{\ln(4\pi)}{2} - \frac{\ln(m_0 L)}{2} + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{8}{9}\right) + \right. \\
 &\quad \left. + \mathcal{O}\left(\frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}}\right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right\}.
 \end{aligned}$$

Von diesem Ergebnis subtrahiere ich dann  $C_2$  und erhalte

$$\begin{aligned}
 C_1 + C_4 - C_2 &= \frac{3}{8\pi} m_0 L^\epsilon \left\{ \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \frac{\ln(4\pi)}{2} + \frac{1}{\epsilon} - \frac{\ln(m_0 L)}{2} + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{8}{9} \right) + \right. \\
 &\quad + \frac{1}{2} \left[ \gamma + \ln \left( \frac{3}{4} m_0^2 L^2 \right) \right] - \frac{1}{\epsilon} + 2 \frac{\ln(4\pi)}{2} + \\
 &\quad \left. + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{2} m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right\} \\
 &= \frac{3}{16\pi} m_0 L^\epsilon \left\{ \ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \ln(m_0 L) + \gamma + \ln \left( \frac{2}{3} \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{2} m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right\}.
 \end{aligned}$$

Die divergenten Terme heben sich also gerade gegenseitig auf. Betrachte ich den Limes  $\epsilon \rightarrow 0$  und vernachlässige dabei Terme der Ordnung  $\exp(-\sqrt{3} m_0 L/2)/\sqrt{m_0 L}$ , so erhalte ich

$$\begin{aligned}
 \frac{2}{gv_0} \tilde{C}_1 &= C_1 + C_4 - C_2 = \frac{3}{16\pi} m_0 \left\{ \underbrace{\ln \left( \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma^2(\frac{1}{4})} \right) + \gamma + \ln \left( \frac{2}{3} \right)}_{=: \alpha} + \ln(m_0 L) \right\} \\
 &= \frac{3}{16\pi} m_0 \{ \alpha + \ln(m_0 L) \}. \tag{5.5}
 \end{aligned}$$

An dieser Stelle ist insbesondere zu bemerken, dass  $\tilde{C}_1$  logarithmisch von der Systemgröße  $L$  abhängt. In Abschnitt 6.2 wird deutlich werden, dass genau dieser Zusammenhang das Roughening der Grenzfläche beschreibt. Um die Konstante  $\alpha$  und vor allem ihre Größe relativ zum Beitrag der Systemgröße  $\ln(m_0 L)$  etwas greifbarer zu machen, gebe ich ihren ungefähren numerischen Wert an:

$$\alpha = \ln \left( \frac{2\sqrt{\pi}}{3\Gamma^2(1/4)} \right) + \gamma \approx -1.832.$$

Die Größe  $\tilde{C}_2$  ist im wesentlichen die Summe von  $C_2$  und  $C_3$  und lässt sich zu

$$\begin{aligned}
 C_2 + C_3 &= \frac{3}{4} m_0 L^\epsilon \left\{ -\frac{1}{4\pi} \left[ \gamma + \ln \left( \frac{3}{4} m_0^2 L^2 \right) \right] + \frac{1}{2\pi\epsilon} + \frac{\ln(4\pi)}{4\pi} + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{2} m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) \right\} - \\
 &\quad - \frac{3m_0}{2\pi} L^\epsilon \left\{ \frac{1}{4\epsilon} - \frac{\ln(m_0 L)}{4} - \frac{1}{8} [\gamma - \ln(4\pi)] - \frac{\ln(\frac{3}{2})}{4} + \right. \\
 &\quad \left. + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right\} \\
 &= \frac{3m_0 L^\epsilon}{8\pi} \left( \ln \left( \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3}{4} \right) + \mathcal{O} \left( \frac{e^{-\frac{\sqrt{3}}{2} m_0 L}}{\sqrt{m_0 L}} \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \right)
 \end{aligned}$$

berechnen. Wie man sieht, heben sich auch diesmal die Divergenzen der beiden Summanden gegenseitig auf, so dass eine endliche Summe bleibt. Im Grenzfall  $\epsilon \rightarrow 0$  und unter Vernachlässigung von Termen der Ordnung  $\exp(-\sqrt{3}/2)/\sqrt{m_0 L}$  ergibt sich dann

$$\frac{2}{gv_0} \tilde{C}_2 = C_2 + C_3 = 3m_0 \frac{\ln(3)}{16\pi}. \quad (5.6)$$

Mit der Berechnung der  $\tilde{C}_i$  sind die im Grenzflächenprofil (5.3) auftretenden Größen allesamt auf  $L$ ,  $m_0$  und  $g_0$  zurückgeführt. Bei den beiden letzten Größen handelt es sich jedoch um „nackte Größen“, die erst nach erfolgter Renormierung durch physikalische Größen ausgedrückt werden können. Dies ist Gegenstand des folgenden Abschnittes.

## 5.3 Renormierung

Das Grenzflächenprofil soll nun in Abhängigkeit von den physikalischen Größen bestimmt werden. Dies sind, neben der Systemgröße  $L$ , die Korrelationslänge  $m_R^{-1}$  und die renormierte Kopplung  $g_R$ . Die Renormierung der  $\phi^4$ -Störungstheorie in drei Dimensionen wurde von Gutsfeld, Küster und Münster ([GKM96]) für die symmetrische und die gebrochene Phase bis zur 3-Loop-Ordnung durchgeführt. Ich übernehme das dort verwendete Renormierungsschema und die Ergebnisse bis zur 1-Loop-Ordnung, der Ordnung meiner Rechnung. In den folgenden beiden Abschnitten stelle ich das Schema vor und führe die Beziehungen zwischen den nackten Größen und ihren renormierten Gegenstücken an. Im Anschluss daran nutze ich diese Relationen, um das berechnete Grenzflächenprofil durch die physikalischen Größen auszudrücken.

### 5.3.1 Renormierungsschema

Die renormierte Masse ist definiert durch die Beziehung

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

Dabei ist  $\Gamma_0^{(2)}(p)$  die Fourier-Transformierte der zweiten Funktionalableitung der effektiven Wirkung  $\Gamma[\phi_C]$ .

Mit der Definition der Korrelationslänge als zweites Moment des 2-Punkt-Korrelators

$$\xi^2 = -\left. \frac{\partial G_C^{(2)}(p)}{\partial p^2} / G_C^{(2)}(p) \right|_{p=0}$$

und der Relation  $-\Gamma_0^{(2)} = (G_C^{(2)})^{-1}$  (siehe Gl. (1.15)) folgt dann

$$m_R^2 = \frac{1}{\xi^2}.$$

Demnach entspricht die renormierte Masse der inversen Korrelationslänge.

Die Feldrenormierung ist durch die Gleichung

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

definiert.

Das renormierte Gegenstück zu der bereits in Gl. (4.11) eingeführten dimensionslosen Kopplung  $u_0$  definiert man über die Relation

$$g_R = m_R^{4-D} u_R$$

und erhält so für  $D = 3$

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

### 5.3.2 Die renormierten Größen

Der Vakuumerwartungswert des Feldes geht in großer Entfernung zum Grenzflächenzentrum, also für  $z \rightarrow \pm\infty$ , in den Erwartungswert der Theorie mit ortsunabhängigem Vakuum über. Dieser ist durch  $\langle \phi \rangle = \pm v$  gegeben, wobei die Vorzeichen in den Grenzfällen  $\pm\infty$  durch die Orientierung der Grenzfläche bestimmt sind. Durch thermische Fluktuationen unterscheidet sich  $v$  von der entsprechenden Größe der Mean-Field-Theorie  $v_0$  (siehe Gl. (4.11)). Es gilt

$$v = v_0 + \langle \varphi \rangle = v_0 + \frac{u_0}{8\pi} v_0 = v_0 \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}.$$

Berücksichtigt man zudem die Feldrenormierung, so erhält man

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

Zwischen der nackten Kopplung  $g_0$  und ihrem renormierten Gegenstück  $g_R$  gilt in Ein-Schleifen-Approximation folgende Beziehung:

$$g_0 = g_R \left\{ 1 + \frac{7}{4} \frac{u_R}{8\pi} \right\}.$$

Für die Quadrate der Massen findet man die Relation

$$m_0^2 = m_R^2 \left\{ 1 - \frac{3}{8} \frac{u_R}{8\pi} \right\}. \quad (5.7)$$

Um eine Beziehung für die Massen  $m_0$  und  $m_R$  zu finden, die im Rahmen der Näherung gültig ist, ziehe ich auf beiden Seiten von Gl. (5.7) die Wurzel und entwickle die rechte Seite nach Potenzen von  $u_R$ . Auf diesem Wege erhalte ich

$$m_0 = m_R \sqrt{1 - \frac{3}{8} \frac{u_R}{8\pi}} = m_R \left\{ 1 - \frac{3}{16} \frac{u_R}{8\pi} \right\} + \mathcal{O}(u_R^2).$$

Ähnlich wie mit den Massen muss auch mit der Feldrenormierung  $Z_R$  verfahren werden. Diese ist in 1-Loop-Näherung gegeben als

$$Z_R = 1 - \frac{1}{8} \frac{u_R}{8\pi},$$

tritt in den Rechnungen jedoch in der Form  $Z_R^{-1/2}$  auf. Erneut führe ich deshalb eine Entwicklung in Potenzen von  $u_R$  durch und erhalte

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

Im nächsten Abschnitt werden nun die nackten Größen im Grenzflächenprofil durch ihre physikalischen Gegenstücke ausgedrückt.

### 5.3.3 Das Grenzflächenprofil ausgedrückt durch renormierte Größen

Zuerst drücke ich das Mean-Field-Profil  $\phi_0$  durch renormierte Größen aus. Da  $m_0$  im Argument des Tangens hyperbolicus auftritt, muss dieser nach Potenzen der dimensionlosen Kopplung  $u_R$  entwickelt werden. Insgesamt erhalte ich

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_0(z) &= v_0 \tanh\left(\frac{m_0}{2}z\right) = v_0 \tanh\left(\frac{m_R}{2}z - \frac{3}{16} \frac{u_R}{8\pi} \left(\frac{m_R}{2}z\right) + \mathcal{O}(u_R^2)\right) \\ &= v_0 \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{3}{16} \frac{u_R}{8\pi} \left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}. \end{aligned}$$

Die in Abschnitt 5 berechnete Korrektur des Grenzflächenprofils  $\bar{\phi}_1$  ist bereits ein Ein-Schleifen-Term. Dementsprechend können die in  $\bar{\phi}_1$  auftretenden nackten Größen direkt durch ihre renormierten Gegenstücke ersetzt werden, da der dabei gemachte Fehler von zweiter Ordnung ist. Für das gesamte 1-Loop-Profil finde ich so den Ausdruck

$$\begin{aligned} \bar{\phi}(z) &= \bar{\phi}_0(z) + \bar{\phi}_1(z) \\ &= v_0 \left\{ 1 - \frac{\tilde{C}_0}{v_0 m_R^2} \right\} \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \\ &\quad - \left[ \frac{2\tilde{C}_1(L)}{3m_R^2} \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \left( \frac{\tilde{C}_0}{m_R^2} + \frac{\tilde{C}_2}{m_R^2} + v \frac{3}{16} \frac{u_R}{8\pi} \right) \left(\frac{m_R}{2}z\right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \\ &= v \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \left[ \frac{2\tilde{C}_1(L)}{3m_R^2} \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{\tilde{C}_0}{m_R^2} + \frac{\tilde{C}_2}{m_R^2} + v \frac{3}{16} \frac{u_R}{8\pi} \right) \left(\frac{m_R}{2}z\right) \right] \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right). \end{aligned} \quad (5.8)$$

Für die  $\tilde{C}_i$  setze ich nun die in Abschnitt 5.2 gefundenen Ergebnisse ein. Da diese alle zur Korrektur erster Ordnung beitragen, ersetze ich die auftretenden nackten Größen direkt durch

ihre renormierten Gegenstücke. Mit (5.4), (5.5) und (5.6) erhalte ich so

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{C}_0}{m_R^2} &= -v \frac{1}{8\pi} \frac{g_R}{m_R} = -v \frac{u_R}{8\pi}, \\ \frac{2\tilde{C}_1(L)}{3m_R^2} &= v \frac{1}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left\{ \alpha + \ln(m_R L) \right\}, \\ \frac{\tilde{C}_2}{m_R^2} &= v \frac{g_R}{m_R} \frac{1}{8\pi} \frac{3}{4} \ln(3) = v \frac{u_R}{8\pi} \frac{3}{4} \ln(3).\end{aligned}$$

Die Klammer vor dem  $(m_R z/2) \operatorname{sech}^2(m_R z/2)$ -Beitrag fasse ich zusammen zu

$$\frac{\tilde{C}_0}{m_R^2} + \frac{\tilde{C}_2}{m_R^2} + v \frac{3}{16} \frac{u_R}{8\pi} = v \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{3}{4} \ln(3) - \frac{13}{16} \right).$$

Zur Abkürzung definiere ich

$$\eta := \frac{13}{16} - \frac{3}{4} \ln(3) \approx -0.0115.$$

Schließlich ist noch die Feldrenormierung zu berücksichtigen, womit das vollständige renormierte Grenzflächenprofil in erster Ordnung die Form

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_R(z, L) &= Z_R^{-1/2} \bar{\phi}(z) \\ &= v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \left[ \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right] \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{u_R}{8\pi} \eta \left( \frac{m_R}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\} \quad (5.9)\end{aligned}$$

nimmt. Damit ist das Profil komplett auf die physikalischen Größen  $L$ ,  $m_R$  und  $u_R$  zurückgeführt. Durch die Korrelationslänge  $m_R^{-1}$  ist die Skala des Profils bestimmt. Die Form des Profils hängt neben  $m_R L$ , also der Systemgröße in Einheiten der Korrelationslänge, noch von der dimensionslosen Kopplung  $u_R$  ab. Um den Wert dieser Größe geht es im folgenden Abschnitt.

### 5.3.4 Numerische Werte der Kopplungskonstanten $u_R^*$

Um die Form des Grenzflächenprofils (5.9) zu bestimmen und z.B. grafisch darzustellen benötigt man einen numerischen Wert für  $u_R$ . In der Nähe der kritischen Temperatur ist dieser Wert nahezu konstant und kann seinem Tieftemperatur-Fixpunktwert  $u_R^*$  gleichgesetzt werden. Diesen und andere universelle Größen der Ising-Universalitätsklasse zu bestimmen ist ein durchaus nichttrivales Problem, welches seit einigen Jahrzehnten einen großen Kreis von Forschern beschäftigt. Ähnlich vielfältig wie die dabei eingesetzten Methoden sind leider auch die Ergebnisse, so dass man bis heute nicht von *dem* Literaturwert  $u_R^*$  sprechen kann. Einen

Überblick über dieses interessante Feld bieten [BL01] und [CH97]. Stellvertretend für das Spektrum der Literaturwerte gebe ich die folgenden drei Werte an:

$$\begin{aligned} u_R^* &= 14.3(1) & [\text{CH97}] \\ u_R^* &= 15.1(13) & [\text{Mü90}] \\ u_R^* &= 17.1(19) & [\text{RZW94}]^1. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Alle anderen mir bekannten Literaturwerte bewegen sich zwischen 14.3 und 15.1. Von den genannten Werten ist  $u_R^* = 14.3(1)$  der aktuellste und mit dem geringsten Fehler behaftet. Alle folgenden grafischen Darstellungen des Profils sind mit diesem Wert gezeichnet. Numerische Werte von Größen, die in funktionalem Zusammenhang mit  $u_R$  stehen, gebe ich indes für jeden der drei in (5.10) aufgeführten Literaturwerte an.

---

<sup>1</sup>Die Größe des Fehlers ist darin begründet, dass Ruge et al. selbst keinen Wert für  $u_R^*$  angeben. Der hier zitierte Wert wurde von Caselle und Hasenbusch in [CH97] nachträglich aus mehreren in [RZW94] angegebenen Werten berechnet. Binder und Luijten zitieren Ruge et al. in [BL01] in der selben Form.



# 6 Diskussion des berechneten Profils

Das berechnete Grenzflächenprofil soll im Folgenden diskutiert werden. Schwerpunktmaßig gehe ich dabei auf die Abhängigkeit des Profils von der Systemgröße  $L$  ein. Interessant ist insbesondere die Dicke der Grenzfläche, die aufgrund der in Kapitel 2 beschriebenen Überlegungen einen Anteil proportional zu  $\ln(m_R L)$  besitzen sollte. Nach einer allgemeinen Diskussion der  $L$ -Abhängigkeit des Profils  $\bar{\phi}_R(z, L)$  (siehe Gl. (5.9)) wird deshalb in Abschnitt 6.2 zunächst ein vernünftiges Maß für die Grenzflächendicke, nämlich das zweite Moment  $\langle z^2 \rangle$  bezüglich einer geeigneten Gewichtungsfunktion, festgelegt. Dieses wird dann berechnet und auf seine  $L$ -Abhängigkeit hin untersucht. Anschließend wird in Abschnitt 6.3 der Gültigkeitsbereich der gewählten 1-Loop-Approximation abgeschätzt. D.h. es wird untersucht, in welchem Intervall von Systemgrößen  $L$  die in 6.2 ermittelte Grenzflächendicke  $\langle z^2 \rangle(L)$  eine gute Näherung darstellt. Schließlich werden in Abschnitt 6.4 die Resultate der vorliegenden Arbeit den Ergebnissen anderer Arbeiten gegenüber gestellt.

## 6.1 Diskussion der Kurvenschar $\bar{\phi}_R(z, L)$

Aus den Gleichungen (5.8) bzw. (5.9) ist ersichtlich, dass die Systemgröße  $L$  ausschließlich über den Koeffizienten des Anteils  $\sim \tanh(m_R z/2) \operatorname{sech}^2(m_R z/2)$  in das Profil der Grenzfläche eingeht. Dieser ist proportional zu  $\alpha + \ln(m_R L)$  (siehe Abb. 10) und ändert sein Vorzeichen deshalb bei einer Systemgröße  $L_0$ , die ich wie folgt bestimme:

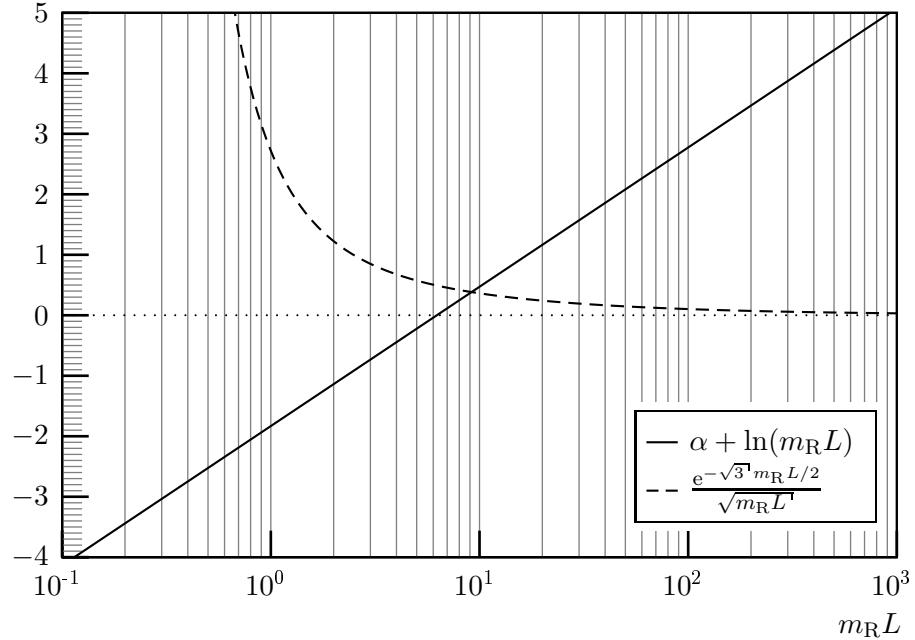
$$\begin{aligned} \alpha + \ln(m_R L_0) &= 0 \\ \Leftrightarrow L_0 &= e^{-\alpha} m_R^{-1} \approx 6.25 m_R^{-1}. \end{aligned}$$

Für Größen  $L < L_0$  gibt es einen positiven und für  $L > L_0$  einen negativen Beitrag  $\sim \tanh(m_R z/2) \operatorname{sech}^2(m_R z/2)$  zum Grenzflächenprofil. Dabei ist auch zu beachten, dass bei der Berechnung der Koeffizienten, wie in Abschnitt 5.2 beschrieben, Terme der Ordnung  $\exp(-\sqrt{3} m_R L/2)/\sqrt{m_R L}$  vernachlässigt wurden. Ob und wie die Größe  $L_0$  also physikalisch interpretiert werden kann, ist deshalb nicht direkt ersichtlich.

### 6.1.1 Ableitungen und Extrema des Profils

An dieser Stelle gebe ich die ersten drei Ableitungen des berechneten Grenzflächenprofils an:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\phi}_R(z)}{\partial z} &= v_R \frac{m_R}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\ln(m_R L)}{2}\right) \left(2 - 3 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2} z\right)\right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \eta \left(1 - 2 \left(\frac{m_R}{2} z\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2} z\right)\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

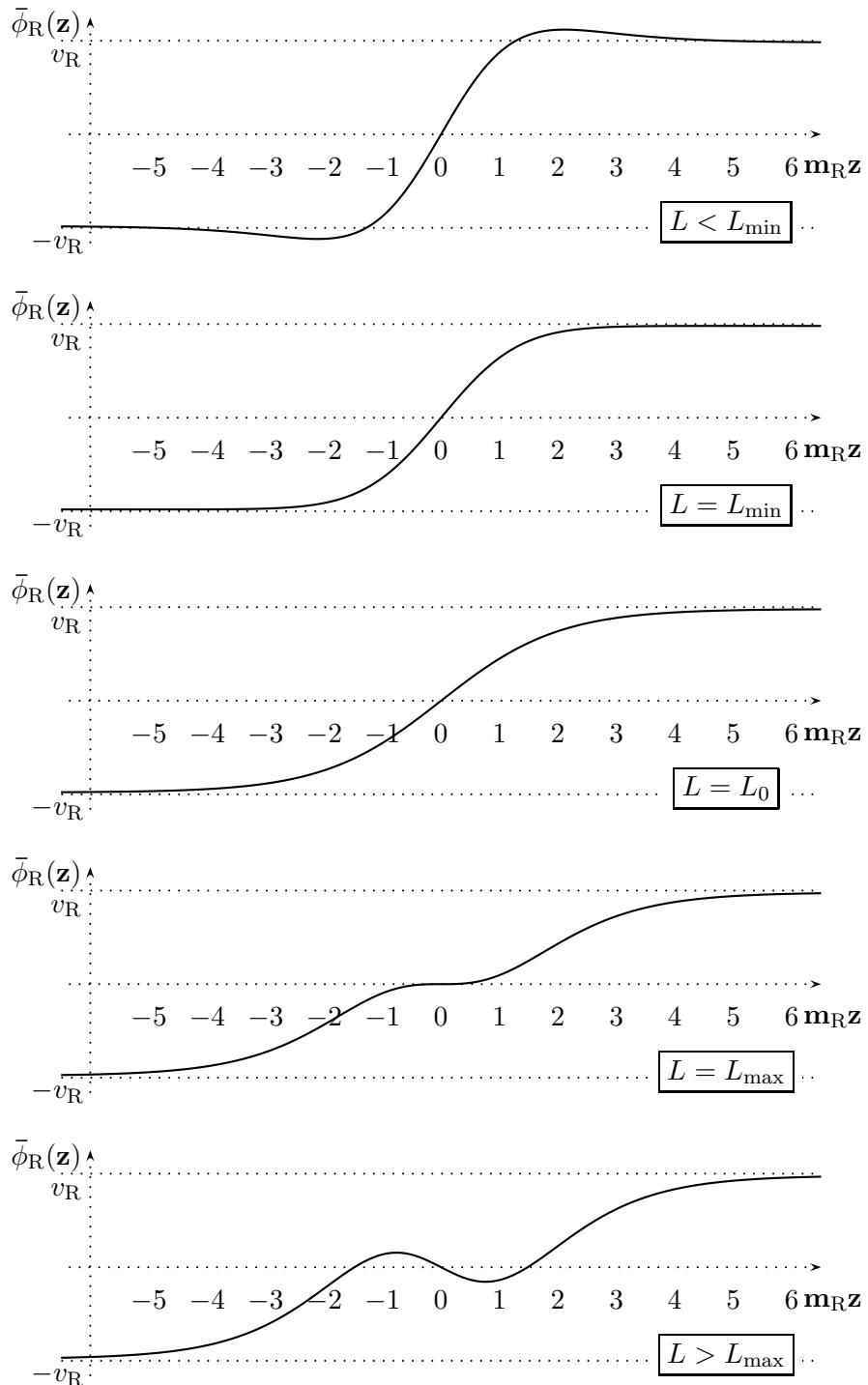


**Abb. 10:** Systemgrößenabhängigkeit des Beitrages  $\sim \tanh(m_R z/2) \operatorname{sech}^2(m_R z/2)$  zum Grenzflächenprofil. Der Vorzeichenwechsel findet bei etwa 6.25 Korrelationslängen statt. Die Größenordnung der bei der Berechnung vernachlässigen Terme ist zum Vergleich ebenfalls eingezeichnet.

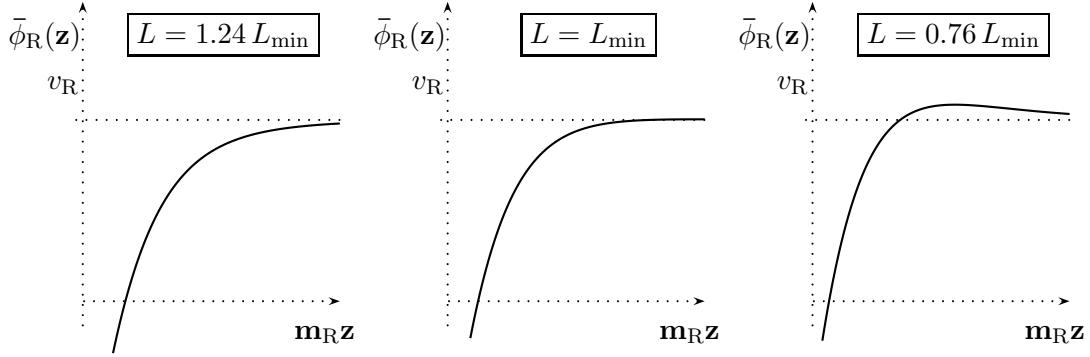
$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \bar{\phi}_R(z)}{\partial z^2} = & -v_R \frac{m_R^2}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta \left( 2 \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \right. \right. \\ & + 3 \left( \frac{m_R}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - 2 \left( \frac{m_R}{2}z \right) \left. \right) - \\ & \left. \left. \left. - 2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left( 3 \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \bar{\phi}_R(z)}{\partial z^3} = & -v_R \frac{m_R^3}{4} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \left\{ 3 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - 2 + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta \left( 9 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - 6 \right. \right. \right. \\ & - 12 \left( \frac{m_R}{2}z \right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) + 4 \left( \frac{m_R}{2}z \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \left. \right) - \\ & \left. \left. \left. - 2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left( 15 \left( \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right) + 2 \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

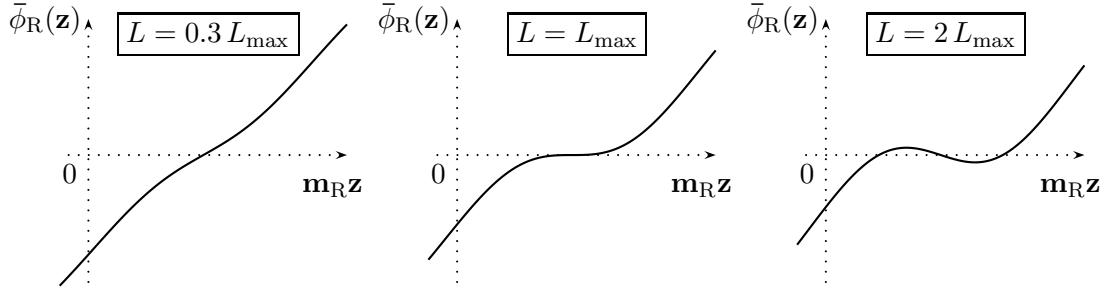
Eine analytische Bestimmung der Extrema als Nullstellen der ersten Ableitung ist in diesem Fall schwierig. Numerisch, genauer gesagt durch einfaches Plotten und Betrachten des Profils  $\bar{\phi}_R(z, L)$  für verschiedene  $L$  lassen sich aber bereits einige Aussagen treffen. So erkennt man in Abb. 11, dass  $\bar{\phi}_R$  nur für Systemgrößen  $L$  mit  $L_{\min} < L < L_{\max}$  streng monoton ist. Entspricht  $L$  genau einem der beiden Grenzwerte  $L_{\min}, L_{\max}$  so findet man Sattelpunkte.



**Abb. 11:** Die unterschiedlichen Formen des Grenzflächenprofils für verschiedene Systemgrößen  $L$ .



**Abb. 12:** In den Ausschnitten ist der rechte obere Teil der Grenzfläche dargestellt. Das linke Bild zeigt einen streng monotonen Verlauf, während in der Mitte der Sattelpunkt erkennbar ist. Für noch kleinere  $L$  bildet sich, wie im rechten Bild zu sehen, ein Hückel aus.



**Abb. 13:** Dargestellt ist in diesen Ausschnitten das Zentrum der Grenzfläche. Mit zunehmendem  $L$  wird aus einem streng monotonen Verlauf ein Maximum-Minimum-Paar.

Für  $L = L_{\max}$  gibt es genau einen Sattelpunkt in  $z = 0$ , während für  $L = L_{\min}$  zwei Sattelpunkte in gleichem Abstand links und rechts von der  $z$ -Achse zu finden sind. Sobald  $L$  etwas außerhalb des Intervalls  $[L_{\min}, L_{\max}]$  liegt, bildet sich aus den Sattelpunkten jeweils ein Paar aus Minimum und Maximum. Deren Ausprägung wird umso stärker, je weiter  $L$  außerhalb des Intervalls liegt. Wie sich die Form des Profils rund um die Grenzwerte  $L_{\min}$  und  $L_{\max}$  ändert, ist in den Abb. 12 und 13 noch einmal detaillierter dargestellt.

Für  $L_{\max}$  kann ein exakter Ausdruck angegeben werden. Da ich im Zentrum des Profils für  $L = L_{\max}$  einen Sattelpunkt erwarte, betrachte ich die erste Ableitung von  $\bar{\phi}_R$  (6.1) an der Stelle  $z = 0$ , wo sie wegen  $\operatorname{sech}(0) = 1$  und  $\tanh(0) = 0$  durch den einfachen Ausdruck

$$\frac{\partial \bar{\phi}_R}{\partial z}(0) = v_R \frac{m_R}{2} \left\{ 1 - \frac{u_R}{9\pi} \left[ \eta - \left( \frac{\alpha}{2} - \frac{\ln(m_R L)}{2} \right) \right] \right\}$$

**Tab. 2:** Numerische Werte für  $L_{\max}$  nach (6.5) sowie Näherungswerte für  $L_{\min}$ .

$u_R^*$	$L_{\min}$	$L_{\max}$
$14.3 \pm 0.1$	$0.95 \pm 0.05$	$205 \pm 5$
$15.1 \pm 1.3$	$1.03 \pm 0.05$	$170 \pm 48$
$17.1 \pm 1.9$	$1.24 \pm 0.05$	$115 \pm 38$

gegeben ist. Gesucht ist nun ein  $L$ , für das dieser Ausdruck verschwindet:

$$\frac{\partial \bar{\phi}_R}{\partial z}(0) = 0 \Leftrightarrow -\frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{\ln(m_R L_{\max})}{2} - \eta \right) = 1 \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \ln(m_R L_{\max}) &= 2 \frac{8\pi}{u_R} - \alpha + 2\eta \\ \Leftrightarrow L_{\max} &= \exp \left[ 2 \frac{8\pi}{u_R} - \alpha + 2\eta \right] m_R^{-1}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

Dass es sich tatsächlich um einen Sattelpunkt handelt, folgt aus den Werten der zweiten und dritten Ableitungen. Auch diese nehmen an der Stelle  $z = 0$  eine einfache Form an. Wegen  $z = 0$  und  $\tanh(0) = 0$  liest man aus Gleichung (6.2) direkt

$$\frac{\partial^2 \bar{\phi}_R}{\partial z^2}(0) = 0$$

ab. Die Krümmung im Ursprung verschwindet also ganz unabhängig von  $L$ , was natürlich direkt folgt, da  $\bar{\phi}_R$  eine ungerade Funktion ist. Die dritte Ableitung (6.3) vereinfacht sich zu

$$\frac{\partial^3 \bar{\phi}_R}{\partial z^3}(0) = -v_R \frac{m_R^3}{4} \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} [3\eta - 2(\alpha + \ln(m_R L))] \right\}.$$

Für die Systemgröße  $L_{\max}$  erhalte ich so

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 \bar{\phi}_R}{\partial z^3}(0, L_{\max}) &= -v_R \frac{m_R^3}{4} \left\{ \underbrace{1 + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta - \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L_{\max}) \right) \right]}_{= 0, \text{ siehe Gl. (6.4)}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{u_R}{8\pi} \left[ 2\eta - 3 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L_{\max}) \right) \right] \right\} \quad | \text{ (6.5) einsetzen} \\ &= -v_R \frac{m_R^3}{4} \left( 3 + \frac{u_R}{8\pi} \eta \right). \end{aligned}$$

Dies ist ungleich null für alle  $u_R \neq -24\pi/\eta \approx 6580$ , also für alle interessanten Kopplungskonstanten. Damit ist die Stelle  $z = 0, L = L_{\max}$ , wie erwartet als Sattelpunkt identifiziert.

Obwohl ich den exakten Wert von  $L_{\min}$  nicht kenne, kann ich diesen für ein gegebenes  $u_R^*$  numerisch nähern. In Tabelle 2 sind  $L_{\min}$  und  $L_{\max}$  für die drei in Abschnitt 5.3.4 genannten Literaturwerte von  $u_R^*$  angegeben.  $L_{\min}$  liegt für alle Kopplungskonstanten bei etwa einer Korrelationslänge. Da eine Systemgröße  $L \approx 1 m_R^{-1}$  eher uninteressant ist und zudem, wie bereits

bei der Berechnung von  $L_0$  erwähnt, Terme der Größenordnung  $\exp(-\sqrt{3}^1 m_R L/2)/\sqrt{m_R L^1}$  vernachlässigt wurden, die für derart kleine  $L$  bereits relativ groß sein könnten, ist die genaue Kenntnis der exakten Größe von  $L_{\min}$  nur von geringem Wert. Aus diesem Grund widme ich dem unteren Grenzwert des Intervalls hier keine ausführlichere Untersuchung.

## 6.2 Dicke der Grenzfläche

Spricht man über die Dicke  $w$  einer Grenzfläche, so muss man sich zunächst auf ein vernünftiges Maß derselben einigen. Ein solches zu finden, ist schwieriger als es zunächst scheint, und so findet man in der Literatur verschiedene Varianten (siehe z.B. die entsprechende Diskussion in [Mü04]). Einfache *ad hoc*-Definitionen wie die Halbwertsbreite des Grenzflächenprofils sind nur für besonders einfache Fälle sinnvoll. Dies liegt zum einen daran, dass nicht-monotone Profile den halben Maximalwert i. Allg. mehrmals annehmen können. Zum anderen ist auch die Position des halben Maximums nicht zwingend eine charakteristische Größe der Grenzfläche. Mit anderen Worten: Die Form des Profils bleibt weitestgehend unberücksichtigt.

Ein weiteres mögliches Maß für die Grenzflächendicke  $w$  ist die Wurzel des zweiten Moments  $\langle z^2 \rangle$  bezüglich einer geeigneten Gewichtung oder Wahrscheinlichkeitsdichte  $p(z)$ , also

$$w^2 = \langle z^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 p(z). \quad (6.6)$$

Die Brauchbarkeit einer solchen Definition hängt natürlich von der Wahl der Gewichtung  $p(z)$  ab. Buff et al. verwenden in [BLS65] z.B. eine Dichte

$$p_1(z) \sim \phi' = \frac{\partial \phi(z)}{\partial z}. \quad (6.7)$$

Durch die Ableitung wird die Form des gesamten Profils berücksichtigt und das so definierte zweite Moment gibt verlässlich an, auf welcher Breite wesentliche Änderungen stattfinden, also tatsächlich „etwas passiert“. Für nicht-monotone Profile stellt sich diese Wahl aber ebenfalls als ungeeignet heraus, da  $p(z)$  dann nicht positiv definit ist. Eine naheliegende Variante, die sowohl die Form des Profils als auch die Forderung nach positiver Definitheit berücksichtigt, ist durch die Definition

$$p_2(z) \sim \left( \frac{\partial \phi(z)}{\partial z} \right)^2 \quad (6.8)$$

gegeben. Angesichts des Profils (5.9), welches für Systemgrößen außerhalb des Intervalls  $[L_{\min}, L_{\max}]$  nicht-monoton ist, ist  $p_2(z)$  also im Vergleich zu  $p_1(z)$  zunächst die vernünftigere Wahl. Dennoch werde ich die folgenden Berechnungen der Grenzflächendicke bezüglich beider Definitionen durchführen, wofür ich hier drei Gründe nennen möchte.

Erstens ist die Definition der Grenzflächendicke über  $p_1(z)$  wegen ihrer rechnerischen Einfachheit in der Literatur weit verbreitet und insbesondere bei numerischen Untersuchungen gebräuchlich. Zweitens ist zunächst unklar, ob das Verhalten des Grenzflächenprofils für Systemgrößen  $L \notin [L_{\min}, L_{\max}]$ , also außerhalb des Bereiches monotoner Profile, überhaupt

physikalisch ist oder vielmehr die Begrenztheit des Gültigkeitsbereiches der gewählten Näherung aufzeigt. Drittens ist der Hauptvorteil von  $p_2(z)$  gegenüber  $p_1(z)$ , nämlich die positive Definitheit, im Rahmen der hier durchgeführten formalen Störungsrechnung gar nicht gegeben, was sich wie folgt erklärt. Das Gradientenquadrat  $\bar{\phi}'^2$  lautet im Rahmen einer 1-Loop-Approximation

$$\bar{\phi}'^2(z) = (\bar{\phi}'_0 + \beta^{-1}\bar{\phi}'_1(z) + \dots)^2 = \phi'_0(z)^2 + 2\beta^{-1}\bar{\phi}'_0(z)\bar{\phi}'_1(z) + \mathcal{O}(\beta^{-2}).$$

Nun handelt es sich bei der Entwicklung in Ordnungen von  $\beta^{-1}$  aber nur formal um eine Störungsrechnung und  $\beta^{-1}$  ist dabei nicht zwingend klein, sondern lediglich ein Zählpараметer der Loop-Ordnung. Dies führt dazu, dass das Quadrat der Ableitung  $\bar{\phi}(z)$  bei Vernachlässigung der Ordnung  $\beta^{-2}$  nicht mehr positiv definit ist.

Bevor ich im folgenden Abschnitt konkrete Berechnungen zur Dicke des Profils anstelle, möchte ich an dieser Stelle an einem kurzen Beispiel verdeutlichen, wie man mit Hilfe der eher unanschaulichen Definitionen (6.6), (6.7) und (6.8) tatsächlich die Dicke einer Grenzfläche bestimmt. Dazu führe ich an dieser Stelle die Berechnung für das Cahn-Hilliard-Profil  $\phi_0(z) = v_0 \tanh(m_0 z/2)$  durch<sup>1</sup>. Die Ableitung lautet  $\phi'_0(z) = (v_0 m_0/2) \operatorname{sech}^2(m_0 z/2)$ . Die Normierung der zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_1(z)$  berechne ich damit zu

$$\mathcal{N}_1^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) = \phi_0(z) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 2v_0$$

und erhalte also

$$p_1(z) = \mathcal{N}_1 \phi'_0(z) = \frac{m_0}{4} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right).$$

Das zweite Moment ergibt sich dann durch die Integration

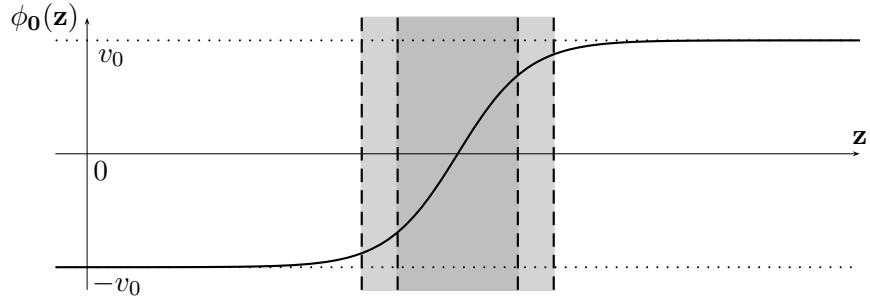
$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 p_1(z) = \frac{m_0}{4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_0}{2}z\right)}_{= \frac{8}{3m_0^3} \frac{\pi^2}{6}} = \frac{\pi^2}{3}. \end{aligned}$$

Entsprechend berechne ich für das zweite Moment bezüglich  $p_2(z)$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_2^{-1} &= v_0^2 \frac{m_0^2}{4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right)}_{= \frac{8}{3m_0}, \text{ siehe Gl. (3.4)}} = \frac{2m_0^2}{3} v_0^2, \end{aligned}$$

$$p_2(z) = \mathcal{N}_2 \phi'_0(z)^2 = \frac{3}{8} m_0^3 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_0}{2}z\right)$$

<sup>1</sup>In [Mü04] wird das Ergebnis dieser Rechnung im Rahmen der Faltungsnäherung (2.9) als intrinsische Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  verwendet.



**Abb. 14:** Das Cahn-Hilliard Profil und seine aus dem zweiten Moment bestimmte Dicke  $w = \sqrt{\langle z^2 \rangle}$  bzgl. der Gewichte  $p_1(z) \sim \phi(z)'$  (hellgrau) und  $p_2(z) \sim \phi'^2(z)$  (dunkelgrau).

und

$$\langle z^2 \rangle_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 p(z) = \frac{3m_0^3}{8} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_0}{2} z \right)}_{= \frac{8(\pi^2 - 6)}{9m_0^3}} = \frac{\pi^2 - 6}{3}.$$

Das Ergebnis beider Rechnungen ist in Abbildung 14 eingezeichnet. Die Schattierungen markieren dabei genau den Teil des Systems, den man nach der jeweils verwendeten Definition als „die Grenzfläche“ bezeichnen würde (im Sinne von Abbildung 2 und der dazugehörigen Erklärung in der Einleitung). Nachdem nun geklärt ist, wie die Dicke eines Grenzflächenprofils theoretisch greifbar gemacht werden kann, werde ich diese im folgenden Abschnitt berechnen.

### 6.2.1 Berechnung des zweiten Momentes

**Das zweite Moment bezüglich  $p_1(z) \sim \bar{\phi}'(z)$**

Die Ableitung des Grenzflächenprofils nach  $z$  ist gegeben durch

$$\bar{\phi}'_R = v_R \frac{m_R}{2} \left\{ \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) + \frac{u_R}{8\pi} \left[ (2A + \eta) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 3A \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 2\eta \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right] \right\},$$

wobei ich die Abkürzung

$$A = \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln (m_R L)$$

verwende. Ich sortiere das Profil nach der Ordnung der auftretenden Terme in  $\beta^{-1}$  in der Form

$$\bar{\phi}'_R = \phi'_0 + \beta^{-1} \bar{\phi}'_1 + \mathcal{O}(\beta^{-2})$$

mit

$$\phi'_0(z) = v_R \frac{m_R}{2} \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tag{6.9}$$

und

$$\bar{\phi}'_1(z) = v_R \frac{m_R}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left[ (2A + \eta) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 3A \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 2\eta \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right]. \quad (6.10)$$

Die Normierungskonstante  $\mathcal{N}_1$  der auf 1 normierten Wahrscheinlichkeitsdichte lässt sich dann in der Form

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_1 &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{\phi}'_R(z) \right)^{-1} = \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) + \beta^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{\phi}'_1 + \dots \right)^{-1} \\ &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \right)^{-1} - \beta^{-1} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{\phi}'_1(z)}{\left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \right)^2} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &=: \frac{1}{I} - \beta^{-1} \frac{J}{I^2} + \mathcal{O}(\beta^{-2}). \end{aligned}$$

schreiben, wobei ich die beiden Integrale mit  $I, J$  abkürze. Diese berechne ich zu

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) = \phi_0(z) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 2v_R,$$

und

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{\phi}'_1(z) = \bar{\phi}_1(z) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0.$$

Damit ist die Normierungskonstante also durch

$$\mathcal{N}_1 = \frac{1}{2v_R}$$

gegeben und die Wahrscheinlichkeitsdichte lautet

$$p_1(z) = \frac{m_R}{4} \left\{ \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) + \frac{u_R}{8\pi} \left[ (2A + \eta) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 3A \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 2\eta \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right] \right\}.$$

Nun, da  $p_1(z)$  bekannt ist, lässt sich das zweite Moment berechnen als das Integral

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 p_1(z) = \frac{1}{2v_R} \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \phi'_0(z) + \beta^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \bar{\phi}'_1(z) \right) \\ &= \frac{1}{2v_R} (K + \beta^{-1} L). \end{aligned}$$

Die beiden Teilintegrale  $K$  und  $L$  berechne ich zu

$$\begin{aligned} K &= v_R \frac{m_R}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) = v_R \frac{4}{m_R^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 \operatorname{sech}^2(\xi)}_{\pi^2} = \frac{2\pi^2}{3} \frac{v_R}{m_R^2} \\ &= \frac{\pi^2}{6} \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 L &= v_R \frac{m_R}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left[ (2A + \eta) \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 3A \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \right. \\
 &\quad \left. - 2\eta \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right] \\
 &= v_R \frac{m_R}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left[ (2A + \eta) \frac{4\pi^2}{3m_R^3} - 3A \frac{8}{m_R^3} \frac{\pi^2 - 6}{9} - 2\eta \frac{8}{m_R^3} \frac{\pi^2}{4} \right] \\
 &= \frac{v_R}{m_R^2} \frac{u_R}{8\pi} \left[ 8A - \frac{4}{3}\eta\pi^2 \right].
 \end{aligned}$$

Damit ist das zweite Moment bestimmt zu

$$\begin{aligned}
 \langle z^2 \rangle_1 &= m_R^{-2} \left[ \frac{\pi^2}{3} + \frac{u_R}{8\pi} \left( 4A - \frac{2}{3}\eta\pi^2 \right) \right] \\
 &= m_R^{-2} \left[ \frac{\pi^2}{3} + \frac{u_R}{8\pi} \left\{ 2(\alpha + \ln(m_R L)) - \frac{2}{3}\eta\pi^2 \right\} \right].
 \end{aligned}$$

Um die Abhängigkeit von der Systemgröße  $L$  besonders herauszustellen schreibe ich

$$\langle z^2 \rangle_1(L) = m_R^{-2} \left[ \text{const.} + 2 \frac{u_R}{8\pi} \ln(m_R L) \right] \quad (6.11)$$

mit

$$\text{const.} = \frac{\pi^2}{3} + \frac{u_R}{8\pi} \left( 2\alpha - \frac{2}{3}\pi^2\eta \right).$$

**Das zweite Moment bezüglich  $p_2(z) \sim \bar{\phi}'^2(z)$**

Die Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_2(z)$  ist bis auf eine Normierungskonstante proportional zum Quadrat der Ableitung des Grenzflächenprofils

$$\bar{\phi}'^2(z) = \phi_0'^2 + 2\beta^{-1}\phi_0'(z)\bar{\phi}'_1(z) + \mathcal{O}(\beta^{-2}).$$

Mit den Ableitungen (6.9) und (6.10) lassen sich die beiden in  $\bar{\phi}'^2(z)$  auftretenden Ausdrücke

$$\phi_0'^2(z) = v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)$$

und

$$\begin{aligned}
 \phi_0'(z)\bar{\phi}'_1(z) &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \frac{u_R}{8\pi} \left[ (2A + \eta) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 3A \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \right. \\
 &\quad \left. - 2\eta \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right]
 \end{aligned}$$

angeben. In erster Ordnung finde ich die Normierungskonstante

$$\begin{aligned}
 \mathcal{N} &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{\phi}'(z)^2 \right)^{-1} = \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz (\phi'_0(z) + \beta^{-1} \bar{\phi}'_1(z) + \dots)^2 \right)^{-1} \\
 &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) + 2\beta^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z) + \dots \right)^{-1} \\
 &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) \right)^{-1} - \beta^{-1} \frac{2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z)}{\left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) + 2\beta^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z) \right)^2} \Big|_{\beta^{-1}=0} + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) \right)^{-1} \left[ 1 - 2\beta^{-1} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z)}{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z)} \right] + \mathcal{O}(\beta^{-2}).
 \end{aligned}$$

Insgesamt ist  $p_2(z)$  damit gegeben als

$$\begin{aligned}
 p_2(z) &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) \right)^{-1} \left[ 1 - 2\beta^{-1} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z)}{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z)} \right] [\phi'_0(z) + \beta^{-1} \bar{\phi}'_1(z)]^2 + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &= \left( \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) \right)^{-1} \left[ \phi'^2_0(z) + 2\beta^{-1} \left( \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z) - \phi'^2_0(z) \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z)}{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z)} \right) \right] + \\
 &\quad + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\
 &=: \frac{\phi'^2_0(z)}{I} + 2\beta^{-1} \left[ \frac{\phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z)}{I} - \frac{\phi'^2_0(z) J}{I^2} \right] + \mathcal{O}(\beta^{-2}),
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

wobei ich die folgenden Abkürzungen verwende:

$$\begin{aligned}
 I &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'^2_0(z) \\
 J &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi'_0(z) \bar{\phi}'_1(z).
 \end{aligned}$$

Das Integral  $I$  berechne ich analog zu (3.4) zu

$$I = v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) = v_R^2 \frac{2m_R}{3}.$$

Zur Berechnung von  $J$  zerlege ich das Integral in drei Teilintegrale.

$$\begin{aligned}
 J &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \frac{u_R}{8\pi} \left\{ (2A + \eta) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{=: J_1} - 3A \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{=: J_1} - \right. \\
 &\quad \left. = \frac{8}{3m_R} \quad \text{siehe (3.4)} \right. \\
 &\quad \left. - 2\eta \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{=: J_2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Bei der Berechnung der Teilintegrale  $J_i$  verwende ich die Substitution  $z \rightarrow \xi(z) = \tanh(m_R z/2)$  und nutze aus, dass sich einige der auftretenden Terme mit Hilfe der Beziehung  $\tanh^2(x) = 1 - \operatorname{sech}^2(x)$  auf bereits berechnete Integrale zurückführen lassen. Ich erhalte so

$$\begin{aligned}
 J_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^6\left(\frac{m_R}{2}z\right) = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{= \frac{8}{3m_R}, \text{ s. o.}} - \int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) \\
 &= \frac{8}{3m_R} - \int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right)^2 \\
 &= \frac{8}{3m_R} - \frac{2}{m_R} \int_{-1}^1 d\xi \xi^2 + \frac{2}{m_R} \int_{-1}^1 d\xi \xi^4 \\
 &= \frac{32}{15m_R}, \tag{6.14}
 \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
 J_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\frac{m_R}{2}z\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) \\
 &= \underbrace{-\frac{z}{4} \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{= 0} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \underbrace{\frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{= \frac{2}{3m_R} \text{ siehe (3.4)}} \\
 &= \frac{2}{3m_R}. \tag{6.15}
 \end{aligned}$$

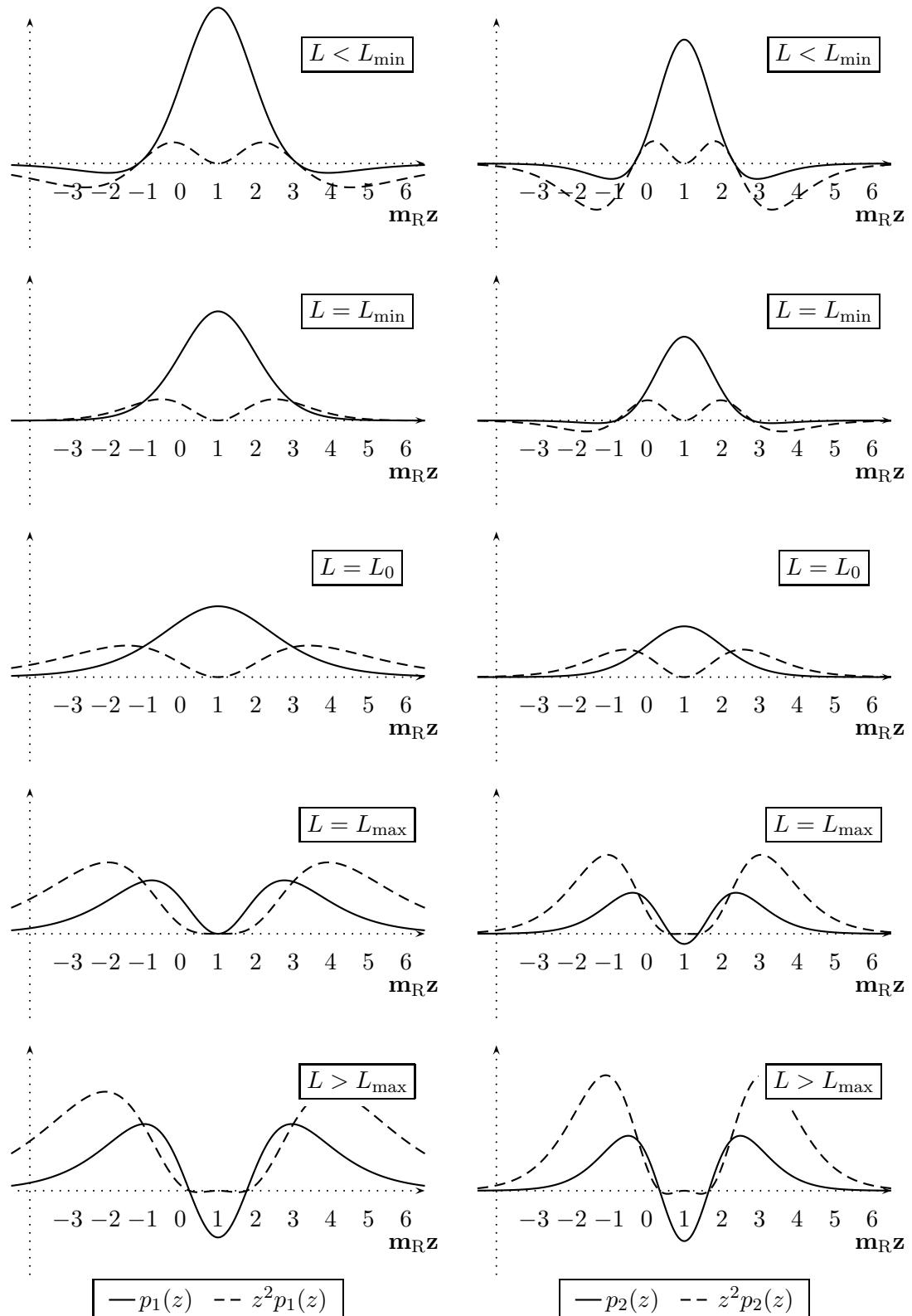
Eingesetzt in (6.13) ergibt sich mit den berechneten  $J_i$

$$J = v_R^2 m_R \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\eta}{3} - \frac{4}{15} A \right).$$

Nachdem nun  $I$  und  $J$  bekannt sind, lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte nach Gl. (6.12) angeben zu

$$\begin{aligned}
 p_2(z) &= \frac{3m_R}{8} \left\{ \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \right. \\
 &\quad + 2\beta^{-1} \frac{u_R}{8\pi} \left[ \left( \frac{12}{5}A + \frac{\eta}{2} \right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) - 3A \operatorname{sech}^6\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \right. \\
 &\quad \left. \left. - 2\eta \left( \frac{m_R}{2}z \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

Zum Vergleich mit  $p_1(z)$  sind beide Gewichte in Abb. 15 für verschiedene Systemgrößen



**Abb. 15:** Vergleich der beiden Gewichte  $p_1(z)$  und  $p_2(z)$  für verschiedene Systemgrößen  $L$ . Eingezeichnet ist jeweils auch das Produkt  $z^2 p_i$ , dessen Integral proportional zum Quadrat der Grenzflächendicke  $w^2$  ist. Da es nur auf die relative Verteilung des Gewichtes ankommt, sind die Funktionen zur besseren Darstellung skaliert. 73

dargestellt. Als Nächstes berechne ich das zweite Moment bezüglich dieser Wahrscheinlichkeitsdichte. Dieses ist gegeben als

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_2 &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \phi_0'^2(z)}{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_0'^2(z)} + 2\beta^{-1} \left[ \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \phi_0'(z) \phi_1'(z)}{\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_0'^2(z)} - \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \phi_0'^2(z) \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z} \phi_0'(\tilde{z}) \phi_1'(\tilde{z})}{\left(\int_{-\infty}^{\infty} dz \phi_0'^2(z)\right)^2} \right] + \\ &\quad + \mathcal{O}(\beta^{-2}) \\ &= \frac{K}{I} + 2\beta^{-1} \left[ \frac{L}{I} - \frac{KJ}{I^2} \right] + \mathcal{O}(\beta^{-2}), \end{aligned} \quad (6.16)$$

wobei nun neben den bereits bekannten Integralen  $I$  und  $J$  noch zwei weitere, nämlich

$$\begin{aligned} K &= \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \phi_0'^2(z) \\ L &= \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \phi_0'(z) \bar{\phi}_1'(z) \end{aligned}$$

berechnet werden müssen. Zuerst integriere ich

$$\begin{aligned} K &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{= \frac{8}{9m_R^3} (\pi^2 - 6)} = v_R^2 \frac{2}{9m_R} (\pi^2 - 6). \\ &= \frac{8}{9m_R^3} (\pi^2 - 6) \end{aligned} \quad (6.17)$$

Das Integral  $L$  lässt sich wieder in drei Teilintegrale zerlegen:

$$\begin{aligned} L &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \frac{u_R}{8\pi} \left\{ (2A + \eta) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{= \frac{8(\pi^2 - 6)}{9m_R^3} \text{ siehe (6.17)}} - 3A \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^6\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{=: L_1} - \right. \\ &\quad \left. - 2\eta \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\frac{m_R}{2}z^3\right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{=: L_2} \right\}. \end{aligned}$$

Mit Hilfe von Maple ([MAP]) lassen sich die  $L_i$  auswerten zu

$$L_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^6\left(\frac{m_R}{2}z\right) = \frac{32\pi^2 - 240}{45m_R^3}, \quad (6.18)$$

$$L_2 = \frac{m_R}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^3 \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) = \frac{2}{3m_R^3} (\pi^2 - 6). \quad (6.19)$$

Insgesamt ergibt sich so

$$L = -\frac{v_R}{m_R} \frac{u_R}{8\pi} \left\{ 4A \frac{(\pi^2 - 15)}{45} + \frac{\pi^2 - 6}{9} \eta \right\}.$$

Nun sind alle in  $\langle z^2 \rangle$  auftretenden Terme bestimmt. Einsetzen von  $I, J, K$  und  $L$  in (6.16) liefert das gesuchte Ergebnis für das zweite Moment:

$$\langle z^2 \rangle_2 = m_R^{-2} \left[ \frac{\pi^2 - 6}{3} + \beta^{-1} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{6}{5} (\alpha + \ln(m_R L)) - 2\eta \frac{\pi^2 - 6}{3} \right) \right]. \quad (6.20)$$

Zusammengefasst schreibe ich die  $L$ -Abhängigkeit von  $\langle z^2 \rangle_2$  als

$$\langle z^2 \rangle_2(L) = \text{const.} + m_R^{-2} \beta^{-1} \frac{u_R}{8\pi} \frac{6}{5} \ln(m_R L) \quad (6.21)$$

mit

$$\text{const.} = m_R^{-2} \left[ \frac{\pi^2 - 6}{3} + \beta^{-1} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{6}{5} \alpha - \frac{2(\pi^2 - 6)}{3} \eta \right) \right]. \quad (6.22)$$

Die von den Gln. (6.11) und (6.21) beschriebenen Zusammenhänge zwischen  $\langle z^2 \rangle$  und der Systemgröße  $L$  sind wohl die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit.

### Zusammenstellung der Ergebnisse

Durch Einsetzen des Ausdrückes

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

für die Oberflächenspannung in erster Ordnung schreibe ich die beiden Ergebnisse des letzten Abschnittes in der Form

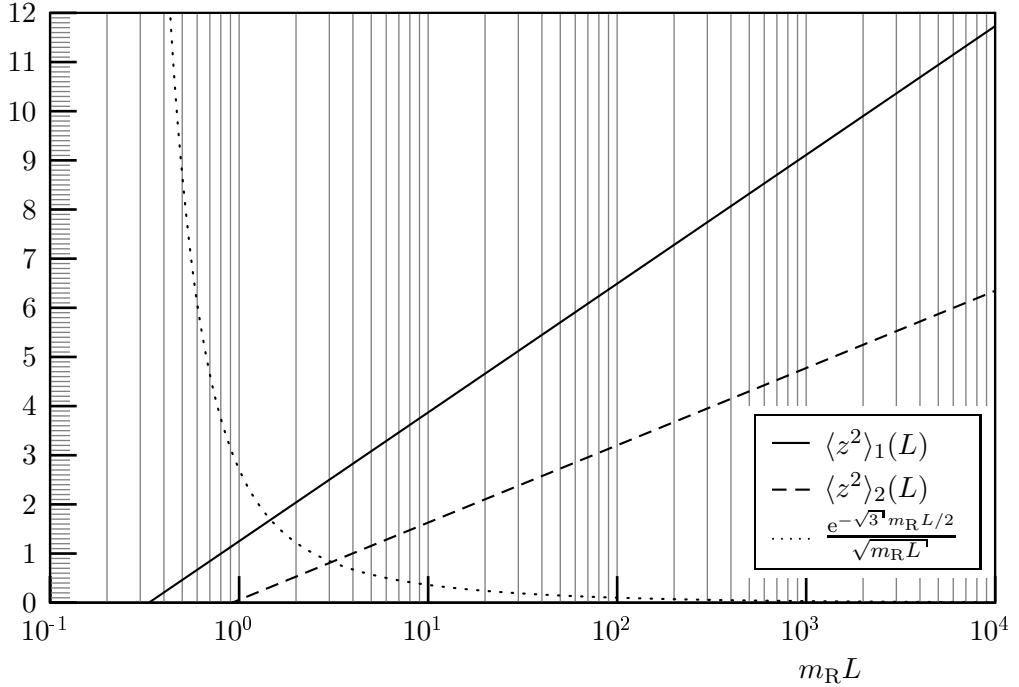
$$\langle z^2 \rangle_1 = \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \alpha - \frac{\pi^2}{3} \eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L) \quad (6.23)$$

$$\langle z^2 \rangle_2 = \frac{\pi^2 - 6}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5} \alpha - \frac{\pi^2 - 6}{3} \eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L). \quad (6.24)$$

Die beiden zweiten Momente sind in Abbildung 16 dargestellt. Vergleicht man (6.23) mit Gl. (2.5) und (2.9), so sieht man, dass die  $\ln(m_R L)$ -Abhängigkeit genau die von der Kapillarwellentheorie vorhergesagte Form besitzt. Offen ist jedoch noch die Frage nach dem Gültigkeitsbereich der gewählten Approximation. Diese ist Gegenstand des folgenden Abschnittes.

## 6.3 Gültigkeitsbereich der Approximation

Gesucht ist nun der Bereich von Systemgrößen  $L$ , in dem die Beziehungen (6.11) und (6.21) - im Sinne einer guten Näherung - gültig sind. Für die Definition der Grenzflächendicke bzgl.  $p_1(z) \sim \bar{\phi}'_R(z)$  ist das Ergebnis nur innerhalb des Bereiches  $L_{\min} < L < L_{\max}$ , also dem Bereich, in dem ein monotones Profil vorliegt, verlässlich. Außerhalb dieses Bereiches besitzt das Profil Extrema, so dass es Vorzeichenwechsel in der Ableitung gibt. Dann ist auch  $p_1(z)$  nicht mehr positiv definit und damit keine sinnvoll definierte Wahrscheinlichkeitsdichte mehr.



**Abb. 16:** Vergleich der beiden zweiten Momente.

Wie aus Abb. 15 ersichtlich, treten auch bei  $p_2(z) \sim \bar{\phi}_R'^2(z)$  bei  $L \approx L_{\max}$  Vorzeichenwechsel auf. Zusätzlich lässt sich der Gültigkeitsbereich von  $\langle z^2 \rangle_2(L)$  anhand eines weiteren Kriteriums grob abschätzen. Dazu definiere ich als Vergleichsgröße ein „naives“ zweites Moment  $\langle z^2 \rangle_n(L)$  bezüglich einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $\tilde{p}(z)$ , definiert durch

$$\tilde{p}(z) = \tilde{\mathcal{N}} (\phi'_0(z) + \bar{\phi}'_1(z))^2 = \phi'_0'^2(z) + 2\phi'_0(z)\bar{\phi}'_1(z) + \bar{\phi}'_1'^2(z). \quad (6.25)$$

Die Bezeichnung „naiv“ soll ausdrücken, dass in dieser Definition von  $\tilde{p}(z)$  das Profil  $\bar{\phi}(z) = \phi_0(z) + \bar{\phi}_1(z)$  als *exakt* angesehen wird. Im Sinne der Störungsrechnung ist diese positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte keine sinnvoll definierte Größe, da an dieser Stelle nur *ein* Term der zweiten Ordnung berücksichtigt wird. Der vollständige Ausdruck von  $\bar{\phi}'^2(z)$  bis einschließlich Ordnung  $\beta^{-2}$  müsste

$$\begin{aligned} \bar{\phi}'^2(z) &= (\phi'_0(z) + \beta^{-1}\bar{\phi}'_1(z) + \beta^{-2}\bar{\phi}'_2(z) + \dots)^2 \\ &= \phi'_0'^2(z) + 2\beta^{-1}\phi'_0(z)\bar{\phi}'_1(z) + \beta^{-2}(\bar{\phi}'_1'^2(z) + \phi'_0(z)\bar{\phi}'_2(z)) + \mathcal{O}(\beta^{-3}) \end{aligned}$$

lauten, also wird in  $\tilde{p}(z)$  der Term  $\sim \phi_0(z)\bar{\phi}'_2(z)$  vernachlässigt. Dennoch handelt es sich bei dem Moment  $\langle z^2 \rangle_n(L)$  um eine brauchbare Vergleichsgröße, da es in dem Bereich, in dem eine 1-Loop Näherung sinnvoll ist und damit Fehler zweiter Ordnung vernachlässigt werden dürfen, weitgehend mit  $\langle z^2 \rangle_2(L)$  übereinstimmen muss.

Wie bereits angedeutet, hat das naive Profil, dessen Dicke berechnet werden soll, die Gestalt

$$\bar{\phi}_n(z, L) = v_R \left\{ \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \frac{u_R}{8\pi} \left[ \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right] \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) + \frac{u_R}{8\pi} \eta\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right\}. \quad (6.26)$$

Analog zum Vorgehen im letzten Abschnitt definiere ich dieses als  $\langle z^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \tilde{p}(z)$  mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\tilde{p}$  aus (6.25). Die explizite Rechnung ist relativ umfangreich, erfolgt aber nach dem selben Schema wie die Berechnung von  $\langle z^2 \rangle_1$  und  $\langle z^2 \rangle_2$  im letzten Abschnitt. Aus Gründen der Übersichtlichkeit gebe ich an dieser Stelle nur das Ergebnis an und verweise für die Details auf Anhang B. Man erhält

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_n = & \frac{v_R^2}{m_R} \mathcal{N} \left\{ \frac{2(\pi^2 - 6)}{9} - \frac{u_R}{8\pi} \left\{ \frac{8(\pi^2 - 15)}{45} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) + \frac{2(\pi^2 - 6)}{9} \eta \right\} + \right. \\ & + \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left\{ \left[ \frac{8\pi^2}{63} - \frac{8}{15} \right] \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 + \left[ \frac{14\pi^4}{225} - \frac{4\pi^2}{9} - \frac{8}{15} \right] \eta^2 + \right. \\ & \left. \left. + \left[ \frac{8}{3} - \frac{4\pi^2}{9} \right] \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \right\} \right\} \end{aligned} \quad (6.27)$$

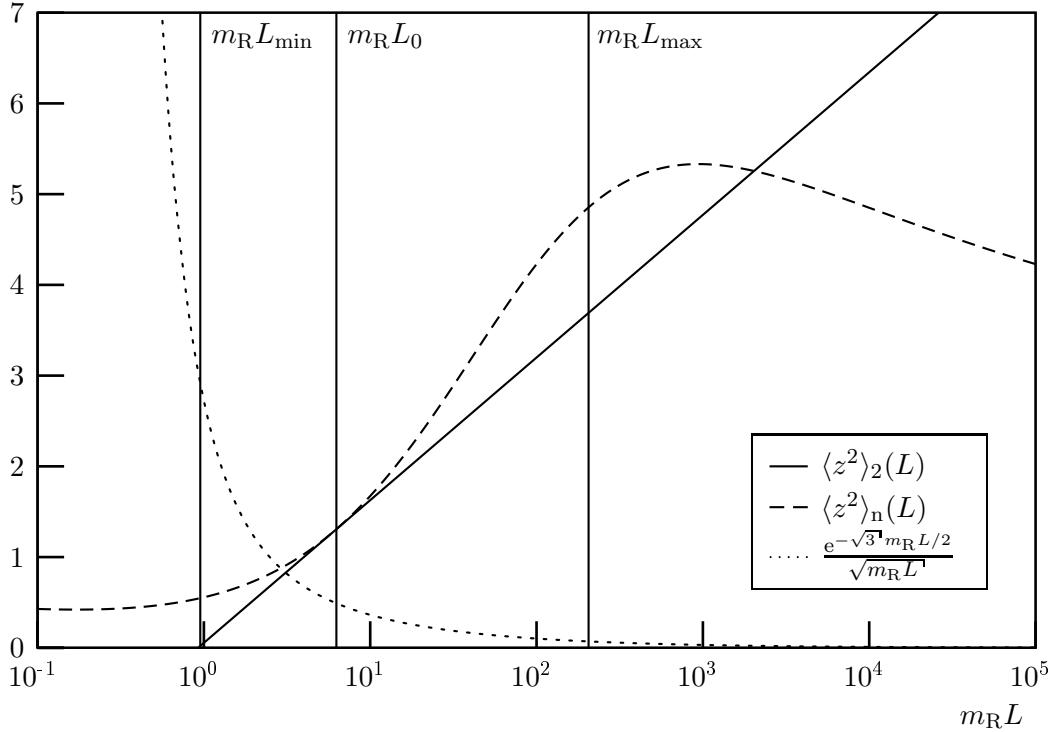
mit der Normierungskonstanten  $\tilde{\mathcal{N}}$ , die über ihr Inverses

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{N}}^{-1}(L) = & \frac{2}{3} v_R^2 m_R \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta - \frac{4}{5} \left( \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \right] + \right. \\ & \left. + \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left[ \frac{4}{7} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 + \frac{\pi^2}{15} \eta^2 - \frac{6}{5} \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \right] \right\} \end{aligned}$$

definiert ist. In Abbildung 17 sind sowohl  $\langle z^2 \rangle_n$  als auch  $\langle z^2 \rangle_2$  aus Gl. (6.24) eingezeichnet. Für  $u_R = 14.3$  stimmen die beiden Momente  $\langle z^2 \rangle_2$  und  $\langle z^2 \rangle_n$  im Bereich von  $L \approx 1 m_R^{-1}$  bis  $L \approx 10^3 m_R^{-1}$  recht gut überein. Außerhalb dieses Bereiches verhalten sich beide Größen qualitativ völlig unterschiedlich.

## 6.4 Vergleich mit Resultaten anderer Arbeiten

Die vorliegende Arbeit hat zwei Hauptergebnisse: Die funktionale Form des Grenzflächenprofils  $\phi_R$  in Gl. (5.9) und die Angabe der  $\ln(m_R L)$ -Abhängigkeit der Grenzflächendicke in den Gln. (6.23) und (6.24). Zu beiden Ergebnissen folgt nun jeweils ein Abschnitt, in dem ein Vergleich zu entsprechenden Resultaten anderer Autoren gezogen wird.



**Abb. 17:** Vergleich von  $\langle z^2 \rangle_2$  und  $\langle z^2 \rangle_n$ . Eingezeichnet sind auch die in Abschnitt 6.1 eingeführten Längen  $L_i$ . Die gepunktete Linie entspricht der Ordnung der Fehler der Koeffizienten  $C_i$  und deutet eine weitere Grenze des Gültigkeitsbereiches seitens kleiner  $L$  an.

#### 6.4.1 Das Grenzflächenprofil

Ohta und Kawasaki berechnen in [OK77] das Grenzflächenprofil in  $4 - \epsilon$  Dimensionen, und lösen dazu eine Differenzialgleichung ähnlich (4.26). Sie erhalten ein Ergebnis der Form

$$M(z) = \frac{\tanh\left(\frac{z}{2L}\right)}{\sqrt{1 + \frac{2a}{3+a} \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{2L}\right)}},$$

wobei  $L$  die Korrelationslänge bezeichnet und  $a$  durch

$$a = \frac{\sqrt{3}}{6} \pi \epsilon$$

gegeben ist. Im Falle  $D \rightarrow 4$ , also  $\epsilon \rightarrow 0$  geht das Profil von Ohta und Kawasaki in das Mean-Field-Profil über. Dem Artikel ist eine Notiz der Autoren angehängt, indem sie darauf hinweisen, dass es bei einer Extrapolation zu  $\epsilon = 1$  zu einer logarithmischen Divergenz kommt, als deren wahrscheinlichste Ursache sie den Einfluss von Kapillarwellen identifizieren. Diese sehen sie nicht als intrinsische Eigenschaft der Grenzfläche an und schlagen daher eine Unterdrückung der logarithmischen Divergenz mittels eines Counter-Terms vor. Als Resultat

dieses Vorgehens erhält man eine Näherung des Profils für  $D = 3$  unter Vernachlässigung von Kapillarwellen, also gewissermaßen ein intrinsisches Profil. Dieses Ergebnis lässt sich mit dem von mir berechneten Profil nicht vergleichen, da sich für dieses kein intrinsischer Anteil isolieren lässt und unklar ist, bei welcher Systemgröße  $L$  der Vergleich gezogen werden sollte.

Eine ähnliche Rechnung, abermals in  $4 - \epsilon$  Dimensionen, wurde von Jasnow und Rudnick durchgeführt und etwa ein Jahr nach der Veröffentlichung des Artikels von Ohta und Kawasaki publiziert ([JR78]). In dieser Arbeit betrachten sie zwar ausschließlich den Fall  $\epsilon \rightarrow 0$ , verweisen aber bereits auf eine mögliche Relevanz der Ergebnisse in drei Dimensionen, also für  $\epsilon \rightarrow 1$ . Diese Idee wird von ihnen wenig später in [JR78] wieder aufgegriffen, wo sie nun das dreidimensionale Problem angehen. In beiden Arbeiten verwenden sie ein äußeres Feld zur Fixierung der Grenzfläche. Genau wie ich verwenden sie den Formalismus der effektiven Wirkung um eine Feldgleichung herzuleiten. Das in [JR78] vorgestellte Profil lautet in der dort gewählten Notation

$$m(z) = M(z)/M_{\text{eq}} = \tanh\left(\frac{z}{\xi}\right) + c_1 \left(\frac{z}{\xi}\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{\xi}\right) + (c_2 + c_3 \ln \delta\lambda) \tanh\left(\frac{z}{\xi}\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{\xi}\right). \quad (6.28)$$

Dabei entspricht  $M(z)/M_{\text{eq}}$  dem  $\phi_R(z)/v_R$  in dieser Arbeit. Der inversen Korrelationslänge  $\xi^{-1}$  entspricht bei mir die halbe renormierte Masse  $m_R$ . Genau wie in dem von mir berechneten Profil sollen die Koeffizienten dabei proportional zur dimensionslosen Kopplung  $u$  sein. Statt des genauen funktionalen Zusammenhangs  $c_i(u)$  geben Jasnow und Rudnick die Koeffizienten für den Tieftemperatur-Fixpunktwert, den sie zu  $u^* = 13.16$  wählen, numerisch an:

$$c_1 = 0.217465 \quad c_2 = 0.089182 \quad c_3 = 0.109975.$$

Durch das äußere Feld wird eine Lücke im Spektrum des Fluktuationssoperators erzeugt, so dass die Nullmode zu einem endlichen Eigenwert  $\delta\lambda$  hin verschoben wird. Die Größe  $\delta\lambda$  charakterisiert demnach die Stärke des äußeren Feldes und findet in meiner Arbeit keine direkte Entsprechung, was in der unterschiedlichen Problemstellung begründet ist: Während Jasnow und Rudnick eine in der  $x_1 - x_2$ -Ebene unendlich ausgedehnte Grenzfläche, also den Fall  $L \rightarrow \infty$  betrachten und daher wegen (2.6) ein äußeres Feld benötigen, wird die Fläche in der von mir behandelten Problemstellung durch ein endliches  $L$  stabilisiert. Wegen der asymptotischen Beziehungen (2.7) bzw. (2.8) sollte sich das Profil von Jasnow und Rudnick für kleine Feldstärken  $\delta\lambda$  so verhalten, wie das von mir berechnete Profil für große  $L$ . Für einen konkreten Vergleich schreibe ich mein Profil in der Form

$$\frac{\bar{\phi}_R(z)}{v_R} = \tanh\left(\frac{z}{\xi}\right) + d_1 \left(\frac{z}{\xi}\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{\xi}\right) + (d_2 + d_3 \ln(m_R L)) \tanh\left(\frac{z}{\xi}\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{\xi}\right),$$

wobei die Koeffizienten durch

$$\begin{aligned} d_1 &= \frac{u_R}{8\pi} \eta \approx -0.006000 \\ d_2 &= -\frac{u_R}{8\pi} \frac{\alpha}{2} \approx 0.479617 \\ d_3 &= -\frac{u_R}{8\pi} \frac{1}{2} \approx -0.261810 \end{aligned}$$

gegeben sind. Die numerischen Angaben sind dabei für den von Jasnow und Rudnick gewählten Wert  $u_R = 13.16$  berechnet. Offensichtlich unterscheiden sich die Koeffizienten der beiden Funktionen. Da dem Artikel keine Details zur Bestimmung der Koeffizienten und zur Renormierung des Profils zu entnehmen sind, ist eine Diskussion der Unterschiede schwierig. Für die Differenz zwischen  $d_1$  und  $c_1$  habe ich keine Erklärung, jedenfalls lässt sie sich nicht auf den Renormierungsbeitrag zu  $\eta$  zurückführen. Lasse ich diesen weg, so erhalte ich  $d_1 = 0.092178$ , was immer noch weniger als halb so groß wie  $c_1$  ist. Für  $c_2$  und  $d_2$  ist keine Übereinstimmung zu erwarten, da z.B. durch die Definition von  $\delta\lambda$  nichtuniverselle Faktoren aus dem Logarithmus konstante Beiträge ergeben, die genausogut dem Koeffizienten  $c_2$  zugerechnet werden könnten. Allerdings müssten sich zumindest  $c_3$  und  $d_3$  vergleichen lassen, da sie das asymptotische Verhalten der Kapillarwellentheorie reproduzieren sollten. Dies lässt sich anhand der Grenzflächendicke überprüfen. Über diese machen Jasnow und Rudnick keine Aussagen, aber da sich ihr Profil nur in den Koeffizienten von meinem Ergebnis unterscheiden, erhält man das zweite Moment bezüglich  $p_1(z)$  für  $m(z)$  direkt aus meinem  $\langle z^2 \rangle_1$ , indem man dort die entsprechenden Vorfaktoren austauscht. Dadurch erhalte ich

$$\langle z^2 \rangle_{JR} = \text{const.} + \frac{4c_3}{m_R^2} \ln(\delta\lambda) \quad \text{statt} \quad \langle z^2 \rangle_1 = \text{const.} + \frac{4d_3}{m_R^2} \ln(m_R L).$$

Unter Berücksichtigung der Gleichungen (2.7) und (2.8) aus der Kapillarwellentheorie muss deshalb

$$4c_3^{(\text{CW})} m_R^{-2} = -\frac{1}{4\pi\sigma} \quad \text{und} \quad 4d_3 m_R^{-2} = -\frac{1}{2\pi\sigma}$$

gelten. Wegen (6.23) erfüllt  $d_3$  diese Forderung exakt. Für  $c_3$  müsste entsprechend

$$c_3^{(\text{CW})} = -\frac{d_3}{2} = 0.130905$$

gelten. Tatsächlich liegt das angegebene  $c_3$  aber etwa 20% unter diesem Wert. Der Grund für diese Diskrepanz lässt sich ohne weitere Kenntnis der von Jasnow und Rudnick durchgeführten Rechnung nicht finden. Allerdings bleibt festzustellen, dass  $m(z)$  im Gegensatz zu  $\bar{\phi}_R(z)$  die Vorhersagen der Kapillarwellentheorie anscheinend *nicht* genau erfüllt.

Küster berechnet 2001 das Grenzflächenprofil unter Benutzung einer lokalen Potenzialapproximation bis zur 2-Loop-Ordnung ([Kü01], [KM07]). Bei dieser Methode werden nichtlokale Beiträge zur effektiven Wirkung vernachlässigt, so dass insbesondere keine Abhängigkeiten von der Systemgröße auftreten. Ebenso wie das oben diskutierte Profil von Ohta und Kawasaki handelt es sich also gewissermaßen um ein intrinsisches Profil. Ein direkter Vergleich mit meinem Ergebnis ist deshalb nicht möglich.

#### 6.4.2 Bestimmung der Systemgrößenabhängigkeit

Zur Systemgrößenabhängigkeit der Grenzflächendicke gibt es eine Reihe numerischer Untersuchungen, welche ich meinen Ergebnissen (6.23) und (6.24) gegenüberstellen möchte. Dabei handelt es sich um Monte-Carlo-Rechnungen für das dreidimensionale Ising-Modell, welche nahe der kritischen Temperatur universelles Verhalten zeigen und die Ergebnisse der  $\phi^4$ -Theorie reproduzieren sollten.

Um die Ergebnisse vergleichen zu können, bestimme ich numerische Werte für die Ergebnisse (6.11) und (6.21). Mit den drei in 5.3.4 genannten Werten für die universelle Kopplung  $u_R^*$  lassen sich jeweils sowohl die konstanten Anteile der zweiten Momente als auch die genauen Koeffizienten der  $\ln(m_R L)$ -Terme numerisch angeben. Für die Definition der Grenzflächendicke über den Gradienten finden sich die Werte in Tabelle 3, für die Definition über das Quadrat des Gradienten in Tabelle 4.

Bürkner und Stauffer ([BS83]) berechnen die Grenzflächendicke 1983 bei verschiedenen Temperaturen. Dabei verwenden sie das zweite Moment bezüglich einer Wahrscheinlichkeitsdichte  $p(z) \sim \phi'$  und finden eine deutliche logarithmische Abhängigkeit von der Systemgröße. Für  $T = 0.8 T_C$  finden sie

$$\langle z^2 \rangle_{\text{BS}} = 2.68 m_R^{-2} + 1.28 m_R^{-2} \ln(m_R L).$$

Sieben Jahre später „messen“ Mon et al. ([MLS90]) bei derselben Temperatur ebenfalls eine  $\ln(m_R L)$ -Abhängigkeit:

$$\langle z^2 \rangle_{\text{MLS}} = 0.76 m_R^{-2} + 1.77 m_R^{-2} \ln(m_R L).$$

Hasenbusch und Pinn wiederholen die Rechnung von Mon et al. in [HP93] und bestimmen die Grenzflächendicke dabei zu

$$\langle z^2 \rangle_{\text{HP}} = 3.44 m_R^{-2} + 1.44 m_R^{-2} \ln(m_R L).$$

Müller berechnet in [Mü04] die Grenzflächendicke sowohl bezüglich  $p(z) \sim \bar{\phi}'(z)$  als auch bezüglich  $p(z) \sim \bar{\phi}'^2(z)$ . Ihre Ergebnisse lauten

$$\begin{aligned} p(z) \sim \bar{\phi}'(z) : \quad \langle z^2 \rangle_{1, \text{MM}} &= (0.08 \pm 0.20) m_R^{-2} + (1.62 \pm 0.07) m_R^{-2} \ln(m_R L) \\ p(z) \sim \bar{\phi}'^2(z) : \quad \langle z^2 \rangle_{2, \text{MM}} &= -(0.56 \pm 0.24) m_R^{-2} + (0.92 \pm 0.18) m_R^{-2} \ln(m_R L). \end{aligned}$$

Vergleicht man die genannten Koeffizienten der  $\ln$ -Terme mit den Ergebnissen aus den Tabellen 3 und 4, so stellt man fest, dass diese 20–40% niedriger liegen, als die Monte-Carlo-Werte. Diese scheinbar große Abweichung ist in erster Linie auf die Störungsrechnung zurückzuführen. Münster ([Mü90]) berechnete für die Oberflächenspannung  $\sigma$  in erster Ordnung einen Korrekturbeitrag, der  $\sigma$  um 24% verringert. Diese Rechnung wurde in [HM98] von Hoppe und Münster auf 2-Loop-Ordnung erweitert, was wiederum zu einer Verringerung um 1% führte. Der mit der Störungsrechnung verbundene Fehler lässt sich nicht ohne Weiteres abschätzen, doch würde ich den Koeffizienten der  $\ln(m_R L)$ -Abhängigkeit mit dem 2-Schleifen-Wert der Oberflächenspannung berechnen, so erhielte ich z.B. für  $u_R^* = 14.3 \pm 0.1$  das Ergebnis

$$\begin{aligned} \langle z^2 \rangle_1 &= \text{const.} + (1.49 \pm 0.03 m_R^{-2}) \ln(m_R) \\ \langle z^2 \rangle_2 &= \text{const.} + (0.90 \pm 0.02 m_R^{-2}) \ln(m_R). \end{aligned}$$

Für  $\langle z^2 \rangle_1$  läge dieser Wert ziemlich mittig zwischen den genannten Monte-Carlo-Werten, für  $\langle z^2 \rangle_2$  würde er kaum von Müllers Ergebnis abweichen. Bedenkt man zudem die große Streuung der Literaturwerte untereinander, so liegt mein störungstheoretisches Ergebnis in der erwarteten Größenordnung.

**Tab. 3:** Numerische Ausdrücke für das zweite Moment bezüglich  $p(z) \sim \bar{\phi}'_R$ .

$u_R^*$	$\langle z^2 \rangle_1 m_R^2$
$14.3 \pm 0.1$	$(1.248 \pm 0.014) + (1.138 \pm 0.008) \ln(m_R L)$
$15.1 \pm 1.3$	$(1.134 \pm 0.186) + (1.202 \pm 0.104) \ln(m_R L)$
$17.1 \pm 1.9$	$(0.848 \pm 0.271) + (1.361 \pm 0.151) \ln(m_R L)$

**Tab. 4:** Wie Tab. 3, nun bezüglich  $p(z) \sim \bar{\phi}'^2_R$ .

$u_R^*$	$\langle z^2 \rangle_2 m_R^2$
$14.3 \pm 0.1$	$(0.056 \pm 0.009) + (0.683 \pm 0.004) \ln(m_R L)$
$15.1 \pm 1.3$	$(-0.013 \pm 0.112) + (0.721 \pm 0.062) \ln(m_R L)$
$17.1 \pm 1.9$	$(-0.186 \pm 0.164) + (0.817 \pm 0.091) \ln(m_R L)$

Stärker noch als die Steigungscoeiffizienten streuen die  $\langle z^2 \rangle$ -Achsenabschnitte der angegebenen „Geradengleichungen“ für  $p(z) \sim \bar{\phi}'(z)$ . Die Ursache dafür könnte bei systematischen Fehlern der Monte-Carlo-Rechnungen liegen. Die entsprechenden Achsenabschnitte in Tabelle 3 liegen wiederum im Mittelfeld der Vergleichswerte, so dass zumindest von einer groben Übereinstimmung gesprochen werden kann. Für  $p(z) \sim \bar{\phi}'^2(z)$  gibt es nur den Vergleichswert von Müller. Dieser deckt sich im Rahmen der Fehler nur mit meinem Wert für  $u_R^* = 17.1 \pm 1.9$ . Da der Fehler dieses Wertes aber, wie in Abschnitt 5.3.4 beschrieben, sehr wahrscheinlich überschätzt ist, ist diese Übereinstimmung mit Vorsicht zu genießen.

Abgesehen von den angegebenen zweiten Momenten gibt es noch eine weitere Vergleichsmöglichkeit mit den Ergebnissen von Müller. Sie schätzt den Kapillarwellen-Cut-Off für  $\langle z^2 \rangle_1$  auf  $(5 - 7) m_R^{-1}$ . Auch wenn die Einführung eines solchen Cut-Offs für die Ergebnisse meiner Arbeit nicht notwendig ist, lässt er sich dennoch definieren, indem man den konstanten Beitrag  $\sim (2\pi\sigma)^{-1}$  zu  $\langle z^2 \rangle_1$  (siehe Gl. (6.23)) als negativen Logarithmus eines Cut-Offs  $l$  betrachtet. Dadurch bekommt  $\langle z^2 \rangle_1$  exakt die aus der Faltungsapproximation bekannte Form (2.9). Man findet so

$$l = \exp\left(\frac{\pi^2}{3}\eta - \alpha\right) m_R^{-1} \approx 6.015 m_R^{-1}.$$

Die Zuordnung des konstanten Beitrages zum Kapillarwellen-Anteil ist dabei aber völlig willkürlich und erfolgt nur der Vergleichbarkeit halber. Ebenso gut lässt er sich als 1-Loop-Beitrag zum intrinsischen Profil ansehen. Festzuhalten bleibt aber, dass  $l$  genau mit der Abschätzung von Müller übereinstimmt.

# Zusammenfassung und Ausblick

Wie in dieser Arbeit gezeigt wurde, kann die aus der Kapillarwellentheorie ([BLS65]) vorhergesagte logarithmische Abhängigkeit der Grenzflächendicke von der Systemgröße  $L$  *direkt* aus der  $\phi^4$ -Theorie, also aus *First Principles* der statistischen Feldtheorie, hergeleitet werden.

Dazu wurde in einer Störungsrechnung mittels der effektiven Wirkung das Profil der Grenzfläche in 1-Loop-Ordnung bestimmt. Es hat die Form

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

mit den Konstanten

$$\alpha = \ln\left(\frac{2\sqrt{\pi}}{3\Gamma^2(1/4)}\right) + \gamma, \quad \eta = \frac{13}{16} - \frac{3}{4} \ln(3).$$

Um die Dicke der Grenzfläche wurde über das zweite Moment  $\langle z^2 \rangle$  bestimmt, wobei zwei verschiedene Gewichte,  $p_1(z) \sim \partial_z \bar{\phi}$  und  $p_2(z) \sim (\partial_z \bar{\phi})^2$ , verwendet wurden. Die resultierenden Dicken lauten

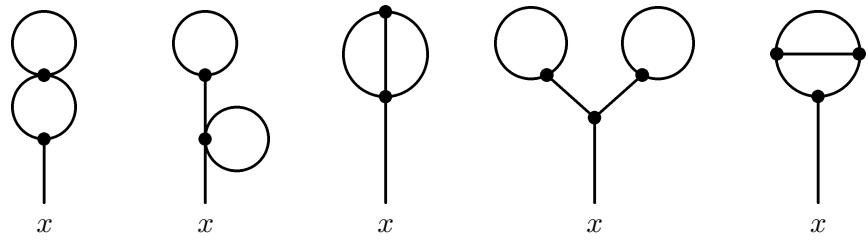
$$\langle z^2 \rangle_1 = \frac{\pi^2}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \alpha - \frac{\pi^2}{3} \eta \right) + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L), \\ \langle z^2 \rangle_2 = \frac{\pi^2 - 6}{3m_R^2} + \frac{1}{2\pi\sigma} \left( \frac{3}{5} \alpha - \frac{\pi^2 - 6}{3} \eta \right) + \frac{3}{5} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L).$$

Die Kernaussage der Faltungsnäherung, nämlich die Beziehung

$$w^2 = \text{const.} + \frac{1}{2\pi\sigma} \ln(m_R L) \tag{6.29}$$

zwischen Grenzflächendicke  $w$  und Systemgröße  $L$  stimmt genau mit  $\langle z^2 \rangle_1$  überein, lässt sich also direkt aus der Feldtheorie ableiten ohne auf zusätzliche Annahmen zurückzugreifen. Damit entfällt auch die mit einer gewissen Willkür verbundene Wahl eines Kapillarwellen-Cut-Offs  $l$ . Auf Kunstgriffe, wie sie bisher zur theoretischen Begründung der Beziehung (6.29) nötig waren, ist man also nicht angewiesen. Stattdessen zeigt sich eine Theorie aus einem Guss.

Für die Zukunft gibt es nun verschiedene Perspektiven. Die naheliegendste Möglichkeit, die vorliegenden Ergebnisse zu verfeinern, besteht darin, die Störungsrechnung auf die nächste Ordnung zu erweitern. Zum Grenzflächenprofil tragen dann die 2-Loop-Graphen



bei, von denen insbesondere der letzte schwierig zu berechnen ist.

Der Vergleich mit Monte-Carlo-Daten hat gezeigt, dass die numerischen Untersuchungen offensichtlich mit großen systematischen Fehlern zu kämpfen haben. Auch auf diesem Gebiet müssen also Fortschritte erzielt werden, um einheitliche und verlässliche Ergebnisse zu erhalten. Zum direkten Vergleich mit den hier gefundenen Ergebnissen wären vor allem numerische Berechnungen zu Grenzflächen in der Gitter- $\phi^4$ -Theorie interessant, da bei diesen der Einfluss von Ising-Artefakten ausgeschlossen werden kann.

# A Dimensionen der vorkommenden Größen

Bei umfangreicheren Rechnungen ist es nützlich, die Dimensionen aller beteiligten Größen zu kennen.

## Größen im Hamiltonian

Die Zustandsumme lautet

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta \int d^D x \mathcal{H}[\phi]}.$$

Der Exponent muss insgesamt dimensionslos sein, so dass wegen  $[\beta] = 1$

$$[\mathcal{H}] = [V]^{-1} = [L]^{-D} \quad (\text{A.1})$$

gilt, wobei  $V$  das Volumen und  $D$  die Zahl der Dimensionen angibt. Die Hamiltondichte ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (\nabla\phi)^2 - \frac{m_0^2}{4} \phi^2 + \frac{g_0}{4!} \phi^4 + \frac{3m_0^4}{8g_0}.$$

Um Gl. (A.1) zu erfüllen, müssen die einzelnen Bestandteile die folgenden Dimensionen haben:

$$\begin{aligned} [(\nabla\phi)^2] &= [L]^{-2} [\phi]^2 \stackrel{!}{=} [L]^{-D} \Rightarrow [\phi] = [L]^{(2-D)/2} \\ [m_0]^2 [\phi]^2 &= [m]^2 [L]^{2-D} \stackrel{!}{=} L^{-D} \Rightarrow [m] = [L]^{-1} \\ [g_0] [\phi]^4 &= [g] [L]^{4-2D} \stackrel{!}{=} [L]^{-D} \Rightarrow [g] = [L]^{D-4} \\ \frac{[m_0]^4}{[g_0]} &= \frac{[L]^{-4}}{[L]^{D-4}} \stackrel{!}{=} [L]^{-D}. \end{aligned}$$

In Massendimensionen ausgedrückt heißt das

$$[\phi] = [m]^{(D-2)/2} \quad [g] = [m]^{4-D}.$$

Speziell für  $D = 3$  erhält man demnach

$$[\phi] = [m]^{(1/2)} \quad [g] = [m].$$

## Die Koeffizienten $C_i$ und $\tilde{C}_i$

Die Koeffizienten  $C_i$  haben allesamt die Dimension

$$[C_i] = [L]^{1-D} [m]^{-1} = [m]^{D-2}.$$

Aus der Beziehung  $\tilde{C}_i = (g_0/2)v_0 \sum C_j$  folgt

$$[\tilde{C}_i] = [g_0][v_0][C_i] = [m]^{4-D}[v_0][m]^{D-2} = [v_0][m]^2.$$

Mit  $v_0 = \sqrt{3m_0^2/g_0}$ , also

$$[v_0] = [m][m]^{(D-4)/2} = [m]^{(D-2)/2}$$

ergibt sich die Massendimension von  $\tilde{C}_i$  zu

$$[\tilde{C}_i] = [m]^{(D-2)/2}[m]^2 = [m]^{(D+2)/2}.$$

Im Falle  $D = 3$  sind die Dimensionen also wie folgt:

$$[v_0] = [m]^{1/2} \quad [C_i] = [m] \quad [\tilde{C}_i] = [m]^{5/2}.$$

## B Berechnungen zum naiven Moment

Es folgt die detaillierte Berechnung des naiven zweiten Momentes  $\langle z^2 \rangle_n$ . Das Profil  $\phi_n(z)$  lautet

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

Die Ableitung dieser Funktion berechne ich zu

$$\bar{\phi}'_n(z) = \underbrace{v_R \frac{m_R}{2} \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right)}_{=: A} + \\ \underbrace{+ v_R \frac{u_R}{8\pi} \frac{m_R}{2} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left[ 2 \tanh^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right]}_{=: B} + \\ + \underbrace{\frac{u_R}{8\pi} \frac{m_R}{2} \eta \left[ \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) - 2 \left( \frac{m_R}{2}z \right) \tanh\left(\frac{m_R}{2}z\right) \operatorname{sech}^2\left(\frac{m_R}{2}z\right) \right]}_{=: C}.$$

Damit ist das Quadrat der Ableitung gegeben als

$$\bar{\phi}'_n(z)^2 = A^2 + B^2 + C^2 + 2AB + 2AC + 2BC,$$

wobei ich die einzelnen Summanden wie folgt berechne:

$$A^2 = v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right), \quad (\text{B.1})$$

$$\begin{aligned} B^2 = & v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 \left[ 4 \tanh^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) + \operatorname{sech}^8 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \right. \\ & \left. - 4 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} C^2 = & v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta^2 \left[ \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) + 4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \right. \\ & \left. - 4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$2AB = v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left[ 2 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right], \quad (\text{B.4})$$

$$2AC = v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \frac{u_R}{8\pi} \eta \left[ \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right], \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} 2BC = & v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left[ 2 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \right. \\ & \left. - 4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh^3 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) + 2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Nachdem  $\bar{\phi}_n'^2(z)$  nun bekannt ist, muss es für die Bestimmung der Normierungskonstanten und schließlich des vollständigen zweiten Momentes integriert werden. Erstere erhalte ich aus der Beziehung

$$\tilde{\mathcal{N}}^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \tilde{p}(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \bar{\phi}_n'^2(z).$$

Um sie zu bestimmen, berechne ich die Integrale der Summanden (B.1) bis (B.6) und erhalte

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz A^2 = & v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dz \underbrace{\operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{8}{3m_R}} = \frac{2}{3} v_R^2 m_R, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

---


$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dz B^2 = & v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 \left[ 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{8}{35m_R}} + \right. \\
& \left. + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^8 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{32}{105m_R}} \right] \\
& = \frac{64}{35m_R} \\
& = \frac{8}{21} v_R^2 m_R \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2, \tag{B.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dz C^2 = & v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta^2 \left[ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{8}{3m_R}} + \right. \\
& \left. + 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{2\pi^2}{45m_R}} - \right. \\
& \left. - 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{2}{3m_R}} \right] \\
& = \frac{2\pi^2}{45} v_R^2 m_R \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta^2, \tag{B.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
2 \int_{-\infty}^{\infty} dz AB = & v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left[ 2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{8}{15m_R}} - \right. \\
& \left. - \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{32}{15m}} \right] \\
& = - \frac{8}{15} v_R^2 m_R \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right), \tag{B.10}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz AC &= v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \frac{u_R}{8\pi} \eta \left[ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{8}{3m_R}} - \right. \\
 &\quad \left. - 2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{2}{3m_R}} \right] \\
 &= \frac{2}{3} v_R^2 m_R \frac{u_R}{8\pi} \eta, \tag{B.11}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 2 \int_{-\infty}^{\infty} dz BC &= v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \left[ \underbrace{2 \int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{8}{15m_R}} - \right. \\
 &\quad \left. - \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{32}{15m_R}} - 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh^3 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{14}{45m_R}} + \right. \\
 &\quad \left. + 2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right) \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{16}{45m_R}} \right] \\
 &= - \frac{4}{5} v_R^2 m_R \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right). \tag{B.12}
 \end{aligned}$$

Nun sind alle Summanden des Integrals von  $\bar{\phi}'_n$  bestimmt. Damit kann ich die inverse Normierungskonstante in der Form

$$\begin{aligned}
 \tilde{\mathcal{N}}^{-1}(L) &= \frac{2}{3} v_R^2 m_R \left\{ 1 + \frac{u_R}{8\pi} \left[ \eta - \frac{4}{5} \left( \frac{\alpha}{2} - \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \right] + \right. \\
 &\quad \left. + \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left[ \frac{4}{7} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 + \frac{\pi^2}{15} \eta^2 - \frac{6}{5} \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

angeben.

Für die Berechnung des zweiten Momentes  $\langle z^2 \rangle_n$  ist eine erneute Integration der Summanden (B.1) bis (B.6) erforderlich, wobei diese zuvor noch jeweils mit  $z^2$  multipliziert werden, also

$$\begin{aligned}
 \langle z^2 \rangle_n &= \tilde{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \bar{\phi}'_n(z) \\
 &= \tilde{\mathcal{N}} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 [A^2 + B^2 + C^2 + 2AB + 2AC + 2BC].
 \end{aligned}$$

---

Die Ergebnisse der sechs Integrationen, die ich mit Hilfe des Programms Mathematica ([MAT]) durchgeführt habe, lauten wie folgt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 A^2 = v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right)}_{= \frac{8}{9m_R} (\pi^2 - 6)} = \frac{v_R^2}{m_R} \frac{2(\pi^2 - 6)}{9}, \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 B^2 &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 \left[ 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^4\left(\frac{m_R}{2} z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right) z^2}_{= \frac{8(14 + 3\pi^2)}{315m_R^3}} + \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^8\left(\frac{m_R}{2} z\right) z^2}_{= \frac{32(-49 + 6\pi^2)}{315m_R^3}} - 4 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \tanh^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \operatorname{sech}^6\left(\frac{m_R}{2} z\right) z^2}_{= \frac{16(-7 + 2\pi^2)}{315m_R^3}} \right] \\ &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 \times \\ &\quad \times \left[ \frac{448 + 96\pi^2 - 1568 + 192\pi^2 + 448 - 128\pi^2}{315m_R^3} \right] \\ &= \left( \frac{8}{63} \pi^2 - \frac{8}{15} \right) \frac{v_R^2}{m_R} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2, \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 C^2 &= v_R^2 \frac{m_R^2}{4} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta^2 \left[ \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right) z^2}_{= \frac{8(\pi^2 - 6)}{9m_R^3}} + \right. \\ &\quad \left. + 4 \underbrace{\frac{4}{m_R^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^4 \tanh^2\left(\frac{m_R}{2} z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right)}_{= \frac{7\pi^4 - 360}{450m_R}} - \right. \\ &\quad \left. - 4 \underbrace{\frac{4}{m_R^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^3 \tanh\left(\frac{m_R}{2} z\right) \operatorname{sech}^4\left(\frac{m_R}{2} z\right)}_{= \frac{(\pi^2 - 6)}{6m_R}} \right] \\ &= \frac{v_R^2}{m_R} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta^2 \left( \frac{14}{225} \pi^4 - \frac{4}{9} \pi^2 - \frac{8}{15} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 AB &= v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \times \\
&\times \left[ 2 \frac{4}{m_R^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{2\pi^2}{45m_R}} - \right. \\
&\left. - \frac{4}{m_R^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{2}{m_R} \left( \frac{4\pi^2}{45} - \frac{2}{3} \right)} \right] \\
&= - \frac{8}{45} (\pi^2 - 15) \frac{v_R^2}{m_R} \frac{u_R}{8\pi} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right), \tag{B.16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 AC &= v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \frac{u_R}{8\pi} \eta \left[ \frac{4}{m_R^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{2(\pi^2 - 6)}{9m_R}} - \right. \\
&\left. - 2 \frac{4}{m_R^2} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^3 \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right)}_{= \frac{\pi^2 - 6}{6m_R}} \right] \\
&= - \frac{v_R^2}{m_R} \frac{u_R}{8\pi} \eta \frac{2(\pi^2 - 6)}{9}, \tag{B.17}
\end{aligned}$$

---


$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dz z^2 BC &= v_R^2 \frac{m_R^2}{2} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \times \\
&\times \underbrace{\left[ 2 \frac{4}{m_R^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \tanh^2 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) - \right.} \\
&\left. = \frac{2\pi^2}{45m_R} \right. \\
&- \underbrace{\frac{4}{m_R^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^2 \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) -} \\
&\left. = \frac{2}{m_R} \left( \frac{4\pi^2}{45} - \frac{2}{3} \right) \right. \\
&- \underbrace{4 \frac{4}{m_R^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^3 \tanh^3 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^4 \left( \frac{m_R}{2} z \right) +} \\
&\left. = \frac{1}{m_R} \left( \frac{7\pi^2}{90} - \frac{1}{3} \right) \right. \\
&+ \underbrace{2 \frac{4}{m_R^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left( \frac{m_R}{2} z \right)^3 \tanh \left( \frac{m_R}{2} z \right) \operatorname{sech}^6 \left( \frac{m_R}{2} z \right) \left. \right] \\
&\left. = \frac{2}{m_R} \left( \frac{2\pi^2}{45} - \frac{1}{3} \right) \right. \\
&= \left( \frac{8}{3} - \frac{4}{9}\pi^2 \right) \frac{v_R^2}{m_R} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right). \tag{B.18}
\end{aligned}$$

Damit ist das zweite Moment  $\langle z^2 \rangle_n$  vollständig bestimmt: Summation der Ergebnisse von (B.13) bis (B.18), multipliziert mit der Normierungskonstanten  $\tilde{\mathcal{N}}(L)$  ergibt:

$$\begin{aligned}
\langle z^2 \rangle_n &= \frac{v_R^2}{m_R} \mathcal{N} \left\{ \frac{2(\pi^2 - 6)}{9} - \frac{u_R}{8\pi} \left\{ \frac{8(\pi^2 - 15)}{45} \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) + \frac{2(\pi^2 - 6)}{9} \eta \right\} + \right. \\
&+ \left( \frac{u_R}{8\pi} \right)^2 \left\{ \left[ \frac{8\pi^2}{63} - \frac{8}{15} \right] \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right)^2 + \left[ \frac{14\pi^4}{225} - \frac{4\pi^2}{9} - \frac{8}{15} \right] \eta^2 + \right. \\
&\left. \left. + \left[ \frac{8}{3} - \frac{4\pi^2}{9} \right] \eta \left( \frac{\alpha}{2} + \frac{1}{2} \ln(m_R L) \right) \right\} \right\}.
\end{aligned}$$



# Literaturverzeichnis

- [AL64] E. S. Abers and W. Lee, Gauge Theories, *Phys. Rep.* **9 C**: Number 1 (1973)
- [An69] T. Andrews, On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter, *Phil. Trans. Royal Soc.* **159**: 575-591, 1869
- [AR53] D. Atack and O. K. Rice, The interfacial tension and other properties of the cyclohexane + aniline system near the critical solution temperature, *Discuss. Faraday Soc.* **15**: 210 - 218 (1953)
- [AR54] D. Atack and O. K. Rice, Critical Phenomena in the Cyclohexane-Aniline System, *J. Chem. Phys.* **22**: 382-385 (1954)
- [BL01] K. Binder and E. Luijten, Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models, *Phys. Rep.* **344**: 179-253 (2001)
- [BLS65] F. P. Buff, R. A. Lovett and F. H. Stillinger, Interfacial Density Profile for Fluids in the Critical Region, *Phys. Rev. Lett.* **15**: 621-623 (1965)
- [Br92] L. S. Brown, *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press (1992)
- [BS83] E. Bürkner and D. Stauffer, Monte Carlo Study of Surface Roughening in the Three-Dimensional Ising Model, *Z. Phys. B* **53**: 241-243 (1983)
- [CH57] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *J. Chem. Phys.* **28**: 258-267 (1958)
- [CH97] M. Caselle and M. Hasenbusch, Universal Amplitude Ratios in the 3D Ising Model, *J. Phys. A Math. Gen.* **30**: 4963 (1997)
- [Co85] S. Coleman, *Aspects of Symmetry*, Cambridge University Press (1985)
- [GKM96] C. Gutsfeld, J. Küster and G. Münster, Calculation of universal amplitude ratios in three-loop order, *Nuclear Physics B* **479**: 654-662 (1996)
- [GS75] J.-L. Gervais and B. Sakita, Extended particles in quantum field theories, *Phys. Rev. 2943-2945 D* **11**: 2943-2945 (1975)
- [Hi78] J. Hietarinta, New look at the zero-mode problem of kink translations, *Phys. Rev. D* **19**: 2426-2428 (1978)
- [Ho97] P. Hoppe, Analytische Berechnung der Oberflächenspannung im dreidimensionalen  $\phi^4$ -Modell in 2-Loop-Ordnung, Dissertation (1997)

- [HM98] P. Hoppe and G. Münster, The Interface Tension of the Three-Dimensional Ising Model in Two-Loop Order, *Phys. Lett. A* **238** (1998)
- [HP93] M. Hasenbusch and K. Pinn, Surface Tension, Surface Stiffness, and Surface Width of the 3-dimensional Ising Model on a Cubic Lattice, *Nucl. Phys. B* **30**: 857-860 (1993)
- [Ja74] R. Jackiw, Functional Evaluation of the effective potential, *Phys. Rev. D* **9**: 1668-1701 (1974)
- [Ja84] D. Jasnow, Critical Phenomena at Interfaces, *Rep. Prog. Phys.* **97**: 1059-1132, (1984)
- [JR78] D. Jasnow and J. Rudnick, Interfacial profile in three dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **41**: 698 (1978)
- [KM07] J. Küster and G. Münster, The Interfacial Profile in Two-Loop Order, *J. Stat. Phys.* **129**: 441 (2007)
- [KS01] H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of  $\phi^4$ -Theories*, World Scientific (2001)
- [Kü01] J. Küster, *Kritisches Verhalten fluktuierender Grenzflächen*, Dissertation (2001)
- [LL66] L. D. Landau, E. N. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band VI - Hydrodynamik*, Akademie-Verlag Berlin (1966)
- [LL87] L. D. Landau, E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band V - Statistische Physik*, Akademie-Verlag Berlin (1987)
- [LB91] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford University Press (1991)
- [MAP] MapleSoft, Maple 9.5, <http://www.maplesoft.com>
- [MAT] Wolfram Research, Mathematica 5.2, <http://www.wolfram.com>
- [Ma13] L. Mandelstam, Über die Rauhigkeit freier Flüssigkeitsoberflächen, *Annalen der Physik* **41**: 609-624 (1913)
- [MLS90] K. K. Mon, D. P. Landau and D. Stauffer, Interface roughening in the three-dimensional Ising model, *Phys. Rev. B* **42**: 545 (1990)
- [MM04] M. Müller and G. Münster, Profile and Width of Rough Interfaces, *J. Stat. Phys.* **118** (2005) (arXiv:cond-mat/0405673)
- [Mü89] G. Münster, Tunneling Amplitude and Surface Tension in  $\phi^4$ -Theory, *Nucl. Phys. B* **324**: 630-642 (1989)
- [Mü90] G. Münster, Interface Tension in Three-Dimensional Systems from Field Theory, *Nuclear Physics B* **340**: 559-567 (1990)

- [Mü04] M. Müller, Fluktuationen kritischer Grenzflächen auf verschiedenen Größenskalen, Diplomarbeit (2004)
- [OK77] T. Ohta and K. Kawasaki, Renormalization Group Approach to the Interfacial Order Parameter Profile near the Critical Point, *Prog. Theor. Phys.* **58**: 467-481 (1977)
- [Pa88] G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley (1988)
- [PS95] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press (1995)
- [Ra75] R. Rajamaran, Non-perturbative semi-classical methods in quantum field theory (a pedagogical review), *Phys. Rep.* **21 C**: 227-313 (1975).
- [Ra82] R. Rajamaran, *Solitons and Instantons*, North-Holland Publishing Company (1982)
- [RJ78] J. Rudnick and D. Jasnow,  $\epsilon$ -Expansion for the Interfacial Profile, *Phys. Rev. B* **17**: 1351-1354 (1978)
- [RZW94] C. Ruge, P. Zhu and F. Wagner, Correlation Functions in Ising models, *Physica A* **209** 431-443 (1994)
- [RW02] J.S. Rowlinson and B. Widom, *Molecular Theory of Capillarity*, Dover Publications (2002)
- [Ry96] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory - Second edition*, Cambridge University Press (1996)
- [ZJ02] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press (2002)



# Danksagung

Es ist ein langer Weg zur Vollendung einer Diplomarbeit. Zum Glück geht man ihn nicht ganz allein. Deshalb möchte ich hier all jenen Menschen meinen Dank aussprechen, die - direkt oder indirekt - zum Gelingen meiner Diplomarbeit beigetragen haben:

- An erster Stelle danke ich Herrn Prof. Dr. Gernot Münster für die interessante Aufgabenstellung und die kontinuierliche Unterstützung während des gesamten Entstehungsprozesses der vorliegenden Arbeit.
- Meinen Kollegen Tobias Sudmann und Jaïr Wuilloud danke ich für das beste Büro im 4. Stock. Tobias Sudmann insbesondere für seine TeXpertise und die angenehme politische Spannung. Jaïr Wuilloud für die Lösung des Energieproblems: In seiner Kaffeetasse ist kalte Fusion längst Realität.
- Meinen KorrekturleserInnen Cornelia Petrović und Tobias Sudmann danke ich für zahlreiche gute Vorschläge.
- Meinem Vater danke ich für die verlässliche Unterstützung, die einen großen Teil zum Gelingen meines Studiums beigetragen hat.
- Ich danke auch meiner Mutter, die mir nicht zuletzt akademisches Vorbild war und mit der ich sicher manches spannende Gespräch über die Physik hätte führen können.



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

Münster, im Januar 2008