

Sabine Rotsch

Analytische Berechnung der Nukleationsrate bei
Phasenübergängen erster Ordnung

1996

Theoretische Physik

Analytische Berechnung der Nukleationsrate bei
Phasenübergängen erster Ordnung

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von
Sabine Rotsch, geb. Klessinger
aus Göttingen
1996

Dekan: Prof. Dr. F.-K. Holtmeier
Erster Gutachter: Prof. Dr. G. Münster
Zweiter Gutachter: Priv.-Doz. Dr. K. Pinn
Tag der mündlichen Prüfung:
Tag der Promotion:

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Nukleationstheorie	11
2.1	Übergangswahrscheinlichkeit — imaginäre Energie	14
2.2	Sattelpunktentwicklung	15
2.3	Die stationäre Lösung — Bounce-Lösung	17
2.4	Beiträge unendlich vieler Bounce-Lösungen	21
2.5	Eigenwerte der zweiten Ableitung der Wirkung	24
2.5.1	Nullmode	24
2.5.2	Negative Mode	25
2.6	Analytische Fortsetzung des Integrals über negative Moden	26
2.7	Berechnung der Übergangsrate	30
2.8	Mehrdimensionale Theorie	31
2.9	Übergangsrate bei endlicher Temperatur	35
3	Klassische Lösung für ein Bläschen	39
3.1	Thin wall approximation	39
3.2	Berechnung der Bounce-Lösung	46
3.3	Berechnung der Wirkung der Bounce-Lösung und des kritischen Radius	54
4	Die hoch- und niederfrequenten Anteile der Fluktuationsdeterminante	65
4.1	Übersicht über die Methodik der Berechnung	65

4.2	Zetafunktions-Regularisierung	68
4.3	Die Seeley-Entwicklung — Heat kernel für kleine t	70
4.3.1	Die rekursive Bestimmung der Koeffizienten	71
4.3.2	Bestimmung der Koeffizienten mittels Greenfunktionen	74
4.3.3	Entwicklung nach ebenen Wellen	76
4.3.4	Entwicklung nach Kugelflächen- und Besselfunktionen	89
4.4	Dimensionelle Regularisierung — Berechnung von $I'_<$	92
4.4.1	Seeley-Entwicklung in $D = 3 - \epsilon$ Dimensionen	92
4.4.2	Regularisierung	94
4.4.3	Berechnung der Zetafunktion	96
4.4.4	Berechnung der Dimension der Determinante	98
4.5	Die niedrigsten Eigenwerte — Heat kernel für große t	99
4.5.1	Störungstheorie	101
4.5.2	Korrekturen zweiter Ordnung	103
4.6	Der niederfrequente Anteil — Berechnung von $I'_>$	106
4.6.1	Aufsummation des Bands um Null — $I^0_>$	106
4.6.2	Aufsummation des Bands um Drei — $I^3_>$	115
4.6.3	Abschätzung des Beitrags der kontinuierlichen Eigenwerte — $I^k_>$	119
5	Berechnung der Fluktationsdeterminante	135
5.1	Fehlerbetrachtungen	135
5.1.1	Fehler von $I'_<$	136
5.1.2	Fehler von $I'_>$	137
5.2	Methode des scharfen Cutoffs	138
5.3	Scharfer Cutoff mit separiertem Band um Null	143
5.4	Massencutoff	145
5.5	Massencutoff mit separierten Bändern	148
5.6	Exakter Ausdruck für die führende Ordnung	150

5.7	Vergleich der verschiedenen Verfahren	151
5.8	Erfolgreiche Verfahren	154
5.8.1	Zweiseitig kontinuierlicher Cutoff	154
5.8.2	Zweiseitiger Massencutoff	155
6	Berechnung der Nukleationsrate	157
7	Zusammenfassung	161
A	Die Existenz genau einer negativen Mode	163
B	Die Lösung mit der kleinsten Wirkung	167
C	Integraltafel	171
D	Berechnung der Koeffizienten der Seeley–Entwicklung	173
E	Die Koeffizienten der Seeley–Entwicklungen des Massencutoffs und der einzelnen Bänder	181
	Literaturverzeichnis	187
	Danksagung	193
	Lebenslauf	195

Kapitel 1

Einleitung

Die Expansion des frühen Universums begann nach dem Standardmodell der Kosmologie in einem Zustand extrem hoher Dichte und bei einer Temperatur, die wesentlich über der kritischen Temperatur der großen vereinheitlichten Theorien (GUT) lag. In den frühen Entwicklungsstadien befand sich das Universum also in einem Zustand ungebrochener Symmetrien. Mit dem Absinken der Temperatur auf $10^{14} - 10^{15}$ GeV bzw. 10^{27} K muß es zu einem oder mehreren Phasenübergängen gekommen sein, wobei die Symmetrie zwischen der starken und der elektroschwachen Wechselwirkung gebrochen wurde und der Erwartungswert des Skalarfeldes einen von Null verschiedenen Wert annahm. Hier begann die Inflation des Universums.

Nach 10^{-10} s, als die Temperatur auf 100 GeV bzw. 10^{15} K gefallen war, wurde die Symmetrie zwischen der schwachen und der elektromagnetischen Wechselwirkung gebrochen.

Schließlich muß bei $T \sim 10^2$ MeV (10^{12} K) noch ein Phasenübergang (oder zwei verschiedene) stattgefunden haben, bei dem die chirale Invarianz der Theorie der starken Wechselwirkung gebrochen wurde und sich die Quarks zu Hadronen vereinigten (*Confinement*). Die verschiedenen Stadien des Universums sind in Abbildung 1.1 dargestellt.

Der elektroschwache Phasenübergang bei einer Temperatur von 100 GeV wird dazu herangezogen, die heute beobachtete *Baryonenzahlasymmetrie*, d.h. den Überschuß von Materie gegenüber Antimaterie, zu erklären [1]. Das beobachtbare Universum besteht zum gegenwärtigen Zeitpunkt fast ausschließlich aus Teilchen; Antiteilchen werden nur kurzfristig in Teilchen-Antiteilchenpaaren erzeugt. Da es keinen Grund zur Bevorzugung von Materie gegenüber Antimaterie gibt, geht man davon aus, daß die Baryonenzahl, d.h. die Anzahl der Baryonen minus der Anzahl der Antibaryonen, zu Beginn des Universums Null war. Die Nichterhaltung der Baryonenzahl ist verknüpft mit Übergängen zwischen den durch verschiedene *Chern-Simons-Zahlen* gekennzeichneten Vakua. Dieser Prozeß wird mit Instantonlösungen assoziiert, welche das Tunneln durch die Barriere zwischen den Vakua beschreiben. Wegen der kleinen Größenordnung der elektroschwachen Kopplung ist die Tunnelrate bei niedrigen Energien verschwindend gering. Auch über einen Zeitraum

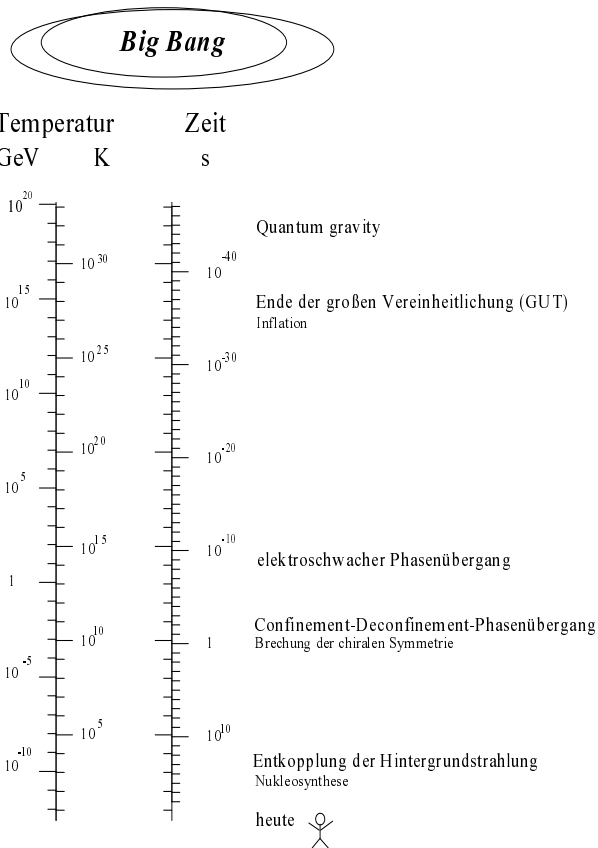


Abbildung 1.1: Entwicklung des frühen Universums

von der Größenordnung der Lebensdauer des Universums (etwa 10 Milliarden Jahre) ist nicht mit einem einzigen derartigen Tunnelübergang zu rechnen. Bei endlichen Temperaturen kann der Übergang aber durch thermische Effekte vorangetrieben werden [2]. Die Barriere wird nun überquert statt untertunnelt. Eine solche instabile Lösung nennt man *Sphaleron* [3]. Eine Berechnung der durch Sphaleronen bedingten Übergangsrates befindet sich in [4], in [5] ist sie simuliert worden. Weitere Arbeiten zum elektroschwachen Phasenübergang finden sich in [6].

Der nächste Phasenübergang, den das Universum durchlaufen hat, ist der Confinement-Deconfinement-Übergang nach 10^{-6} s. Auch dies ist wieder ein Phasenübergang erster Ordnung. Das Universum ist jetzt bereits auf 160–230 MeV abgekühlt [7], wenn die chirale

Invarianz der starken Wechselwirkung gebrochen wird. Aus den freien Quarks (Deconfinement) bilden sich farblich neutrale Hadronen (Confinement). Der Ordnungsparameter für diesen Phasenübergang ist der Erwartungswert des *Polyakov-loops* [8]. Bei diesem Phasenübergang unterscheidet man zwei verschiedene Mechanismen, je nachdem, ob der Bereich der neuen Confinementphase schichtförmig ist (*perfect wetting*) oder blasenförmig (*Nukleationstheorie*). Für die in derselben Universalitätsklasse wie die Quantenchromodynamik (QCD) liegenden Potts-Modelle ist *perfect wetting* nachgewiesen worden [9]. In dieser Arbeit soll aber die durch die Nukleationstheorie beschriebene Blasenbildung untersucht werden.

Ein weiterer, sehr anschaulicher Phasenübergang erster Ordnung, der ebenfalls durch die hier zu untersuchende Nukleationstheorie beschrieben wird, findet sehr viel später statt, nämlich 10^{17} s nach der Entstehung des Universums, wenn der Mensch Tee kocht. Beim Überschreiten des Siedepunktes bilden sich im dann metastabilen, flüssigen Zustand Blasen von stabilem Wasserdampf. Eine erste Erwähnung solcher metastabilen Zustände findet sich 1724 bei Fahrenheit [10]. Die Theorie dazu geht zurück auf Becker und Dörings Behandlung der Tröpfchenbildung in flüssigen Systemen [11]. Phänomenologische Behandlungen wurden durch Cahn und Hilliard [12] und Langer [13, 14, 15, 16] im Kontext der Ginzburg-Landau-Theorie durchgeführt. Eine Zusammenfassung findet sich in [17]. In der Quantenfeldtheorie wurde die Theorie bei nichtverschwindender Temperatur in der Arbeit von Voloshin et al. [18] und Affleck [19] entwickelt und danach in den Arbeiten von Callan und Coleman [20, 21, 22], in denen ein euklidischer Zugang zur Theorie des Zerfalls eines metastabilen Vakuums vorgeschlagen wurde, wesentlich ausgebaut. Auch numerische Überprüfungen der Nukleationstheorie sind in einer 1+1 dimensional klassischen Theorie [23] und in 2+1 Dimensionen [24] erfolgt.

Ein solcher symmetriebrechender Phasenübergang kann von erster oder zweiter Ordnung sein. Bei einem Phasenübergang erster Ordnung bildet das Potential beim Absenken der Temperatur ein weiteres Minimum aus, welches unterhalb der kritischen Temperatur zum stabilen Minimum wird. Zwischen diesen verschiedenen Minima besteht eine Barriere, welche dazu führt, daß sich der zugehörige Ordnungsparameter unstetig ändert. Dies ist das Kriterium für einen Phasenübergang erster Ordnung. Im Gegensatz dazu ist bei Phasenübergängen zweiter Ordnung der Ordnungsparameter stetig, jedoch seine Ableitung unstetig. Ein Phasenübergang erster Ordnung findet auch nicht spontan statt, sondern es kommt zur Unterkühlung. Der metastabile Zustand ist aufgrund der Barriere stabil gegen kleine Fluktuationen, die thermodynamischen Eigenschaften sind ähnlich denen im Gleichgewichtszustand. Die beim Umwandeln einzelner kleiner Bereiche (*bubbles*) zur Bildung der Trennwand aufzuwendende Energie (Oberflächenenergie) ist größer als der Energiegewinn durch den Übergang in den stabilen Zustand (Volumenenergie). Die sich bildenden Blasen müssen erst eine kritische Größe erreicht haben, damit die Energiebilanz positiv wird. Irgendwann wird aber durch thermische oder Quantenfluktuationen, je nach Verhältnis der Umgebungstemperatur zur Nukleationsbarriere, eine solche kritische Blase gebildet. Sie wächst dann weiter und wandelt metastabile Materie in stabile Materie um. Die Zeit, bis sich eine solche kritische Blase bildet und während derer das System unterkühlt ist, ist wesentlich länger als die Zeit, die das nachfolgende Wachsen der Blasen benötigt. Die

Blasenbildung ist in [25] simuliert worden. Einen Überblick über den Zerfall metastabiler Zustände gibt der Review-Artikel [26].

Der oben beschriebene Prozeß entspricht einer *homogenen Nukleation*. Im Gegensatz zur heterogenen Nukleation wird der Phasenübergang hier nicht durch Fremdkörper, wie Staub und Verunreinigungen oder Gefäßwände ausgelöst. Die Phasenübergänge des frühen Universums sind alle homogen.

Die homogene Nukleationstheorie ist Thema dieser Arbeit. Die Bläschenbildung läßt sich vergleichen mit dem quantenmechanischen Tunneln durch die oben erwähnte Barriere zwischen den Potentialminima. Der Tunneldurchgang eines Teilchens durch einen eindimensionalen Potentialwall kann, wie man aus der Quantenmechanik weiß, als Bewegung mit imaginärer Energie, oder dazu gleichbedeutend, als Bewegung in einer imaginären Zeit, d.h. im euklidischen Raum, aufgefaßt werden. Dieser Zugang wurde bei Coleman [20, 21] auf ein Wellenfunktional verallgemeinert.

Zur Bestimmung der Tunnelwahrscheinlichkeit muß man die klassische Bewegungsgleichung des Feldes im euklidischen Raum mit der Randbedingung eines im Unendlichen gegen das metastabile Minimum konvergierenden Feldes lösen. Die Instantonlösung, auch *Bounce-Lösung* genannt, entspricht einer kritischen Blase. Normiert man das Potential außerdem so, daß es im metastabilen Minimum verschwindet, so ist die Nukleationsrate pro Zeit und Volumeneinheit Γ durch die schon von Arrhenius [27] gefundene Form

$$\Gamma = \mathcal{A} e^{-\mathcal{S}/\hbar} \quad (1.1)$$

gegeben, wobei \mathcal{S} die euklidische Wirkung am Sattelpunkt, d.h. die Wirkung der Bounce-Lösung ist. Der Vorfaktor \mathcal{A} ist proportional zu einer Fluktuationsdeterminante, welche das Ergebnis einer Gaußschen Funktionalintegration über Fluktuationen um die Bounce-Lösung ist, und deren Berechnung ein Hauptziel dieser Arbeit ist.

Um das obige Ergebnis auf den Fall endlicher Temperaturen $T \neq 0$ zu verallgemeinern, überlegt man sich, daß die Quantenstatistik von Bosonen bei endlicher Temperatur formal äquivalent ist zu einer Quantenfeldtheorie in einem euklidischen Raum mit einer periodischen „Zeit“ mit der Periode $1/T$ ([28, 29]). Der Unterschied zum $T = 0$ Fall bei der Untersuchung von Zerfallsprozessen besteht also darin, daß man nun eine dreidimensionale Lösung der Bewegungsgleichung suchen muß, welche periodisch in der Zeit ist.

Selbst wenn man sich, wie später begründet wird, auf kugelsymmetrische Lösungen beschränkt, ist die Bewegungsgleichung nur in den seltensten Fällen analytisch lösbar, so daß man oft die euklidische Wirkung \mathcal{S} und die im Vorfaktor vorkommende Determinante nur numerisch bestimmen kann.

Für viele praktische Problemstellungen reicht aber eine grobe Abschätzung des Vorfaktors \mathcal{A} aus. Dazu berücksichtigt man, daß der Vorfaktor in vier Dimensionen die Massendimension vier hat und durch drei verschiedene Größen der Massendimension eins bestimmt ist: das Feld Φ_+ im Minimum des Potentials, die Wurzel aus der zweiten Ableitung des Potentials $\sqrt{U''}$ und die reziproke charakteristische Blasengröße R^{-1} . Alle diese Größen unterscheiden sich in den interessanten Theorien um nicht mehr als eine Größenordnung,

so daß man als grobe Abschätzung sagen kann, daß die Determinante von der Ordnung $\mathcal{O}(R^{-4}, \Phi_+^4, U'^2)$ ist. Für endliche Temperaturen findet man für den Vorfaktor auch die Abschätzung T^4 bzw. T_c^4 , wobei T_c die kritische Temperatur des Phasenübergangs ist.

Der Vorfaktor für $T = 0$ ist bei Csernai und Kapusta [30] mittels Hydrodynamik betrachtet worden. Einige Arbeiten, in denen die Determinante im ϕ^4 -Modell berechnet worden ist, sind [31, 32, 33] und [34]. Die Methode aus [34] ist in [35] auf den elektroschwachen Phasenübergang übertragen worden. Dieser Phasenübergang wird außerdem in [33] und [36] behandelt. Die analytischen Berechnungen von Bochkarev und Shaposhnikov [37] in der γ_5 -Version des $1 + 1$ dimensionalen abelschen Higgsmodell wurden von Grigoriev et al. [38] durch Simulationen überprüft. Günther et al. [39] haben die Fluktuationen der Oberfläche der kritischen Blase durch Goldstone-Moden beschrieben. Bei D'yakonov et al. [40] ist die Determinante auch für Gluonen-, Geister- und Fermionfelder berechnet worden.

Eine Näherung, in der die Bewegungsgleichung exakt gelöst werden kann, ist die *Thin wall approximation*. Dies ist der Grenzfall, in dem der Potentialunterschied η der beiden Minima sehr viel kleiner als die Höhe der Potentialbarriere ist. Die entstehenden Bläschen sind in dieser Näherung vom Durchmesser her wesentlich größer als die Dicke der Wand. Dadurch erklärt sich der Name. Man kann dann den „Reibungsterm“ im Radialteil der Bewegungsgleichung vernachlässigen, bzw. nach η entwickeln.

In dieser Arbeit soll nun die Übergangsrates und damit insbesondere die Fluktationsdeterminante in dieser Entwicklung, die in der ersten Ordnung der Thin wall approximation entspricht, für $T = 0$ berechnet und die Systematik in η untersucht werden. Dabei werden die Größen störungstheoretisch bis zur zweiten nichtverschwindenden Ordnung in η berechnet. Die Fluktationsdeterminante wird in Anlehnung an [41] in der Schwingerschen Eigenzeitdarstellung berechnet. Der Logarithmus der Determinante wird dabei als Integral über eine Variable t über den *Heat kernel* geschrieben. Für kleine t läßt sich die Spur des Heat kernels entwickeln (*Seeley-Entwicklung*). Man bekommt eine Potenzreihe in t , deren Koeffizienten wiederum Potenzreihen in η sind. Für große t dominieren die niedrigsten Eigenwerte, welche ebenfalls nur störungstheoretisch in η zu ermitteln sind. Beide Näherungen werden schließlich nach verschiedenen Verfahren an einem geschickten wählenden Cutoffpunkt zusammengesetzt. Man bekommt so für die Determinante einen Ausdruck mit der führenden und einer weiteren, nichtverschwindenden Ordnung in η . Außer der Berechnung des konkreten Wertes der Determinante in Abhängigkeit von η wird in dieser Arbeit auch geprüft, wie gut die einzelnen Verfahren und Näherungen zum Berechnen der Determinante sind. Die führenden Ordnungen der verschiedenen Näherungen werden mit einem exakten, analytischen Wert verglichen.

Aus der Kenntnis der Fluktationsdeterminante und damit der genauen Kenntnis der Übergangsrates erhofft man sich weitere Einsichten in den Ablauf von Phasenübergängen erster Ordnung. So ist von Interesse, mit welcher Produktionsrate sich Bläschen bilden, wie und mit welcher Geschwindigkeit sie propagieren [42], wann sie das gesamte Universum ausfüllen und welches Volumen die einzelnen Gebiete am Schluß einnehmen. Während des Phasenübergangs können sich interessante, topologisch nichttriviale Objek-

te, wie Domänenwände, Monopole und Strings bilden [43]. Aus den heute beobachteten Werten dieser Größen und der zugrunde liegenden Dynamik lassen sich Massenschranken für die Higgsfelder ableiten [44].

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Die allgemeine Nukleationstheorie nach Langer und Coleman wird im zweiten Kapitel vorgestellt. Im dritten Kapitel wird das spezielle Potential der oben erwähnten Thin wall approximation untersucht und die Bounce-Lösung störungstheoretisch ermittelt. Aus der Berechnung der Wirkung läßt sich der kritische Radius der Blase abschätzen. Im vierten Kapitel werden die hoch- und niederfrequenten Anteile bestimmt, durch welche die beiden Bereiche der Fluktuationsdeterminante angenähert werden: die Seeley-Entwicklung wird hergeleitet und ihre Koeffizienten werden berechnet. Den hochfrequenten Anteil der Determinante erhält man daraus durch dimensionelle Regularisierung der zugehörigen Zetafunktion. Dann werden für den niederfrequenten Anteil die diskreten und kontinuierlichen Eigenwerte bestimmt und aufsummiert. Die beiden genäherten Bereiche des Integranden in der Schwingerschen Eigenzeitdarstellung werden schließlich im fünften Kapitel nach verschiedenen Verfahren zusammengesetzt. Daraus wird in Kapitel sechs die Übergangsrates berechnet. Die Zusammenfassung befindet sich in Kapitel sieben. Die Anhänge schließlich enthalten zwei für die Nukleationstheorie erforderliche Beweise, eine Integraltafel und die Koeffizienten der verschiedenen in Kapitel fünf benötigten Seeley-Entwicklungen.

Kapitel 2

Nukleationstheorie

Die Nukleationstheorie beschäftigt sich mit dem Zerfall einer metastabilen Phase durch einen Phasenübergang erster Ordnung. Ein bekanntes Beispiel ist übersättigter Dampf [11], welcher lange in dieser metastabilen Phase gehalten werden kann, bis er schließlich durch Bildung einzelner Tröpfchen kondensiert und in die stabilere flüssige Phase übergeht. Auch der umgekehrte Fall der überhitzten Flüssigkeit entspricht einer metastabilen Phase. Hier erfolgt der Nukleationsprozeß durch Bläschenbildung (*bubbles*). Weitere Beispiele, auf die die hier zu untersuchende Nukleationstheorie angewandt werden kann, sind Supraleitfähigkeit [45], Ferroelektrizität [46], der in der Paläomagnetik [47] oder bei Tonträgern vorkommende Ferromagnetismus [48] oder die in der Einleitung erwähnten Phasenübergänge im frühen Universum [6, 7].

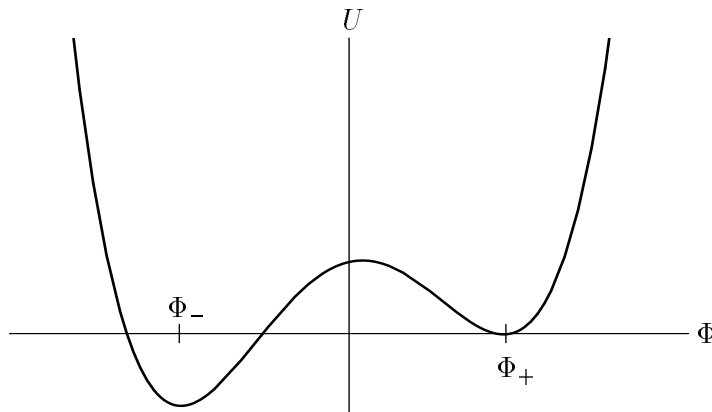


Abbildung 2.1: Typischer Potentialverlauf für ein metastabiles System. Die beiden Minima entsprechen den beiden verschiedenen Phasen des Systems. Φ ist ein Ordnungsparameter.

Ein solches System wird durch eine Potentialfunktion $U(\Phi)$ mit mehreren Minima beschrieben (vgl. Abb. 2.1). Φ ist dabei ein Ordnungsparameter. Im Falle der überhitzten Flüssigkeit entspricht dem Potential die freie Energie, und der Ordnungsparameter ist die Dichte. Am Siedepunkt haben die zwei Phasen — flüssig und gasförmig — dieselbe Energie,

die Minima liegen also gleich tief. Bei etwas höheren oder etwas tieferen Temperaturen wird eine Phase metastabil, das zugehörige Minimum Φ_+ ist nur noch lokal. Diesen Zustand bezeichnet man auch als *false vacuum*. Im obigen Beispiel entspricht dem die überhitzte Flüssigkeit. Der stabile Dampfzustand entspricht dem absoluten oder globalen Minimum Φ_- , auch *true vacuum* genannt.

Ein der Abbildung 2.1 entsprechendes Potential ist z.B. gegeben durch

$$U(\Phi) = U_s(\Phi) + U_\eta(\Phi), \quad (2.1)$$

wobei $U_s(\Phi)$ ein symmetrisches (z.B. quartisches) Potential ist, dessen Minima bei $\pm\alpha$ liegen. Durch den zweiten Term, welcher proportional zum Betrag der Energiedifferenz η ist,

$$U_\eta(\Phi) = \frac{\eta}{2\alpha}(\Phi - \alpha), \quad (2.2)$$

wird das Minimum bei $-\alpha$ nach unten verschoben, es wird zum stabilen Minimum. Für kleine η läßt sich dieses Potential in der Thin wall approximation behandeln (vgl. Abschnitt 3.1).

Das Potential als Funktion von η ist in Abbildung 2.2 dargestellt.

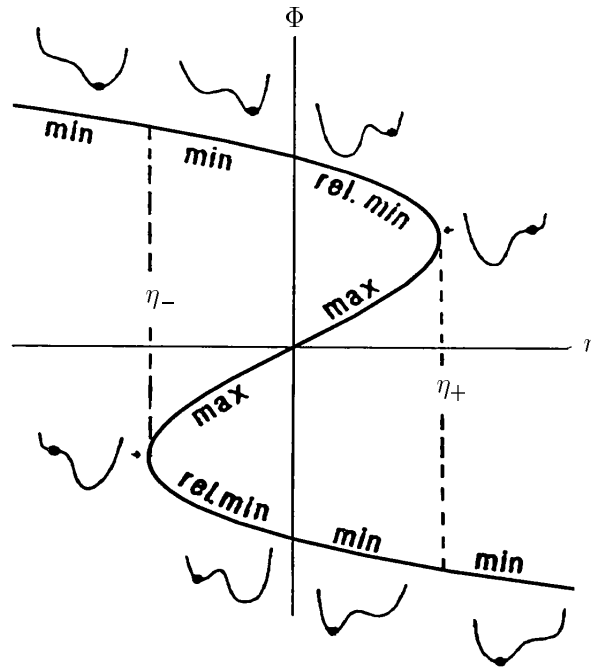


Abbildung 2.2: Potentialverlauf als Funktion der Energiedifferenz η . Auf der Ordinate ist der auch mit einem Punkt im Potential gekennzeichnete Wert des Feldes Φ , den das System annimmt, aufgetragen (nach [49]).

Für große positive bzw. große negative Werte zeigt das Potential nur ein Minimum. Bei einem Grenzwert η_+ bildet sich neben dem Minimum noch ein Sattelpunkt, der für kleinere

η zu einem weiteren (lokalen) Minimum wird. Für $\eta = 0$ ist das Potential symmetrisch, die Minima sind gleich tief. Danach tauschen die beiden Minima ihre Rollen, das vorher globale Minimum wird jetzt zum lokalen Minimum, um bei η_- ganz zu verschwinden. Auf der Ordinate in Abbildung 2.2 ist der Wert des Feldes aufgetragen, den das System annimmt. Dieser ist außerdem durch einen Punkt im Potential $U(\Phi)$ gekennzeichnet. Für $\eta_- < \eta < \eta_+$ gibt es mehrere mögliche, darunter auch metastabile Zustände.

Wie verhält sich nun ein System, wenn man den Parameter η verändert? Ein bei positiven η -Werten präpariertes System befindet sich für negative η -Werte in einem metastabilen Zustand, welcher von dem globalen Minimum durch eine Potentialbarriere getrennt ist. Durch thermische oder Quantenfluktuationen bilden sich Blasen des stabilen Zustands, welche sich, wenn sie eine kritische Größe überschritten haben, weiter ausdehnen, bis das ganze System in diesem Zustand ist. Diese kritischen Blasen werden durch Lösungen der Bewegungsgleichung in einem vereinfachten Modell beschrieben, welches man bekommt, wenn man in der eindimensionalen Feldtheorie das Feld $\Phi(x)$ am Ort x als Teilchenort $q(t)$ zu einer Zeit t interpretiert. Das Problem entspricht in diesem Modell dann der eindimensionalen Bewegung eines Teilchens mit Einheitsmasse im umgekehrten Potential $-U$, beschrieben durch die Lagrange-Funktion

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + U(q). \quad (2.3)$$

$U(q)$ ist das vorne erwähnte Potential mit einem lokalen Minimum bei q_+ und einem für große $|q|$ beliebigem, nach unten beschränktem, ein Stück im Negativen liegenden Verlauf (Abb. 2.3). Dabei kann der Energienullpunkt so gewählt werden, daß $U(q_+) = 0$ gilt.

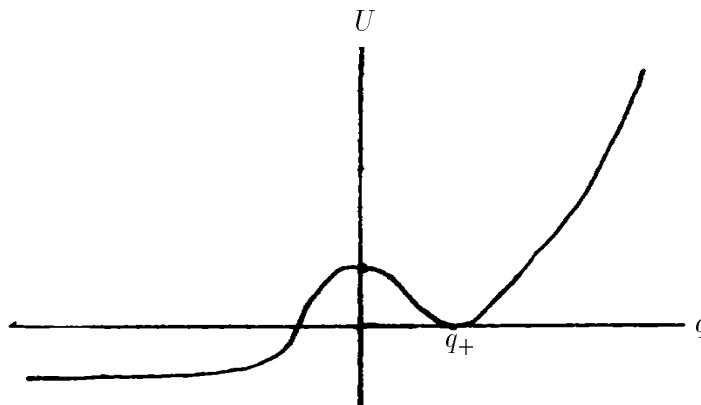


Abbildung 2.3: Möglicher Potentialverlauf im Teilchenbild: q_+ ist ein metastabiler Zustand.

Der Nukleationsprozeß entspricht dann dem quantenmechanischen Tunnelprozeß: Klassisch ist q_+ ein stabiler Zustand. Semiklassisch kann das Teilchen aber durch die Barriere tunneln.

Im folgenden soll jetzt die Übergangswahrscheinlichkeit für einen solchen Tunnelprozeß berechnet werden. Die in diesem Kapitel wiedergegebene Rechnung folgt im wesentlichen den Arbeiten von Coleman [20, 21, 22].

Dabei wird die Systematik der Rechnung zuerst an dem zur eindimensionalen Feldtheorie äquivalenten, vereinfachten Modellsystem aus der Quantenmechanik verdeutlicht, um in Abschnitt 2.8 auf mehrere Dimensionen verallgemeinert zu werden.

2.1 Übergangswahrscheinlichkeit — imaginäre Energie

Ein metastabiler Zustand, d.h. ein Zustand mit endlicher Lebensdauer, muß einen negativen, imaginären Energieanteil haben. Dann gilt für die Zerfallsrate des Zustands

$$\Gamma = -2 \operatorname{Im} E/\hbar. \quad (2.4)$$

Dies wird plausibel, wenn man das zeitliche Verhalten einer Wellenfunktion mit einer Energie $E = E^{\operatorname{re}} + i E^{\operatorname{im}}$ betrachtet:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \hat{\Psi}(\vec{x}) e^{-iEt/\hbar} = \hat{\Psi}(\vec{x}) e^{-iE^{\operatorname{re}}t/\hbar} e^{E^{\operatorname{im}}t/\hbar} = \hat{\Psi}(\vec{x}) e^{-iE^{\operatorname{re}}t/\hbar} e^{-\Gamma t/2}. \quad (2.5)$$

Der letzte Faktor führt zu einem exponentiellen Zerfall der Norm des Zustands:

$$\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = e^{-\Gamma t}. \quad (2.6)$$

Eine imaginäre Energie liegt allerdings nicht im Spektrum des Hamiltonoperators \mathcal{H} . Um sie sauber zu berechnen, muß man eine analytische Fortsetzung durchführen (vgl. Abschnitt 2.6).

Die zu berechnende Energie mit einem imaginären Anteil ist die Grundzustandsenergie. Man bekommt sie aus dem asymptotischen Verhalten der Übergangsamplitude $\langle q_f | e^{-\mathcal{H}\tau/\hbar} | q_i \rangle$, wobei $|q_i\rangle$ und $|q_f\rangle$ Anfangs- und Endzustand darstellen und τ die Übergangszeit ist. Diese Übergangsamplitude kann man nach Energieeigenfunktionen $|n\rangle$ entwickeln. Für großes τ wird dieser Ausdruck durch die Grundzustandsenergie dominiert:

$$\langle q_f | e^{-\mathcal{H}\tau/\hbar} | q_i \rangle = \sum_n e^{-E_n\tau/\hbar} \langle q_f | n \rangle \langle n | q_i \rangle \xrightarrow{\text{für großes } \tau} \langle q_f | 0 \rangle \langle 0 | q_i \rangle e^{-E_0\tau/\hbar}. \quad (2.7)$$

Andererseits kann man die Übergangsamplitude auch durch das Pfadintegral ausdrücken:

$$\langle q_f | e^{-\mathcal{H}\tau/\hbar} | q_i \rangle = \mathcal{N} \int [dq] e^{-\mathcal{S}(q)/\hbar}. \quad (2.8)$$

Dabei sind \mathcal{N} ein Normierungsfaktor und $\mathcal{S}(q)$ die euklidische Wirkung:

$$\mathcal{S}(q) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + U(q) \right]. \quad (2.9)$$

Integriert wird dabei über alle Funktionen, die die Randbedingungen $q(-\tau/2) = q_i$ und $q(\tau/2) = q_f$ erfüllen. Sei \bar{q} nun eine beliebige Funktion, die die Randbedingungen erfüllt. Sei weiter q_n ein vollständiges System orthonormaler Funktionen

$$\int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt q_n(t) q_m(t) = (q_n, q_m) = \delta_{nm}, \quad (2.10)$$

die am Rand verschwinden: $q_n(\pm\tau/2) = 0$. Dann läßt sich jede Funktion, über die integriert werden soll, darstellen als

$$q = \bar{q} + \sum_n c_n q_n \quad (2.11)$$

mit Koeffizienten c_n . Damit läßt sich das Integrationsmaß wie folgt definieren:

$$[dq] = \prod_n (2\pi\hbar)^{-1/2} dc_n. \quad (2.12)$$

Der Faktor $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ ist willkürlich und begründet sich im Gaußintegral. Dieses Integrationsmaß unterscheidet sich vom Feynmanschen Integrationsmaß gerade um die Normierungskonstante \mathcal{N} , welche aber nirgends berechnet werden muß, da sie sich herauskürzen wird.

Im folgenden muß also das Pfadintegral

$$\mathcal{N} \int \prod_n (2\pi\hbar)^{-1/2} dc_n e^{-\mathcal{S}(q)/\hbar} \quad (2.13)$$

berechnet werden. Aus dessen asymptotischem Verhalten läßt sich die Grundzustandsenergie ablesen, deren Imaginärteil dann proportional zur gesuchten Übergangsamplitude ist.

2.2 Sattelpunktentwicklung

Das Pfadintegral Gl. (2.13) wird durch eine Sattelpunktentwicklung der Wirkung berechnet. Dazu wird zuerst angenommen, daß es nur einen stationären Punkt gibt. Da dieser sicherlich die Randbedingungen erfüllt, kann man ihn mit dem obigen \bar{q} identifizieren. Die Stationaritätsbedingung lautet dann:

$$\left. \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta q(t)} \right|_{q=\bar{q}} = -\frac{d^2 \bar{q}}{dt^2} + U'(\bar{q}(t)) = 0. \quad (2.14)$$

Diese Euler–Lagrange–Gleichung (Gl. (2.14)) entspricht der Bewegungsgleichung eines Teilchens mit Einheitsmasse im Potential $-U$ und kann auf bekannte Weise gelöst werden. Insbesondere ist die Energie eine Erhaltungsgröße:

$$E = \frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 - U. \quad (2.15)$$

Aufgrund der Wahl des Potentialnullpunkts ($U(\Phi_+) = 0$) liegt der Energienullpunkt bei \bar{q} :

$$E(\bar{q}) = 0. \quad (2.16)$$

Nun betrachtet man die zweite Funktionalableitung der Wirkung am stationären Punkt

$$\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q(t_1) \delta q(t_2)} \right|_{q=\bar{q}} = \left. \frac{\delta}{\delta q(t_1)} \left(-\frac{d^2 q}{dt^2} + U'(q(t_2)) \right) \right|_{q=\bar{q}} = \left. \left\{ -\frac{d^2}{dt^2} + U''(q) \right\} \delta(t_1 - t_2) \right|_{q=\bar{q}} \quad (2.17)$$

und wendet den zu diesem Kern gehörenden Operator $\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{q=\bar{q}}$ auf eine Funktion q_n an. Die q_n müssen nur ein vollständiges Orthonormalsystem bilden und die Randbedingungen erfüllen, können aber ansonsten beliebig sein. Insbesondere kann man die q_n also auch als Eigenfunktionen zum Operator $\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{q=\bar{q}}$ mit Eigenwerten λ_n wählen:

$$\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{q=\bar{q}} \cdot q_n := \left(-\frac{d^2}{dt^2} + U''(\bar{q}) \right) q_n = \lambda_n \cdot q_n. \quad (2.18)$$

Damit kann man die Wirkung um den stationären Punkt (Sattelpunkt) entwickeln:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \mathcal{S}(\bar{q}) + \frac{1}{2} \left((q - \bar{q}), \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{\bar{q}} (q - \bar{q}) \right) + \mathcal{O}((q - \bar{q})^3) \\ &= \mathcal{B} + \frac{1}{2} \left(\sum_n c_n q_n, \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{\bar{q}} \sum_n c_n q_n \right) + \mathcal{O}((q - \bar{q})^3) \\ &= \mathcal{B} + \frac{1}{2} \sum_n \lambda_n c_n^2 + \mathcal{O}((q - \bar{q})^3). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Die Wirkung am Sattelpunkt wird dabei mit $\mathcal{B} = \mathcal{S}(\bar{q})$ bezeichnet. (a, b) bezeichnet wie in Gleichung (2.10) das Skalarprodukt

$$(a, b) = \int dt a^*(t) b(t). \quad (2.20)$$

Außerdem wurde die Orthonormalitätsrelation Gl. (2.10) ausgenutzt. Die ersten beiden Ordnungen dieser Entwicklung (Gl. (2.19)) in das Pfadintegral Gl. (2.8) eingesetzt ergeben folgende Näherung für die Übergangsamplitude:

$$\begin{aligned} \langle q_f | e^{-\mathcal{H}\tau/\hbar} | q_i \rangle &= \mathcal{N} \int [dq] e^{-\mathcal{S}/\hbar} \\ &= \mathcal{N} e^{-\mathcal{B}/\hbar} \prod_n \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dc_n e^{-\frac{\lambda_n}{2\hbar} c_n^2} \\ &= \mathcal{N} e^{-\mathcal{B}/\hbar} \prod_n \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} \\ &= \mathcal{N} e^{-\mathcal{B}/\hbar} \left(\det \left\{ \left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{\bar{q}} \right\} \right)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

In der ganzen Rechnung wurde stillschweigend angenommen, daß alle Eigenwerte λ_n positiv sind, da sonst das Gaußsche Integral in der zweiten Zeile von Gleichung (2.21) divergent ist. Da jedoch die Übergangswahrscheinlichkeit proportional zum Imaginärteil der Energie ist, während die Normierung und die Wirkung am stationären Punkt reell sind, muß das Produkt der Wurzeln der Eigenwerte $\prod_n \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}}$ imaginär sein. Das heißt, daß es mindestens einen negativen Eigenwert λ_n gibt und das entsprechende Gaußsche Integral divergiert. Die obige Rechnung bedarf also noch Verbesserungen.

Die zweite Ableitung der Wirkung $\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{\bar{q}}$ beschreibt die Krümmung der Wirkung am Sattelpunkt. Ein negativer Eigenwert bedeutet eine positive Krümmung, also eine Instabilität der Wirkung — der Zustand wird zerfallen.

2.3 Die stationäre Lösung — Bounce-Lösung

In diesem Abschnitt soll die stationäre Lösung berechnet werden. Sie ist Lösung der Euler-Lagrange-Gleichung (Gl. (2.14))

$$-\frac{d^2\bar{q}}{dt^2} + U'(\bar{q}) = 0, \quad (2.22)$$

welche der Bewegung eines Teilchens im umgekehrten Potential $-U$ entspricht.

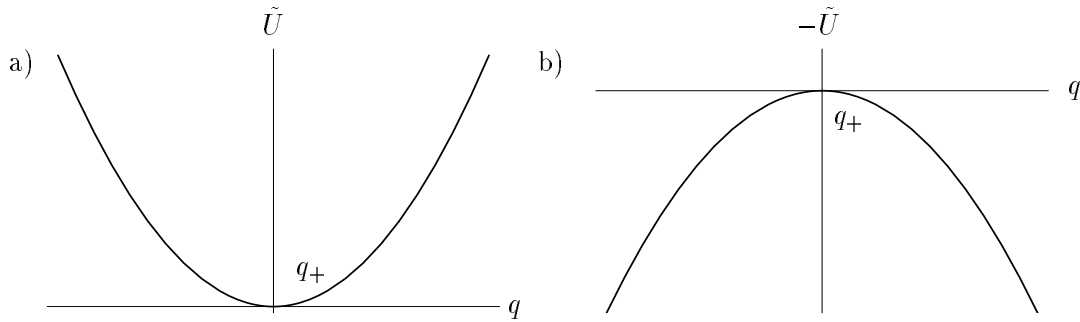


Abbildung 2.4: a) Potential mit nur einem Minimum; b) dasselbe Potential, an der q -Achse gespiegelt.

Zuerst betrachtet man ein Potential $\tilde{U}(q)$ mit nur einem Minimum (s. Abb. 2.4a). Anfangs- und Endbedingungen müssen jetzt so festgelegt werden, daß das Teilchen stationär ist, d.h. für große Zeiten zur Ruhe kommt und nicht weiter oszilliert, es muß sich also zur Anfangs- und Endzeit in einem Extremum des (gespiegelten) Potentials (Abb. 2.4b) befinden:

$$q_i = q_f = q_+ = 0. \quad (2.23)$$

Für das Problem gibt es nur eine gebundene stationäre Lösung, nämlich

$$q(t) = q_+ = 0 \quad \forall t. \quad (2.24)$$

Die Wirkung dieser Lösung berechnet sich zu

$$\mathcal{S}(q_+) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq_+}{dt} \right)^2 + \tilde{U}(q_+) \right] = 0, \quad (2.25)$$

da das Potential so gewählt ist, daß $\tilde{U}(q_+) = 0$ gilt.

Für dieses Potential läßt sich die in Gleichung (2.21) vorkommende Determinante bis auf Normierung berechnen. Man findet:

$$\mathcal{N}[\det(-\partial_t^2 + w^2)]^{-1/2} = \left(\frac{w}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-w\tau/2}. \quad (2.26)$$

Dabei wurde $\tilde{U}''(\bar{q}) = w^2$ gesetzt. Der hier im folgenden wiedergegebene Beweis steht in [22]: Man betrachtet dafür die Gleichungen

$$\begin{aligned} \left(-\partial_t^2 + W^{(1)}\right) \Phi_\lambda^{(1)}(t) &= \lambda^{(1)} \Phi_\lambda^{(1)}(t) \quad \text{und} \\ \left(-\partial_t^2 + W^{(2)}\right) \Phi_\lambda^{(2)}(t) &= \lambda^{(2)} \Phi_\lambda^{(2)}(t) \end{aligned} \quad (2.27)$$

mit solchen Funktionen $W^{(1)}$ und $W^{(2)}$, daß die zu den Eigenfunktionen $\Phi_\lambda^{(i)}$ gehörenden Eigenwerte $\lambda^{(i)}$ diskret sind. Die entsprechenden Determinanten werden wie vorher wieder als Produkt der Eigenwerte definiert:

$$\det(-\partial_t^2 + W^{(i)}) = \prod_n \lambda_n^{(i)}. \quad (2.28)$$

Dann gilt

$$\frac{\det(-\partial_t^2 + W^{(1)} - \lambda)}{\det(-\partial_t^2 + W^{(2)} - \lambda)} = \frac{\Phi_\lambda^{(1)}(\tau/2)}{\Phi_\lambda^{(2)}(\tau/2)}, \quad (2.29)$$

denn beide Seiten sind meromorphe Funktionen von λ mit einfachen Nullstellen bei jedem $\lambda^{(1)}$ und einfachen Polen bei $\lambda^{(2)}$. Für $|\lambda| \rightarrow \infty$ in jeder Richtung außer auf der reellen Achse gehen beide Seiten gegen Eins. Das Verhältnis beider Funktionen ist somit eine analytische Funktion von λ , die im Grenzwert gegen Eins geht — und damit gleich Eins ist.

Es läßt sich also eine von λ unabhängige Normierungskonstante definieren:

$$2\pi\hbar\mathcal{N}^2 = \frac{\det(-\partial_t^2 + W)}{\Phi_0(\tau/2)}. \quad (2.30)$$

Betrachtet man jetzt speziell den harmonischen Oszillator, so gilt $W = w^2$, und der Grundzustand $\Phi_0(t)$ lautet:

$$\Phi_0(t) = w^{-1} \sinh(w(t + \tau/2)). \quad (2.31)$$

Im Grenzwert großer τ wird er zu

$$\Phi_0(\tau/2) = \frac{1}{2w} e^{w\tau}, \quad (2.32)$$

und durch Einsetzen in Gleichung (2.30) erhält man

$$\mathcal{N} [\det(-\partial_t^2 + w^2)]^{-1/2} = [2\pi\hbar\Phi_0(\tau/2)]^{-1/2} = \left[\frac{\pi\hbar}{w} e^{w\tau}\right]^{-1/2} = \sqrt{\frac{w}{\pi\hbar}} e^{-w\tau/2}. \quad (2.33)$$

Damit ist Gleichung (2.26) bewiesen.

Betrachtet man nun wieder das hier eigentlich interessierende Potential aus Abbildung 2.3 mit mehr als einem Minimum bzw. seine Umkehrung (siehe Abb. 2.5), so findet man zu den Anfangsbedingungen $q_i = q_f = q_+$ außer der trivialen Lösung $q(t) = q_+ \quad \forall t$ noch eine weitere stationäre Lösung, die sogenannte *Bounce*-Lösung \bar{q} (Abb. 2.6). Aus der Wahl

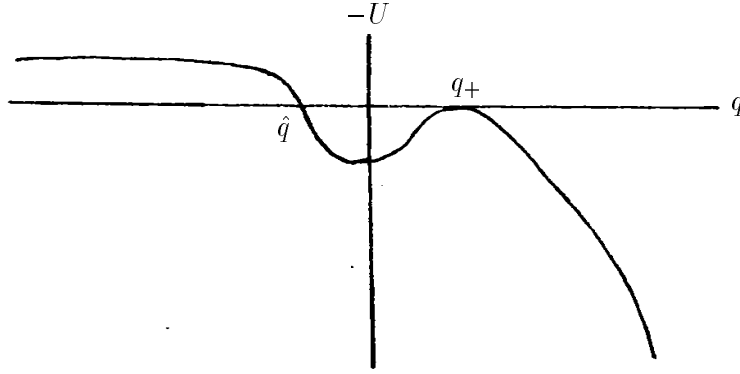


Abbildung 2.5: Potential im Teilchenbild, an der q -Achse gespiegelt (vgl. Abb. 2.3).

des Energienullpunkts (Gl. (2.16)) folgt, daß der Punkt \hat{q} mit verschwindendem Potential $U(\hat{q}) = 0$ ein Umkehrpunkt ist:

$$\left. \frac{dq}{dt} \right|_{\hat{q}} = 0. \quad (2.34)$$

Ohne Einschränkung wählt man den Zeitnullpunkt $t = 0$ an dieser Stelle: $\hat{q} = q(0)$. Die Bewegung vor und nach dem Umkehrpunkt verläuft genau entgegengesetzt. Das Teilchen startet also bei $q = q_+$ auf dem Hügel und verweilt dort lange, wandert dann schnell durch das Tal, um bei \hat{q} abzuprallen und zu $q = q_+$ zurückzukehren, wo es wieder lange verweilt (vgl. Abb. 2.6).

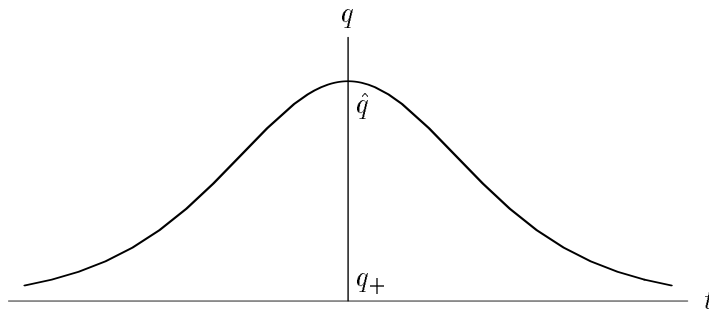


Abbildung 2.6: Eine Bounce-Lösung.

Für das schon erwähnte spezielle Potential $U = U_s + \frac{\eta}{2\alpha}(q - \alpha)$ (Gl. (2.1), Gl. (2.2)) mit einem quartischen Ansatz für U_s ,

$$U_s = \frac{\kappa}{8}(q^2 - \alpha^2)^2, \quad (2.35)$$

läßt sich in der Thin wall approximation, in welcher der η -abhängige Term vernachlässigt wird, die Lösung explizit berechnen. Man bekommt einen Kink, auch Instanton oder Soliton genannt (Abb. 2.7).

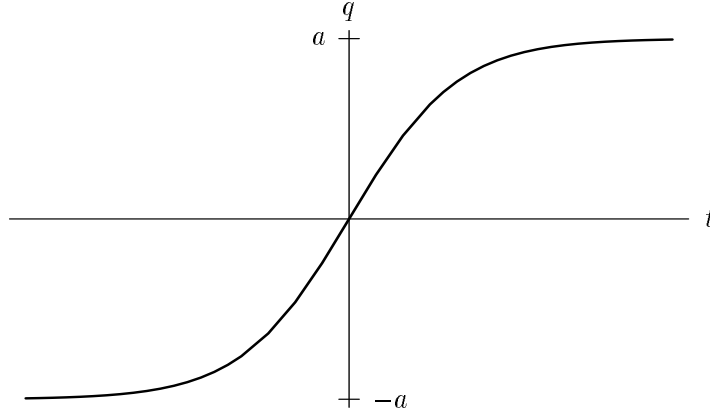


Abbildung 2.7: Eine Kink-Lösung.

Diese Lösung berechnet sich z.B. aus der Energieerhaltung (Gl. (2.15)):

$$\begin{aligned}
 \frac{d\bar{q}}{dt} &= \sqrt{2U(\bar{q})} = \pm \frac{\sqrt{\kappa}}{2} (\bar{q}^2 - \alpha^2) \\
 \Rightarrow \frac{\sqrt{\kappa}}{2} (t - t_0) &= \pm \int \frac{d\bar{q}}{\bar{q}^2 - \alpha^2} = \mp \frac{1}{\alpha} \operatorname{arctanh} \frac{\bar{q}}{\alpha} \\
 \Rightarrow \bar{q} &= \mp \alpha \tanh \left(\frac{\alpha \sqrt{\kappa}}{2} (t - t_0) \right). \tag{2.36}
 \end{aligned}$$

Das Vorzeichen muß an die Randbedingungen angepaßt werden.

Die Bounce-Lösung für $\eta \neq 0$ läßt sich in nullter Ordnung durch den für $\eta = 0$ gewonnenen Kink und den entsprechenden Antikink approximieren. Beide Lösungen hintereinander ergeben eine ähnliche Form wie in Abbildung 2.6.

Die Wirkung der Bounce-Lösung läßt sich aus der allgemeinen Form (Gl. (2.9)) berechnen. Aus der Energieerhaltung folgt wie oben $d\bar{q}/dt = \sqrt{2U(\bar{q})}$ bzw. $U(\bar{q}) = \frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2$. Einsetzen ergibt:

$$\mathcal{B} = \mathcal{S}(\bar{q}) = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2 \right] = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2. \tag{2.37}$$

Bei einem Wechsel der Integrationsvariablen von t auf q muß man berücksichtigen, daß die Bewegung symmetrisch verläuft und man zweimal über den halben Weg integriert:

$$\mathcal{B} = 2 \int_{-\alpha}^{\alpha} d\bar{q} \frac{dt}{d\bar{q}} \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2 = 2 \int_{-\alpha}^{\alpha} d\bar{q} \frac{d\bar{q}}{dt} = 2 \int_{-\alpha}^{\alpha} d\bar{q} \sqrt{2U(\bar{q})}. \tag{2.38}$$

Das Berechnen der zugehörigen Determinante ist für dieses Potential deutlich schwieriger und soll in den nächsten Abschnitten geschehen.

2.4 Beiträge unendlich vieler Bounce-Lösungen

Wenn es nicht, wie bislang angenommen, nur eine stationäre Lösung gibt, sondern mehrere, so dominieren diejenigen Lösungen mit der kleinsten euklidischen Wirkung, denn man wird später (siehe S. 31) für die Übergangswahrscheinlichkeit folgenden exponentiellen Zusammenhang finden (vgl. auch Gl. (1.1)):

$$\Gamma = \mathcal{A} e^{-\mathcal{B}/\hbar} . \quad (2.39)$$

Die größte Übergangswahrscheinlichkeit ist also durch die kleinste Wirkung gegeben.

Bei mehreren stationären Lösungen mit derselben Wirkung müssen aber alle diese Lösungen aufsummiert werden. Diese Aufsummation entspricht einer Integration über die entsprechende Symmetriegruppe bzgl. derer die Wirkung invariant ist. Sie beeinflusst nur den Vorfaktor \mathcal{A} in Gleichung (2.39).

Die hier gegebene Euler-Lagrange-Gleichung (Gl. (2.14))

$$-\frac{d^2 q}{dt^2} + U'(q) = 0 \quad (2.40)$$

und die Energie-Erhaltung (Gl. (2.15))

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2 - U(\bar{q}) = 0 \quad (2.41)$$

sind beide invariant gegenüber Zeittranslation: Man kann den Umkehrpunkt (Zentrum der Bounce-Lösung) nämlich beliebig auf der Zeitachse wählen. Dies führt auf verschiedene Bounce-Lösungen, die alle dieselbe Wirkung haben, da der Ausdruck für die Wirkung (Gl. (2.9))

$$\mathcal{S} = \int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + U(q) \right] \quad (2.42)$$

ebenfalls invariant unter Zeittranslation ist. Es muß also über alle Bounce-Lösungen mit verschiedenen Zentren summiert werden. Die zugehörige Symmetriegruppe ist die Gruppe der Zeittranslation. Die entsprechende Integration liefert einen Faktor τ bzw. in mehreren Dimensionen (vgl. Abschnitt 2.8) einen Volumenfaktor. Der physikalische Grund für das Auftreten dieses Faktors ist, daß die Wahrscheinlichkeit, mit der sich eine Blase bildet, proportional zum Volumen ist.

Um den Einfluß von mehreren Bounce-Lösungen zu ermitteln, betrachtet man jetzt also n Bounce-Lösungen mit Zentren bei t_n , die wie folgt angeordnet seien:

$$\frac{\tau}{2} > t_1 > t_2 > \cdots > t_n > -\frac{\tau}{2} . \quad (2.43)$$

Die einzelnen Bounce-Lösungen, deren Zahl nachher gegen Unendlich gehen wird, seien dabei weit voneinander getrennt. Dies entspricht der „*Dilute gas approximation*“ in der statistischen Mechanik.

Während die auf dem Intervall von $-\infty$ bis $+\infty$ definierte Bounce-Lösung exakt ist, ist die Überlagerung von Bounce-Lösungen nur noch approximativ eine stationäre Lösung, da sie für $|t| \rightarrow \infty$ nicht mehr gegen Null strebt.

Für diese Überlagerung von n Bounce-Lösungen bekommt man in der Dilute gas approximation folgende Beiträge:

- Wenn die Zentren der Bounce-Lösungen sehr viel mehr als die Hälfte der Breite der Bounce-Lösung auseinanderliegen, so beeinflussen sich die einzelnen Wirkungen nicht, die Gesamtwirkung \mathcal{S} kann also durch die Summe der Wirkungen der einzelnen Bounce-Lösungen \mathcal{B} approximiert werden:

$$\mathcal{S} = \sum_n \mathcal{B} = n\mathcal{B}. \quad (2.44)$$

- Die einzelnen Bounce-Lösungen sind so weit getrennt, daß man für die großen Zeiten zwischen den Bounce-Zentren den zur trivialen Lösung ($q \equiv q_+$) (Gl. (2.24)) gehörenden Ausdruck für die Determinante verwendet (Gl. (2.26)):

$$\mathcal{N}[\det(-\partial_t^2 + w^2)]^{-1/2} = \left(\frac{w}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-w\tau/2}. \quad (2.45)$$

Die vorhandenen n Bounce-Lösungen berücksichtigt man durch einen Korrekturfaktor K^n . K wird dabei so bestimmt, daß der sich ergebende Ausdruck für die Lösung mit einem Bounce richtig wird. Damit erhält man also für die Determinante der Überlagerung von n Bounces den Ausdruck:

$$\mathcal{N}[\det(-\partial_t^2 + U^n(\bar{q}))]^{-1/2} = \left(\frac{w}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-w\tau/2} K^n. \quad (2.46)$$

- Es verbleibt noch die Integration über alle Orte auszuführen: Die erste Bounce-Lösung kann überall zwischen $-\tau/2$ und $+\tau/2$ liegen, die zweite aufgrund der Bedingung (2.43) nur zwischen $-\tau/2$ und dem ersten Bounce und so weiter, so daß man insgesamt das nachstehende Integral zu berechnen hat:

$$\int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt_1 \int_{-\tau/2}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\tau/2}^{t_{n-1}} dt_n = \frac{\tau^n}{n!}. \quad (2.47)$$

Das Ergebnis der Integration kann man sich wie folgt plausibel machen: n Bounce-Lösungen sollen im Intervall von $-\tau/2$ bis $\tau/2$ verteilt werden, dafür gibt es τ^n Möglichkeiten. Da aber durch die Bedingung (2.43) eine bestimmte Reihenfolge der Bounce-Lösungen festgelegt ist, muß noch durch die Zahl der Permutationen $n!$ geteilt werden.

Der mathematische Beweis wird durch vollständige Induktion erbracht. Dazu verschiebt man die Integrationsgrenzen:

$$\int_{-\tau/2}^{\tau/2} dt_1 \int_{-\tau/2}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\tau/2}^{t_{n-1}} dt_n = \int_0^{\tau} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n. \quad (2.48)$$

$n = 1$ liefert den Induktionsanfang:

$$\int_0^\tau dt_1 = \tau = \frac{\tau^1}{1!}. \quad (2.49)$$

Der Induktionsschritt $n \rightarrow n + 1$ sieht dann wie folgt aus:

$$\begin{aligned} \int_0^\tau dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \int_0^{t_n} dt_{n+1} = \\ \int_0^\tau dt_1 \frac{t_1^n}{n!} = \frac{1}{n!} \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)} = \frac{\tau^{n+1}}{(n+1)!}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Summiert man nun alle Überlagerungen mit unterschiedlichen Anzahlen von Bounce-Lösungen auf, so ergibt sich die Übergangsamplitude nach Gleichung (2.21) zu:

$$\begin{aligned} \langle q_f | e^{-\mathcal{H}\tau/\hbar} | q_i \rangle &= \sum_n e^{-n\mathcal{B}/\hbar} \left(\frac{w}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-w\tau/2} K^n \frac{\tau^n}{n!} \\ &= \left(\frac{w}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-w\tau/2} \sum_n e^{-n\mathcal{B}/\hbar} K^n \frac{\tau^n}{n!} \\ &= \left(\frac{w}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-w\tau/2} \exp(K\tau e^{-\mathcal{B}/\hbar}). \end{aligned} \quad (2.51)$$

Die Grundzustandsenergie berechnet sich nach Gleichung (2.7) aus dem Argument der Exponentialfunktion zu

$$E_0 = \frac{w\hbar}{2} - \hbar K e^{-\mathcal{B}/\hbar}. \quad (2.52)$$

Der im Vergleich zum harmonischen Oszillator (vgl. Gl. (2.33)) zusätzliche Term $-\hbar K e^{-\mathcal{B}/\hbar}$ ist viel kleiner als die in der Sattelpunktentwicklung vernachlässigten Terme der Ordnung \hbar^2 . Der Term hat aber trotzdem seine Daseinsberechtigung, da K aufgrund eines negativen Eigenwertes der zweiten Ableitung, welcher von dem metastabilen Zustand herrührt, imaginär werden wird. Damit wird dieser zusätzliche Term $-\hbar K e^{-\mathcal{B}/\hbar}$ der führende Term in der Übergangswahrscheinlichkeit werden (vgl. Gl. (2.4)).

Zum Schluß dieses Abschnittes soll noch dargelegt werden, daß die Dilute gas approximation selbstkonsistent ist. Dazu wird gezeigt, daß der größte Beitrag zur oben berechneten Übergangsamplitude von Konfigurationen herrührt, in denen die Bounce-Lösungen wirklich weit voneinander getrennt sind.

Für festes x wachsen die Summanden $x^n/n!$ der Exponentialfunktion e^x monoton mit n solange $n \leq x$ gilt, für $n > x$ fallen sie monoton, und zwar rapide. Angewandt auf die obige Reihe (Gl. (2.51)), in der x durch $K\tau e^{-\mathcal{B}/\hbar}$ gegeben ist, bedeutet das, daß die für die Exponentialreihe relevanten Beiträge von solchen n mit

$$x = K\tau e^{-\mathcal{B}/\hbar} > n \quad (2.53)$$

kommen. Für kleine \hbar ist $K e^{-\mathcal{B}/\hbar}$ und damit auch die Bounce-Dichte n/τ exponentiell klein. Eine kleine Dichte wird aber z.B. durch einen großen Abstand zwischen den Bounce-Lösungen realisiert. Die Dilute gas approximation entspricht damit der semiklassischen Näherung für kleines \hbar .

2.5 Eigenwerte der zweiten Ableitung der Wirkung

Wie bereits auf Seite 16 festgestellt, bedarf die Gaußsche Integration in der Sattelpunkt-näherung noch Verbesserungen, da nicht alle λ_n positiv sind. Diese λ_n sind die Eigenwerte der zweiten Ableitung der Wirkung einer einzelnen Bounce-Lösung (Gl. (2.18)):

$$\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{q=\bar{q}} \cdot q_n = \left[-\frac{d^2}{dt^2} + U''(\bar{q}) \right] \cdot q_n = \lambda_n q_n. \quad (2.54)$$

Obige Gleichung (2.54) entspricht formal der zeitunabhängigen Schrödingergleichung für ein Teilchen mit Einheitsmasse, welches sich als Funktion des als Zeit interpretierten formalen Orts t in einem Potential $U''(\bar{q})$ bewegt, und kann also mit den bekannten Methoden gelöst werden. Die Eigenwerte λ_n beschreiben die Krümmung der Wirkung am Sattelpunkt. Sie sollen nun untersucht werden.

2.5.1 Nullmode

Die Eigenwertgleichung Gl. (2.54) ist invariant gegenüber Zeittranslation. Das heißt, daß es Funktionen gibt, nämlich alle Bounce-Lösungen mit verschiedenen Zentren, die sich bzgl. des Operators nur um eine Nullmode unterscheiden. Es gibt also eine Nullmode q_1 , welche mit der Translationsinvarianz der Bounce-Lösung verbunden ist.

Der zugehörige Weg im Funktionenraum besteht aus allen Bounce-Lösungen mit verschiedenen Zentren, die Nullmode ist also proportional zur Änderung der Position der Bounce-Lösung, also zur Ableitung der Bounce-Lösung, $q_1 = N \frac{d\bar{q}}{dt}$. Dies läßt sich auch rein formal durch Ableiten der Euler-Lagrange-Gleichung (Gl. (2.14)) beweisen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[-\frac{d^2 \bar{q}}{dt^2} + U'(\bar{q}) \right] &= \frac{d}{dt} 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{d^3 \bar{q}}{dt^3} + U''(\bar{q}) \frac{d\bar{q}}{dt} &= 0 \\ \Leftrightarrow \left[-\frac{d^2}{dt^2} + U''(\bar{q}) \right] \frac{d\bar{q}}{dt} &= 0 \cdot \frac{d\bar{q}}{dt}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Der noch nicht festgelegte Proportionalitätsfaktor N bestimmt sich aus der Normierungsbedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt q_1^* q_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dt N^2 \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2 = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{d\bar{q}}{dt} \right)^2 = N^2 \mathcal{B} \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.56)$$

zu $N = 1/\sqrt{\mathcal{B}}$, und die Nullmode lautet also:

$$q_1 = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{B}}} \frac{d\bar{q}}{dt}. \quad (2.57)$$

Im letzten Schritt der Gleichung (2.56) wurde die Definition der Wirkung der Bounce-Lösung Gl. (2.37) ausgenutzt. Da die Bounce-Lösung nur um ihr Zentrum herum wesentlich von Null verschieden ist, können die Grenzen der Integration nach Unendlich verschoben werden.

In der Berechnung des Pfadintegrals Gl. (2.21) muß über alle Moden der Schrödingergleichung (2.54) integriert werden. Die Integration über die Nullmode führt aber zum Desaster, denn das Integral

$$\int e^{-0 \cdot c_1^2} dc_1 = \int 1 dc_1 \rightarrow \infty \quad (2.58)$$

divergiert. Wie vorne gesehen, hängt die Nullmode mit der Zeittranslation zusammen, über die bereits integriert worden ist (siehe Seite 22, Gl. (2.47)). Aus der Umrechnung von dt nach dc_1 erhält man allerdings noch einen zusätzlichen Faktor: Für die Änderung von q in q_1 -Richtung gilt (vgl. Gl. (2.11)):

$$dq = q_1 dc_1. \quad (2.59)$$

Andererseits gilt nach der Kettenregel

$$dq = \frac{dq}{dt} dt. \quad (2.60)$$

Gleichsetzen liefert mit dem Ausdruck für die Nullmode Gl. (2.57):

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} dt &= q_1 dc_1 = \mathcal{B}^{-1/2} \frac{dq}{dt} dc_1 \\ \Leftrightarrow dc_1 &= \mathcal{B}^{1/2} dt. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Unter Beachtung der Definition des Maßes (Gl. (2.12)) findet man schließlich

$$(2\pi\hbar)^{-1/2} dc_1 = \left(\frac{\mathcal{B}}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} dt. \quad (2.62)$$

Man behandelt also die Nullmode, indem man die Determinante ohne die Nullmode entwickelt und dafür einen zusätzlichen Faktor $\left(\frac{\mathcal{B}}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}$ einführt. Dies ist die Methode der kollektiven Koordinaten [50].

2.5.2 Negative Mode

Das Teilchen, dessen Bewegung durch die Bounce-Lösung beschrieben wird, kommt für unendliche Zeiten wieder zum Ausgangspunkt zurück, seine Bahn hat also einen Umkehrpunkt (Gl. (2.34)), was einer Nullstelle der Ableitung, also einem Knoten in der Nullmode entspricht. Aus der Theorie der Schrödingergleichung weiß man aber, daß der Grundzustand keinen Knoten haben darf. Die Nullmode mit Knoten kann somit nicht der Grundzustand sein, es gibt also noch einen Zustand q_0 mit kleinerem, also negativem Eigenwert λ_0 . In Richtung dieser negativen Mode ist die Wirkung positiv gekrümmt. Das System ist in dieser Richtung instabil und kann zerfallen. Die Bounce-Lösung ist also kein Minimum der Wirkung, sondern ein Sattelpunkt.

Auch die Integration über diese negative Mode λ_0 macht Probleme, da das Integral mit negativem Koeffizient im Exponent kein Gaußsches Integral mehr ist und ebenfalls divergiert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} (2\pi\hbar)^{-1/2} dc_0 e^{-\frac{\lambda_0}{2\hbar} c_0^2} = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dc_0 e^{+\frac{|\lambda_0|}{2\hbar} c_0^2} \rightarrow \infty. \quad (2.63)$$

Die Ursache des Problems liegt darin, daß man probiert einen Eigenwert λ_0 auszurechnen, der nicht im Spektrum des Hamiltonoperators liegt. λ_0 ist die Energie eines metastabilen Zustands.

Man definiert das Integral nun durch analytische Fortsetzung eines Integrals, welches konvergiert. Dabei wird der Integrationsweg nach der Methode des *steepest descent* (vgl. Abschnitt 2.6) in die komplexe Ebene verschoben. Das Integral bekommt einen Imaginärteil, wie es die durch den negativen Eigenwert hervorgerufene Instabilität fordert. Insbesondere wird K also imaginär.

Diese Methode ist allerdings nur anwendbar, wenn es genau einen negativen Eigenwert gibt. Dies ist für eine allgemeine Wirkung bei Coleman [51] gezeigt. Der Beweis wird in Anhang A wiedergegeben.

2.6 Analytische Fortsetzung des Integrals über negative Moden

Es soll hier ein Verfahren gezeigt werden, um Integrale des Typs Gl. (2.63)

$$\int_{-\infty}^{\infty} (2\pi\hbar)^{-1/2} dc_0 e^{-\frac{\lambda_0}{2\hbar} c_0^2} \quad (2.64)$$

mit negativem λ_0 analytisch fortzusetzen. Der Einfachheit halber wird dieses Integral nicht über den gesamten Funktionenraum ausgeführt, sondern nur entlang einiger, durch die Größe z parametrisierter Wege. Die Wege werden dabei so gewählt, daß sie zwei wichtige Spezialfälle enthalten: $z = 0$ entspricht der trivialen, konstanten Lösung $q = q_+$ (Gl. (2.24)) und $z = 1$ beschreibt die Bounce-Lösung \bar{q} (siehe S. 19). Außerdem wird der Weg für $z = 1$ so gewählt, daß der Tangentenvektor dieser Kurve die Nullmode q_1 ist. Dies entspricht der Tatsache, daß die Nullmode proportional zur Ableitung der Bounce-Lösung ist (Gl. (2.57)). Für größere z -Werte soll der Weg längere Zeit im Bereich mit negativen q -Werten verbringen (siehe Abb. 2.8).

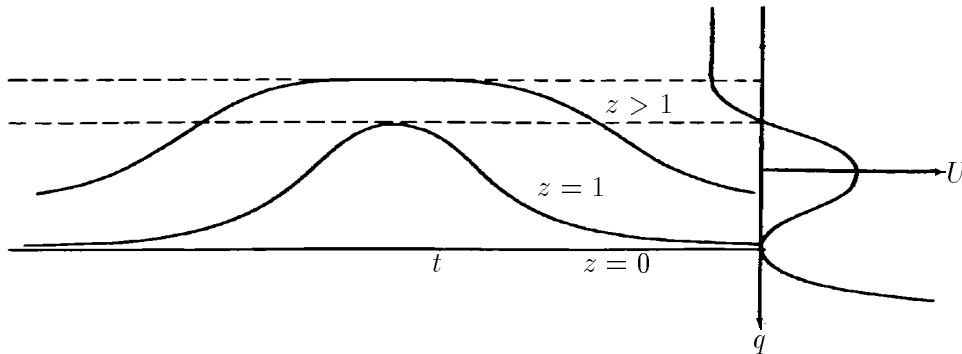


Abbildung 2.8: Mögliche Integrationswege, durch z parametrisiert. Rechts ist das um 90° gedrehte Potential aufgetragen (nach [49]).

Betrachtet man die zu diesen Lösungen gehörende Wirkung als Funktion von z , so findet man für $z = 1$ ein lokales Maximum, da dieser Weg der stationären Lösung entspricht. Fluktuationen um den kritischen Radius führen auf eine kleinere Wirkung. Für $z \rightarrow \infty$ geht die Wirkung gegen minus Unendlich, da das Teilchen mehr und mehr Zeit in der Nähe des Umkehrpunktes verbringt, in dessen Nähe das Potential negativ ist. Für $z = 0$ bleibt das Teilchen nur im ersten Minimum von $U(q)$, die Wirkung zeigt ein lokales Minimum. Der gesamte Verlauf der Wirkung ist in Abbildung 2.9b) wiedergegeben.

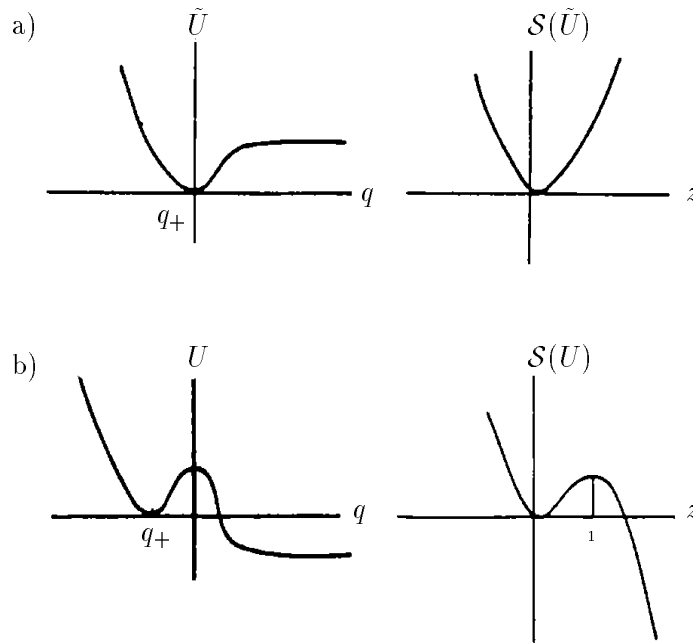


Abbildung 2.9: Das Ein-Mulden-Potential (a) und das Potential des Teilchenbildes (b) (links) mit den zugehörigen Wirkungen (rechts).

Das zu berechnende Integral¹ $J = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-S(z)/\hbar}$ ist aufgrund der negativen Wirkung hoffnungslos divergent. Wie man in Abbildung 2.9 sieht, ist das entsprechende Integral bei dem Ein-Mulden-Potential $\tilde{U}(q)$ konvergent, da hier die Wirkung überall positiv ist.

Die Idee, die hinter der analytischen Fortsetzung steckt, ist die folgende: Das Potential $\tilde{U}(q)$ wird so verbogen, daß sich das gesuchte Potential $U(q)$ mit dem eigentlich divergenten Integral daraus ergibt. Damit das zugehörige Integral aber konvergent bleibt, muß der Integrationsweg mit der Methode des steepest descent in der komplexen Ebene geeignet mitverschoben werden. Diese Methode soll nun an einem Beispiel erklärt werden:

¹Im Gegensatz zum Ausdruck (2.64) steckt hier der Term nullter Ordnung $S(\bar{q}) = \mathcal{B}$ noch mit in dem Integral.

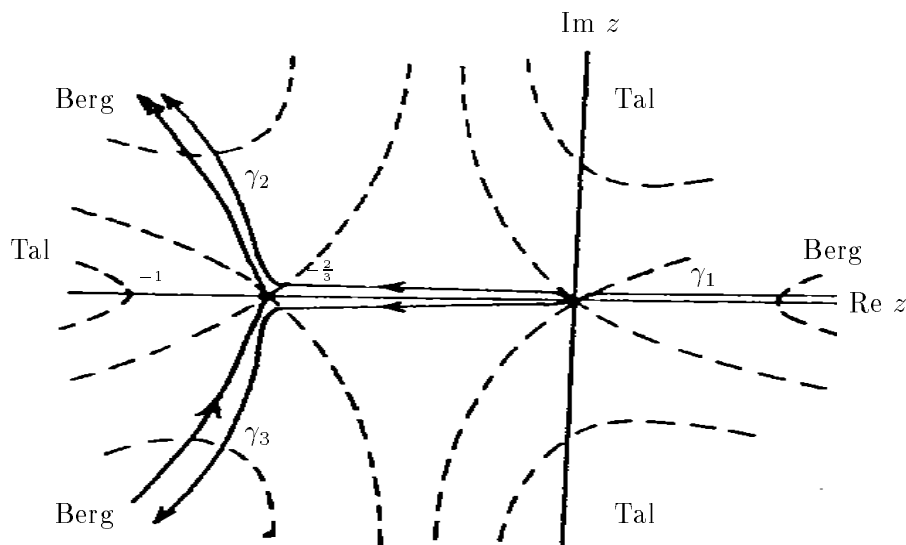


Abbildung 2.10: Realteil von $z^2 + z^3$ in der z -Ebene mit den Integrationswegen $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ (nach [15]).

Dazu betrachtet man das Modellintegral

$$\int_0^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{(z^2+z^3)/\sigma^2} . \quad (2.65)$$

Abbildung 2.10 zeigt den Realteil von $z^2 + z^3$. Einige seiner Eigenschaften seien im folgenden angegeben:

Die Extremwerte des Realteils von $z^2 + z^3$ auf der reellen Achse berechnen sich aus der Ableitung

$$\operatorname{Re}(3z^2 + 2z) = 0 \quad (2.66)$$

zu $z = 0$ oder $z = -2/3$. Mit Hilfe der zweiten Ableitung findet man bei $z = 0$ ein Minimum und bei $z = -2/3$ ein Maximum. Bezüglich der gesamten z -Ebene sind beide Punkte Sattelpunkte.

Berechnet man die Nullstellen des Realteils von $z^3 + z^2$, so erhält man die kubische Gleichung

$$\operatorname{Re} z^2 = -\operatorname{Re} z^3 . \quad (2.67)$$

Die Lösungsmenge schneidet die reelle Achse bei 0 und -1 .

Außerdem ist die betrachtete Funktion $\operatorname{Re}(z^3 + z^2)$ bezüglich der reellen Achse spiegelsymmetrisch, denn alle Terme, die zum Realteil beitragen, enthalten gerade Potenzen des Imaginärteils von z .

Für große z schließlich wird der z^3 -Term dominierend und die Funktion zeigt eine dreizählige Symmetrie. Alle diese Eigenschaften sind in Abbildung 2.10 zusammengefaßt.

Zur analytischen Fortsetzung wird nun der Integrand

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{(z^2+z^3)/\sigma^2} \quad (2.68)$$

verbogen, indem σ , bislang ein positiver, reeller Parameter, entgegengesetzt des Urzeigersinns zu negativem σ gedreht wird, also mit einer Phase $e^{i\varphi}$ versehen wird:

$$\sigma \rightarrow |\sigma| e^{i\varphi} . \quad (2.69)$$

Der Integrationsweg $\gamma_1(z)$, der entlang der positiven reellen Achse läuft (vgl. Abb. 2.10), muß jetzt so mitgedreht werden, daß er, wenn er vorher entlang eines Berges lief, dies auch danach wieder tut. Der steilste Abstieg bleibt also konstant, daher der Name der Methode. Das bedeutet, daß auch die Variable z eine Phase bekommt:

$$z \rightarrow |z| e^{i\chi} . \quad (2.70)$$

Der Integrand ist für große z durch z^3/σ^2 gegeben. Dieser Wert wird nur asymptotisch erreicht. Die Forderung, daß das Maximum in der Asymptotik konstant bleibt, lautet also:

$$\frac{z^3}{\sigma^2} \rightarrow \frac{|z|^3}{|\sigma|^2} e^{i(3\chi-2\varphi)} \stackrel{!}{=} \frac{|z|^3}{|\sigma|^2} , \quad (2.71)$$

wodurch sich die Phase des Integrationsweges zu

$$\chi = \frac{2}{3}\varphi \quad (2.72)$$

bestimmt. Bei einer Drehung von σ um 180° ($\sigma \rightarrow \sigma e^{i\pi}$) nimmt der Integrand wieder seine ursprüngliche Form an:

$$\exp\left(\frac{1}{\sigma^2}(z^2+z^3)\right) \rightarrow \exp\left(\frac{1}{\sigma^2}e^{-2\pi i}(z^2+z^3)\right) , \quad (2.73)$$

damit das Integral aber konvergent bleibt, erfährt der Integrationsweg nun eine Drehung um $\chi = 2\pi/3$, er wird also von dem Berg entlang der reellen Achse auf den Berg in Richtung $2\pi/3$ gedreht. Bis zum Sattelpunkt bei $z = -2/3$ kann man den Weg weiter entlang der reellen Achse laufen lassen, da hier der Integrand positiv ist und also keine Probleme macht. Danach wird er in die komplexe Ebene verlegt. Die genaue Form des Integrationsweges spielt aufgrund des Cauchyschen Integralsatzes keine Rolle, da der Integrand keine Singularitäten hat. Damit ergibt sich der in Abbildung 2.10 gezeigte Integrationsweg γ_2 .

Genauso hätte man den Parameter σ natürlich auch im Urzeigersinn zu $\sigma e^{-i\pi} = -\sigma$ drehen können, das hätte den Integranden auch nicht verändert. Dabei wäre der Integrationsweg aber auf den Berg in der unteren Halbebene ($\chi = -2\pi/3$) verschoben worden (γ_3). Der Unterschied zwischen diesen beiden Integrationen ist genau ein Vorzeichen im Imaginärteil des Integrals und damit in der Übergangswahrscheinlichkeit. Diese Vorzeichenuneindeutigkeit ist eine Eigenschaft der analytischen Fortsetzung.

Das soeben besprochene Verfahren soll jetzt auf das gesuchte Integral angewandt werden:

$$J = \int dz \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-S(z)/\hbar} . \quad (2.74)$$

Bis zum Sattelpunkt bei $z = 1$, welcher der Bounce-Lösung entspricht, kann entlang der reellen Achse integriert werden (siehe Abb. 2.9). Ab hier wird der Integrationsweg in die positive (oder negative) komplexe Halbebene verschoben. Auch hier zeigt sich wieder die Zweideutigkeit der analytischen Fortsetzung.

Die Integration bis zum Sattelpunkt liefert einen reellen Beitrag, um welchen man sich im folgenden nicht weiter kümmern muß, wenn man an der Übergangswahrscheinlichkeit interessiert ist, welche nach Gleichung (2.4) proportional zum Imaginärteil des Integrals ist. Dieser ergibt sich aus der Integration in der komplexen Ebene von $z = 1$ bis Unendlich:

$$\operatorname{Im} J = \operatorname{Im} \int_1^{1+i\infty} dz \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-S(z)/\hbar} . \quad (2.75)$$

Setzt man jetzt für $S(z)$ die Sattelpunktentwicklung $S(z) = \mathcal{B} + \frac{1}{2} \mathcal{B}''(z-1)^2$ mit negativem \mathcal{B}'' ein, so bekommt man

$$\operatorname{Im} J = e^{-\mathcal{B}/\hbar} \operatorname{Im} \int_1^{1+i\infty} dz \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{1}{2\hbar} |\mathcal{B}''| (z-1)^2} . \quad (2.76)$$

Mit Hilfe der Variablensubstitution $iy = z-1 \Rightarrow dz = i dy$ transformieren sich die Grenzen zu $y(z=1) = 0$ und $y(z=1+i\infty) = \infty$. Man erhält also ein Gaußsches Integral:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} J &= e^{-\mathcal{B}/\hbar} \operatorname{Im} i \int_0^\infty dy \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{1}{2\hbar} |\mathcal{B}''| y^2} \\ &= e^{-\mathcal{B}/\hbar} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{2\pi\hbar}}{\sqrt{|\mathcal{B}''|}} \\ &= \frac{1}{2} e^{-\mathcal{B}/\hbar} |\mathcal{B}''|^{-1/2} . \end{aligned} \quad (2.77)$$

Der Faktor $1/2$ kommt daher, daß im Gaußschen Integral nur von 0 bis ∞ und nicht von $-\infty$ bis ∞ integriert wird. Hätte man das ursprüngliche, divergente Integral naiv fortgesetzt, indem man die Wurzel aus dem negativen Eigenwert gezogen hätte, so hätte man gerade diesen Faktor $1/2$ nicht bekommen. Physikalisch trägt der Faktor dem Rechnung, daß nur Expansion, aber keine Kontraktion der kritischen Blase in die stabile Phase führt. Für die Zerfallsrate sind aber nur diejenigen Fluktuationen interessant, die in das richtige Vakuum führen, also nur die Expansionen.

2.7 Berechnung der Übergangsrate

Man hat nun alles zusammen, um die Tunnelrate in einer Dimension berechnen zu können. Zuerst bestimmt man die in Gleichung (2.46) eingeführte Konstante K , indem man diese Gleichung für eine einzelne Bounce-Lösung betrachtet:

$$\mathcal{N}[\det(-\partial_t^2 + U''(\bar{q}))]^{-1/2} = \left(\frac{w}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-w\tau/2} K \quad (2.78)$$

und für die Normierungskonstante \mathcal{N} den in Gleichung (2.26) gewonnenen Ausdruck für das Potential des harmonischen Oszillators

$$\mathcal{N}[\det(-\partial_t^2 + w^2)]^{-1/2} = \left(\frac{w}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-w\tau/2} \quad (2.79)$$

einsetzt. Dabei muß man den Eigenwert Null und die negative Mode in der Determinante in Gleichung (2.78) weglassen (\det') und gemäß der Überlegung auf Seite 25 einen zusätzlichen Faktor $(\mathcal{B}/2\pi\hbar)^{1/2}$ für die Integration über die Nullmode einführen. Die Integration über die negative Mode λ_0 liefert, wie im letzten Abschnitt gesehen, einen Faktor $\frac{i}{2\sqrt{|\lambda_0|}}$. Alle anderen Faktoren sind reell. Damit erhält man für den Imaginärteil von K den Ausdruck

$$\operatorname{Im}K = \frac{1}{2} \left(\frac{\mathcal{B}}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \left| \frac{\lambda_0 \det'(-\partial_t^2 + U''(\bar{q}))}{\det(-\partial_t^2 + w^2)} \right|^{-1/2}, \quad (2.80)$$

wobei \det' , wie gesagt, die Determinante ohne den Eigenwert Null und ohne die negative Mode bedeutet.

Die Grundzustandsenergie steht in Gleichung (2.52):

$$E_0 = \frac{w\hbar}{2} - \hbar K e^{-\mathcal{B}/\hbar}. \quad (2.81)$$

Setzt man dort für K den Ausdruck (2.80) ein, so findet man für den Imaginärteil der Energie

$$\operatorname{Im}E_0 = -\frac{\hbar}{2} \left(\frac{\mathcal{B}}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{|\lambda_0|}} \left| \frac{\det'(-\partial_t^2 + U''(\bar{q}))}{\det(-\partial_t^2 + w^2)} \right|^{-1/2} e^{-\mathcal{B}/\hbar} \quad (2.82)$$

und damit für die gesuchte Übergangswahrscheinlichkeit (Gl. (2.4))

$$\begin{aligned} \Gamma &= -2\operatorname{Im}E_0/\hbar \\ &= \left(\frac{\mathcal{B}}{2\pi\hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{|\lambda_0|}} \left| \frac{\det'(-\partial_t^2 + U''(\bar{q}))}{\det(-\partial_t^2 + w^2)} \right|^{-1/2} e^{-\mathcal{B}/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.83)$$

Dieser Ausdruck hat die in Gleichung (2.39) angekündigte Form

$$\Gamma = \mathcal{A} e^{-\mathcal{B}/\hbar}. \quad (2.84)$$

2.8 Mehrdimensionale Theorie

Es soll nun die bislang im Eindimensionalen entwickelte Theorie auf mehrere (D) Dimensionen verallgemeinert werden. Dazu betrachtet man statt des Teilchenortes $q(t)$ wieder wie am Anfang ein Skalarfeld $\Phi(x_\mu)$ als Funktion der Raumzeit x_μ mit $\mu = 1, \dots, D$. Das im Teilchenbild (Seite 13) eingeführte Potential $U(q)$ (siehe Abb. 2.3) wird jetzt durch das ursprüngliche quartische Potential $U(\Phi)$ (siehe Abb. 2.1) der Landau-Theorie ersetzt.

Die Lagrangefunktion (vgl. Gl. (2.3)) schreibt sich dann als

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial_\mu \Phi + U(\Phi) \quad (2.85)$$

mit der zugehörigen Bewegungsgleichung (vgl. Gl. (2.14))

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \nabla^2 \right) \Phi = \partial_\mu \partial_\mu \Phi = U'(\Phi). \quad (2.86)$$

Die Randbedingungen lassen sich analog übersetzen: die Bedingung, daß das System am Anfang und am Ende im falschen Vakuum sein soll (Gl. (2.23)), lautet nun

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Phi(t, \vec{x}) = \lim_{x_D \rightarrow \pm\infty} \Phi(x_\mu) = \Phi_+ . \quad (2.87)$$

Damit die Wirkung endlich bleibt, fordert man außerdem:

$$\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} \Phi(t, \vec{x}) = \Phi_+ . \quad (2.88)$$

Das entspricht der Annahme, daß außerhalb der Blase mit richtigem Vakuum das falsche Vakuum unangetastet bleibt. Beide Gleichungen (Gl. (2.87) und Gl. (2.88)) lassen sich zusammenfassen zu

$$\lim_{|x_\mu| \rightarrow \infty} \Phi(x_\mu) = \Phi_+ . \quad (2.89)$$

Die andere Forderung betrifft die Wahl des Zeitachsennullpunkts. Er wird so gewählt, daß hier das Zentrum der Bounce-Lösung liegt (vgl. Gl. (2.34)):

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t}(0, \vec{x}) = 0 . \quad (2.90)$$

Sowohl die Bewegungsgleichung (Gl. (2.86)) als auch die Randbedingungen (Gl. (2.89) und Gl. (2.90)) sind radialsymmetrisch. Dies legt die Vermutung nahe, daß auch die Lösung radialsymmetrisch ist, d.h. nur vom Radius

$$r = \sqrt{x_\mu x_\mu} \quad (2.91)$$

abhängt. Dazu schreibt man die drei Gleichungen Gl. (2.86), Gl. (2.89) und Gl. (2.90) in Kugelkoordinaten um: Die Randbedingungen werden dann zu

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Phi(r) = \Phi_+ \quad (2.92)$$

und

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 . \quad (2.93)$$

Gleichung (2.93) folgt aus Gleichung (2.90) aus Stetigkeitsgründen.

Für die dritte Gleichung, die Bewegungsgleichung, braucht man den Laplace-Operator $\partial_\mu \partial_\mu$ in Kugelkoordinaten. Er lautet in D Dimensionen

$$\Delta = \partial_\mu \partial_\mu = \Delta_r + \Delta_\Omega , \quad (2.94)$$

wobei Δ_Ω der auf die Winkelabhängigkeit wirkende Teil des Laplace-Operators ist und der Radialteil gegeben ist durch

$$\Delta_r = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{(D-1)}{r} \frac{d}{dr} . \quad (2.95)$$

Damit wird die Bewegungsgleichung zu

$$\begin{aligned} \partial_\mu \partial_\mu \Phi(r) &= U'(\Phi(r)) \\ \Leftrightarrow \frac{d^2}{dr^2} \Phi + \frac{D-1}{r} \frac{d}{dr} \Phi &= U'(\Phi). \end{aligned} \quad (2.96)$$

Da Φ nur von r abhängen soll, ist es gerechtfertigt in Gleichung (2.96) nur den r -abhängigen Teil des Differentialoperators zu betrachten. Mit dieser Gleichung (2.96) hat man das Problem des Tunneleffekts mit unendlich vielen Freiheitsgraden in eine gewöhnliche Differentialgleichung umgeschrieben. Zu zeigen bleibt noch, daß es überhaupt eine radial-symmetrische Lösung gibt und daß das, abgesehen von der trivialen Lösung $\Phi \equiv 0 \quad \forall r$, diejenige mit der kleinsten Wirkung ist. Der Beweis ist bei Coleman, Glaser und Martin [52] zu finden und wird in Anhang B skizziert.

Gleichung (2.96) kann man erneut als Bewegungsgleichung eines Teilchens am Ort Φ zur Zeit r im Potential $-U(\Phi)$ interpretieren. Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall (Gl. (2.22)) taucht hier aber ein zusätzlicher Ableitungsterm $\frac{D-1}{r} \frac{d}{dr}$ auf. Dies entspricht einer Stokeschen Dämpfung, aber mit einem Koeffizienten $\sim 1/r$. Aufgrund dieses Dämpfungsterms läßt sich keine Energieerhaltung analog zu Gleichung (2.15) aufstellen, und Gleichung (2.96) ist nicht so wie vorne exakt lösbar. Man kann aber ein qualitatives Bild der Lösung geben (vgl. auch Abschnitt 3.1):

Für $r = 0$ ist die Lösung dem stabilen Minimum (bzw. beim umgekehrten Potential dem Maximum) Φ_- am nächsten. Für den Fall der überhitzten Flüssigkeit heißt das, daß das Innere der Blase mit der stabilen Dampfphase gefüllt ist. Für großes r nähert sich das Teilchen dem metastabilen Zustand Φ_+ , um für r gegen Unendlich bei Φ_+ zur Ruhe zu kommen. Außerhalb der Blase ist das System also flüssig. Der Antidämpfungsterm bewirkt dabei, daß der stabile Zustand bei $r = 0$ nicht genau der Konfiguration Φ_- entspricht, sondern einer etwas größeren (vgl. Abb. 3.2). Die Lösung soll auch hier wieder Bounce-Lösung $\bar{\Phi}$ heißen.

Die Wirkung der Bounce-Lösung

$$\mathcal{S} = \int d^D x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \bar{\Phi} \partial_\mu \bar{\Phi} + U(\bar{\Phi}) \right] = \mathcal{T} + \mathcal{V} \quad (2.97)$$

läßt sich ganz allgemein in D Dimensionen durch die kinetische Energie \mathcal{T} ausdrücken, wenn man analog zu Anhang B für positive σ die Skalentransformation

$$\begin{aligned} \Phi_\sigma(x) &= \Phi(x/\sigma) \\ \mathcal{T}[\Phi_\sigma(x)] &= \sigma^{D-2} \mathcal{T}[\Phi(x)] \\ \mathcal{V}[\Phi_\sigma(x)] &= \sigma^D \mathcal{V}[\Phi(x)] \end{aligned} \quad (2.98)$$

betrachtet. \mathcal{S} ist für die Bounce-Lösung stationär unter Skalentransformation:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\mathcal{S}}{d\sigma} \right|_{\sigma=1} &= (D-2) \sigma^{D-3} \mathcal{T} + D \sigma^{D-1} \mathcal{V} \Big|_{\sigma=1} = 0 \\ \Leftrightarrow (2-D) \mathcal{T} &= D \mathcal{V}. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Für die Bounce-Lösung ($\sigma = 1$) erhält man daraus mit Gleichung (2.97) den folgenden Ausdruck für die Wirkung:

$$\mathcal{S}_D = \mathcal{S}(\text{Bounce}) = \frac{2}{D} \mathcal{T} = \frac{1}{D} \int d^D x \partial_\mu \bar{\Phi} \partial_\mu \bar{\Phi}. \quad (2.100)$$

Zur Berechnung der Übergangsamplitude verfährt man nun analog zum eindimensionalen Fall. Man macht wieder eine Sattelpunktentwicklung um die Bounce-Lösung. Auch hier muß man, um das Integral berechnen zu können, die Nullmoden und die negative Mode herausnehmen. Diese seien im folgenden aufgeführt:

Nullmode

Im eindimensionalen Fall bedingte die Zeittranslationsinvarianz die Existenz einer Nullmode $q_1 = 1/\sqrt{\mathcal{B}} \cdot \frac{dq}{dt}$ (Gl. (2.57)). Bei der Berechnung der Determinante wurde der Eigenwert Null ausgespart und dafür ein zusätzlicher Faktor $(\mathcal{B}/2\pi\hbar)^{1/2}$ eingeführt. In der Feldtheorie hat man nun Translationsinvarianz gegenüber allen Raumzeitrichtungen. Dies führt zu D Nullmoden proportional zu $\partial_\mu \bar{\Phi}$. Um die Normierung zu bestimmen, betrachtet man die Wirkung. Nach Gleichung (2.100) findet man den Ausdruck

$$\mathcal{S}_D = \frac{1}{D} \int d^D x \partial_\mu \bar{\Phi} \partial_\mu \bar{\Phi}, \quad (2.101)$$

welcher analog zu der eindimensionalen Wirkung der Teilchenmechanik ist: $\mathcal{B} = \int dt (dq/dt)^2$ (Gl. (2.37)). Man hat also für jede Richtung dieselbe Normierung wie im eindimensionalen Fall (Gl. (2.56)) und damit denselben Vorfaktor, aber in D -ter Potenz

$$(\mathcal{S}_D/2\pi\hbar)^{\frac{D}{2}}. \quad (2.102)$$

Die Integration über die Translation führt dann zu einem Volumenfaktor. Der physikalische Grund dafür ist, daß die Wahrscheinlichkeit mit der sich eine Blase bildet, proportional zum Volumen ist.

Negative Mode

Entscheidend für die Rechnung im Eindimensionalen war die Tatsache, daß es genau einen negativen Eigenwert der zweiten Ableitung der Wirkung $\left. \frac{\delta^2 \mathcal{S}}{\delta q^2} \right|_{\bar{q}}$ gab. Der Integrationsweg wurde in der analytischen Fortsetzung so verbogen, daß das Integral bezüglich dieser negativen Mode konvergent blieb. Wenn es jetzt mehr als einen negativen Eigenwert gäbe, wäre das Verfahren nicht mehr anwendbar.

Mittels Skalentransformation (Gl. (2.98)) läßt sich zeigen, daß es mindestens einen negativen Eigenwert gibt. Dazu leitet man die skalentransformierte D -dimensionale Wirkung

$$\mathcal{S}[\Phi_\sigma(x)] = \sigma^{D-2} \mathcal{T} + \sigma^D \mathcal{V} \quad (2.103)$$

zweimal nach σ ab und findet für die Bounce-Lösung:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 \mathcal{S}}{d\sigma^2} \right|_{\sigma=1} &= (D-2)(D-3) \sigma^{D-4} \mathcal{T} + D(D-1) \sigma^{D-2} \mathcal{V} \Big|_{\sigma=1} \\ &= (D-2)(D-3) \mathcal{T} + D(D-1) \mathcal{V}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Setzt man für \mathcal{V} die Relation aus der ersten Ableitung (Gl. (2.99)) ein, so erhält man für $D > 2$ einen negativen Ausdruck:

$$\left. \frac{d^2 \mathcal{S}}{d\sigma^2} \right|_{\sigma=1} = (D-2) \mathcal{T} (D-3-D+1) = -2(D-2) \mathcal{T} < 0 \quad (2.105)$$

und damit nach Gleichung (2.18) einen negativen Eigenwert.

Die Existenz genau eines negativen Eigenwertes ist bereits für beliebige Dimensionen in Anhang A bewiesen worden.

Mit dieser Modifikation erhält man schließlich in der mehrdimensionalen Theorie analog zu Gleichung (2.83) für die Übergangswahrscheinlichkeit in D Dimensionen:

$$\Gamma = \left(\frac{\mathcal{S}_D}{2\pi\hbar} \right)^{D/2} \frac{1}{\sqrt{|\lambda_0|}} \left| \frac{\det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]} \right|^{-1/2} e^{-\mathcal{S}_D/\hbar} [1 + \mathcal{O}(\hbar)] \quad (2.106)$$

und speziell in drei Dimensionen die im folgenden verwendete Formel:

$$\Gamma = \left(\frac{\mathcal{S}_3}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{|\lambda_0|}} \left| \frac{\det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]} \right|^{-1/2} e^{-\mathcal{S}_3/\hbar} [1 + \mathcal{O}(\hbar)]. \quad (2.107)$$

Auch hier bedeutet \det' wieder das Auslassen der Nullmoden und der negativen Mode. \mathcal{S}_D ist die Wirkung der Bounce-Lösung in D Dimensionen. Diese Theorie hat, wie jede relativistische Feldtheorie, Ultraviolettdivergenzen und muß also noch renormiert werden.

2.9 Übergangsrate bei endlicher Temperatur

In diesem Abschnitt soll die vierdimensionale Theorie auf endliche Temperaturen verallgemeinert werden. Dazu erinnert man sich, daß die Quantenstatistik von Bosonen bei $T \neq 0$ formal äquivalent ist zu einer Quantenfeldtheorie in einem euklidischen Raum mit einer periodischen „Zeit“ mit der Periode $1/T$ [28, 29]. Die Berechnung der Übergangsrate geschieht analog zu der vorne entwickelten Theorie für $T = 0$, nur daß man hier statt der $O(4)$ -symmetrischen Bounce-Lösung eine (bzgl. der räumlichen Koordinaten) $O(3)$ -symmetrische, in der „Zeit“-Richtung periodische Lösung mit der Periode $1/T$ suchen muß.

In Abbildung 2.11 sind die zum minimalen Wert der vierdimensionalen Wirkung gehörenden Lösungen der Bewegungsgleichung für verschiedene Temperaturen gezeichnet. Bei $T = 0$ entspricht die Lösung einer $O(4)$ -symmetrischen Blase mit dem Radius R_4 . Bei $T \ll R_4^{-1}$ besteht die Lösung aus einer Kette von solchen Blasen, die in der Zeitrichtung

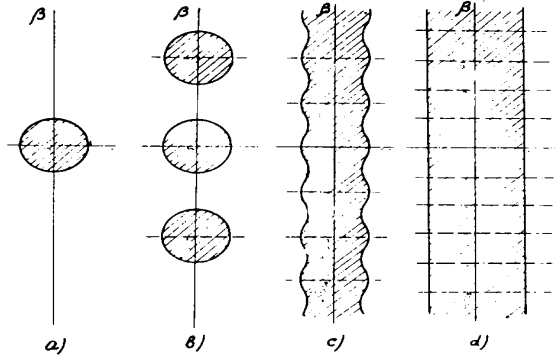


Abbildung 2.11: Lösungen der Bewegungsgleichung für verschiedene Temperaturen: a) $T = 0$, b) $T \ll R_4^{-1}$ c) $T \sim R_4^{-1}$ d) $T > R_4^{-1}$ (nach [28]).

in Abständen T^{-1} voneinander angeordnet sind. Wenn T von derselben Größenordnung wie der reziproke Radius ist, $T \sim R_4^{-1}$, fangen die Blasen an, sich zu überlappen. In dem Fall großer Temperaturen $T > R_4^{-1}$ ist die Lösung schließlich ein Zylinder, dessen räumlicher Querschnitt eine $O(3)$ -symmetrische Blase mit einem neuen Radius R ist. Der Übergang zwischen der dem Quantentunneln entsprechenden $O(4)$ -symmetrischen Lösung bei $T=0$ und der $O(3)$ -symmetrischen, durch thermische Fluktuationen bedingten Lösung bei endlichen Temperaturen ist von Garriga und Ferrera [53] untersucht worden.

In dem letzten Fall für große T ($T > R_4^{-1}$) reduziert sich bei der Berechnung der vierdimensionalen Wirkung die Integration über die Zeit einfach auf die Multiplikation mit T^{-1}

$$\mathcal{S}_4 = T^{-1} \mathcal{S}_3, \quad (2.108)$$

wobei $\mathcal{S}_3(\bar{\varphi})$ die zur $O(3)$ -symmetrischen Bounce-Lösung gehörende dreidimensionale Wirkung ist:

$$\mathcal{S}_3 = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \partial_i \bar{\Phi} \partial_i \bar{\Phi} + U(\bar{\Phi}) \right]. \quad (2.109)$$

Die Bounce-Lösung $\bar{\Phi}$, die dem Minimum der dreidimensionalen Wirkung entspricht, bestimmt sich aus der folgenden Bewegungsgleichung:

$$\frac{d^2 \Phi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\Phi}{dr} = U'(\Phi) \quad (2.110)$$

mit den Randbedingungen

$$\begin{aligned} \Phi(r) &\rightarrow 0 \quad \text{für } r \rightarrow \infty \quad \text{und} \\ \frac{d\Phi}{dr} &= 0 \quad \text{bei } r = 0. \end{aligned} \quad (2.111)$$

Den kompletten Ausdruck für die Tunnelwahrscheinlichkeit pro Zeit- und Volumeneinheit bei hohen Temperaturen ($T > R_4^{-1}$) bekommt man dann auf analoge Weise wie

den in den vorigen Abschnitten hergeleiteten Ausdruck für $T = 0$. Man erhält für die Übergangswahrscheinlichkeit bei endlicher Temperatur:

$$\Gamma(T) = T \left(\frac{\mathcal{S}_3}{2\pi\hbar T} \right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{|\lambda_0|}} \left| \frac{\det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]} \right|^{-1/2} e^{-\mathcal{S}_3/(\hbar T)}. \quad (2.112)$$

Auch hier bedeutet \det' wieder, daß die (drei) Nullmoden und die negative Mode λ_0 bei der Berechnung der Determinante ausgelassen werden. Die Nullmoden liefern den Faktor $[\mathcal{S}_3/(2\pi T)]^{3/2}$. Der Faktor T resultiert aus der Periodizität in der Zeitrichtung.

Für kleine T wird der Übergang durch Quantenfluktuationen hervorgerufen, die Barriere wird also untertunnelt. Dieser Übergang wird durch Gleichung (2.107) beschrieben. Für hinreichend große T dagegen überwiegen die thermischen Fluktuationen, und die Barriere wird überquert. Die zugehörige Übergangsrate steht in Gleichung (2.112). Zwischen beiden besteht der folgende Zusammenhang:

Die euklidische Quantenfeldtheorie in drei Dimensionen bei verschwindender Temperatur ist formal identisch zu der dreidimensionalen klassischen Mechanik bei endlichen Temperaturen. Dazu macht man folgende Ersetzung:

$$\frac{\mathcal{S}_3}{\hbar} = \frac{\mathcal{H}}{k_B T}. \quad (2.113)$$

\mathcal{H} ist der entsprechende Hamiltonoperator und k_B die Boltzmannkonstante. Der Exponentialterm in der Übergangsrate Gl. (2.107) wird damit zum Boltzmannfaktor

$$e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}}. \quad (2.114)$$

Dies ist der dominante Term aus der in der Thermodynamik z.B. für die Keimbildung aus einer übersättigten Dampfphase benutzten Formel:

$$\Gamma \simeq \tilde{\Gamma} \exp\left(\frac{F}{k_B T}\right), \quad (2.115)$$

in der $\tilde{\Gamma}$ eine typische molekulare Stoßrate und F die zur Bildung eines aus n kleinen Tröpfchen bestehenden Flüssigkeitstropfen vom kritischen Radius R erforderliche freie Energie

$$F = -nk_B T x + \sigma 4\pi R^2 \quad (2.116)$$

ist (x ist die Übersättigung und σ die Oberflächenspannung). Für Wasser findet man z.B. bei Zimmertemperatur einen typischen Wert [54] von

$$\Gamma = 10^{25(1-2/x^2)} \text{cm}^{-3} \text{s}^{-3}. \quad (2.117)$$

Mit der in dieser Arbeit berechneten Nukleationsrate hat man also auch die Übergangsrate bei endlichen Temperaturen für dreidimensionale, also reale Systeme der klassischen Mechanik, wie z.B. für das in der Einleitung erwähnte Teekochen, bestimmt.

Kapitel 3

Klassische Lösung für ein Bläschen

3.1 Thin wall approximation

Die im vorigen Kapitel dargelegte Theorie wird nun auf den Phasenübergang der dreidimensionalen skalaren Feldtheorie angewandt und die Übergangsrate in einer Entwicklung, die in der nullten Ordnung der Thin wall approximation entspricht, berechnet. Die Lagrangedichte in der Φ^4 -Theorie in der gebrochenen Phase

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial_\mu \Phi - \frac{m_0^2}{4} \Phi^2 + \frac{\hat{g}_0}{4!} \Phi^4 + \frac{3 m_0^4}{8 \hat{g}_0}, \quad (3.1)$$

in der m_0 und \hat{g}_0 die weiter unten erklärten nackten Parameter Masse und Kopplung sind, motiviert dabei das folgende symmetrische, quartische Potential U_s (vgl. Gl. (2.35)):

$$U_s = \frac{\kappa}{8} (\Phi^2 - \alpha^2)^2. \quad (3.2)$$

Um die Minima gegeneinander zu verschieben, führt man eine kleine Asymmetrie proportional zu η ein (vgl. Gl. (2.2)):

$$U = U_s + \frac{\eta}{2\alpha} (\Phi - \alpha). \quad (3.3)$$

Dieses Potential hat dieselbe Form wie das in Gleichung (2.1).

Man addiert jetzt zu dem Potential noch eine Konstante so, daß es im instabilen Minimum Φ_+ Null wird. Dies entspricht nur einer Verschiebung der Energieskala. Die dazu nötige Konstante ist, wie man sieht, wenn man das Ergebnis aus Gleichung (3.11) einsetzt,

$$-U(\Phi_+) = \frac{\eta^2}{8\alpha^4\kappa} + \frac{\eta^3}{16\alpha^8\kappa^2} + \mathcal{O}(\eta^4). \quad (3.4)$$

Damit ist das zu untersuchende Potential also gegeben durch

$$U(\Phi) = \frac{\kappa}{8} (\Phi^2 - \alpha^2)^2 + \frac{\eta}{2\alpha} (\Phi - \alpha) + \frac{\eta^2}{8\alpha^4\kappa} + \frac{\eta^3}{16\alpha^8\kappa^2} + \mathcal{O}(\eta^4). \quad (3.5)$$

In niedrigster Ordnung in η liegen die Minima bei $\pm\alpha$, aber die Energien der Minima sind um η gegeneinander verschoben, wodurch der Zustand bei $\Phi = +\alpha$ zum metastabilen Zustand wird, siehe Abbildung 3.1.

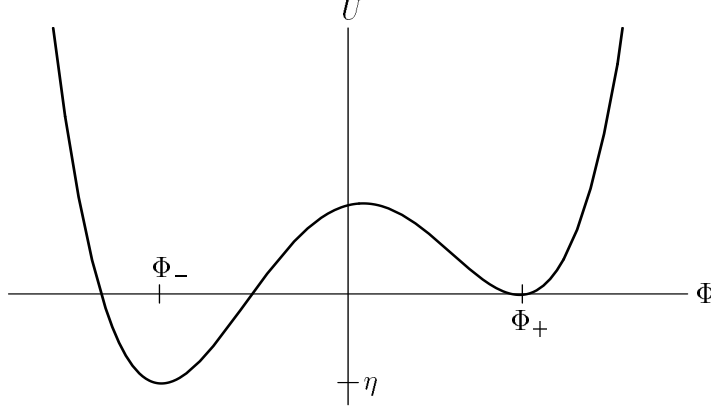


Abbildung 3.1: Das Potential aus Gleichung (3.5). Die in führender Ordnung bei Φ_+ und Φ_- liegenden Minima sind um η gegeneinander verschoben, wodurch das Minimum bei Φ_+ zum metastabilen Minimum wird.

Die durch den Asymmetrieterm bedingten Korrekturen zur Position der Minima berechnet man mit einem Potenzreihenansatz:

$$\Phi_{\pm} = \pm\alpha + e_1\eta + e_2\eta^2 + e_3\eta^3 + \dots \quad (3.6)$$

Eingesetzt in die Ableitung des Potentials bekommt man die Gleichung

$$\left(\alpha^2\kappa e_1 + \frac{1}{2\alpha}\right)\eta + \left(\alpha^2\kappa e_2 \pm \frac{3}{2}\alpha\kappa e_1^2\right)\eta^2 + \left(\frac{1}{2}\kappa e_1^3 \pm 3\alpha\kappa e_1 e_2 + \alpha^2\kappa e_3\right)\eta^3 + \mathcal{O}(\eta^4) = 0. \quad (3.7)$$

Durch Koeffizientenvergleich findet man

$$e_1 = -\frac{1}{2\alpha^3\kappa}, \quad (3.8)$$

$$e_2 = \mp\frac{3}{8\alpha^7\kappa^2} \quad \text{und} \quad (3.9)$$

$$e_3 = -\frac{1}{2\alpha^{11}\kappa^3} \quad (3.10)$$

und also für die Minima:

$$\Phi_{\pm} = \pm\alpha - \frac{1}{2\alpha^3\kappa}\eta \mp \frac{3}{8\alpha^7\kappa^2}\eta^2 - \frac{1}{2\alpha^{11}\kappa^3}\eta^3 + \mathcal{O}(\eta^4). \quad (3.11)$$

Damit kann man einen Zusammenhang zwischen den Parametern κ und α und einer nackten Masse \hat{m}_0 nach der in der gebrochenen Phase geltenden Beziehung

$$\hat{m}_0^2 = \frac{\partial^2}{\partial\Phi^2}U(\Phi)\Big|_{\Phi=\Phi_+} \quad (3.12)$$

herleiten:

$$\hat{m}_0^2 = -\frac{\kappa}{2}\alpha^2 + \frac{3}{2}\kappa\Phi_-^2 = \alpha^2\kappa + \frac{3}{2\alpha^2}\eta - \frac{3}{4\alpha^6\kappa}\eta^2 + \frac{15}{16\alpha^{10}\kappa^2}\eta^3 + \mathcal{O}(\eta^4). \quad (3.13)$$

In dieser Arbeit soll jedoch eine nackte Masse m_0 eingeführt werden, zu deren Definition nur der symmetrische Teil U_s des Potentials U verwendet wird:

$$m_0^2 = \left. \frac{\partial^2}{\partial\Phi^2} U_s(\Phi) \right|_{\Phi=\alpha} = \alpha^2\kappa. \quad (3.14)$$

Die nackte Kopplung ist als vierte Ableitung des Potentials am Minimum definiert:

$$\hat{g}_0 = \left. \frac{\partial^4}{\partial\Phi^4} U(\Phi) \right|_{\Phi=\Phi_+} = \frac{24\kappa}{8} = 3\kappa. \quad (3.15)$$

Hier macht es keinen Unterschied, ob man den Asymmetrieterm in der Definition dazu nimmt oder nicht.

Der erste Schritt in der Berechnung der in der Übergangsrage vorkommenden Fluktationsdeterminante ist die Berechnung der stationären Lösung, der Bounce-Lösung. Für kleine η läßt sich eine qualitative Form der Lösung der zugehörigen Euler-Lagrange Gleichung in drei Dimensionen (vgl. Gl. (2.96))

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\Phi}{d\bar{x}^2} + U'(\Phi) &= 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{d^2\Phi}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d\Phi}{dr} + \frac{\kappa}{2}\Phi(\Phi^2 - \alpha^2) + \frac{\eta}{2\alpha} &= 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

angeben. In dieser Gleichung hat man bereits ausgenutzt, daß die Bounce-Lösung, wie in Anhang B gezeigt, kugelsymmetrisch ist und der winkelabhängige Teil des Laplace-Operators deshalb wegfällt. Interpretiert man die radiale Variable r als Zeit und faßt $\Phi(r)$ als einen Ort zur Zeit r auf, so entspricht Gleichung (3.16) der Bewegungsgleichung eines Teilchens in dem an der horizontalen Achse gespiegeltem Potential aus Abbildung 3.1 mit einer Reibung $\frac{2}{r}\frac{d\Phi}{dr}$. Da es sich hier um den Radialteil einer Bewegungsgleichung handelt, kann man die Bewegung nur für positive Zeiten $r > 0$ betrachten. Dabei muß, damit die Lösung nicht singulär wird, die Ableitung am Ursprung verschwinden.

Das Teilchen, welches bei $\check{\Phi} = \Phi(r=0)$ in Ruhe startet (vgl. Abb. 3.2), rollt durch das Tal auf den Berg bei Φ_+ . Die Form der Lösung hängt dabei von dem Startwert $\check{\Phi}$ zur Zeit $r=0$ ab [22]:

Es gibt einen Punkt $\hat{\Phi}$ mit $\Phi_- < \hat{\Phi} < \Phi_+$, so daß das Teilchen, das bei $\check{\Phi} = \hat{\Phi}$ startet, genau soviel Energie hat, daß es zur Zeit $r = \infty$ bei Φ_+ zur Ruhe kommt. Die zugehörige Lösung ist die Kink-Lösung.

Startet das Teilchen bei größeren Werten $\check{\Phi} > \hat{\Phi}$, so kommt es den Berg bei Φ_+ nicht ganz hoch, rollt wieder zurück und schwingt in dem Tal hin und her. Durch die Dämpfung wird die Energie verringert:

$$\frac{dE}{dr} = \frac{d}{dr} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)^2 - U \right] = \frac{d\Phi}{dr} \left(\frac{d^2\Phi}{dr^2} - \frac{dU}{d\Phi} \right) = \frac{d\Phi}{dr} \left(-\frac{2}{r} \frac{d\Phi}{dr} \right) \leq 0. \quad (3.17)$$

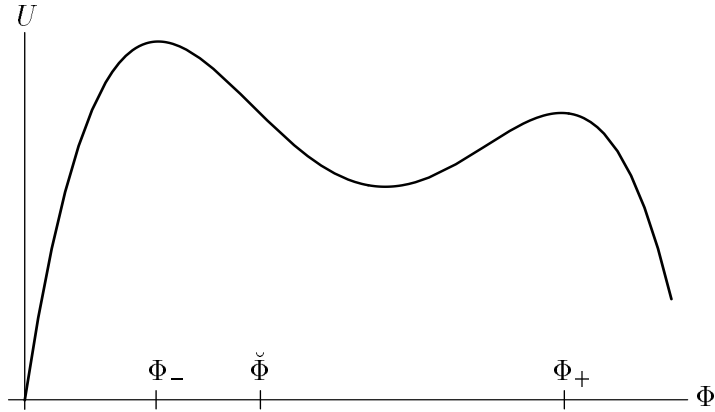


Abbildung 3.2: An der Abszisse gespiegeltes Potential aus Abbildung 3.1. Das Teilchen startet bei $\check{\Phi}$ und rollt durch das Tal auf den Berg bei Φ_+ .

Im letzten Schritt wurde dabei die Euler–Lagrange Gleichung (Gl. (3.16)) eingesetzt. Man erhält eine oszillierende Lösung (vgl. Abb. 3.3).

Liegt der Anfangspunkt schließlich links von $\hat{\Phi}$, $\Phi_- < \check{\Phi} < \hat{\Phi}$, so schießt das Teilchen über die Bergkuppe bei Φ_+ hinaus. Um das zu sehen, entwickelt man die Euler–Lagrange–Gleichung in vier Dimensionen um Φ_- bis zur linearen Ordnung:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + v^2 \right) (\Phi - \Phi_-) = 0. \quad (3.18)$$

Es wurde $v^2 = U''(\Phi_-)$ gesetzt. Diese Differentialgleichung hat die Lösung

$$\Phi(r) - \Phi_- = 2 \left(\Phi(0) - \Phi_- \right) \frac{I_1(vr)}{vr}, \quad (3.19)$$

wobei I_1 die erste Besselfunktion ist. Das Teilchen wird also bis zu hinreichend großen Zeiten r nahe bei Φ_- bleiben. Für große Zeiten r schließlich kann man den Dämpfungsterm vernachlässigen, die Euler–Lagrange–Gleichung wird zur Wellengleichung, und die Lösung divergiert. Das qualitative Verhalten in drei Dimensionen ist genauso.

Alle drei möglichen Lösungen sind in Abbildung 3.3 skizziert. Durch numerisches Lösen der Differentialgleichung Gl. (3.16) nach den in [55] angegebenen Methoden konnte dieses Verhalten bestätigt werden.

Durch die Substitution $r \rightarrow -r$ bleibt die Bewegungsgleichung unverändert, die Bewegung für negative r verläuft also symmetrisch zu der für positive r . Das Teilchen, zu unendlichen negativen Zeiten von dem Berg bei Φ_+ kommend, bewegt sich schnell durch das Tal zum Umkehrpunkt $\hat{\Phi}$, den es zur Zeit $r = 0$ erreicht und bewegt sich genauso wieder zu Φ_+ zurück. Die oben diskutierte Bewegung ist diese Rückbewegung.

Aus diesen qualitativen Überlegungen ergeben sich auch die Randbedingungen, die an die Lösung der Differentialgleichung gestellt werden (vgl. S. 32):

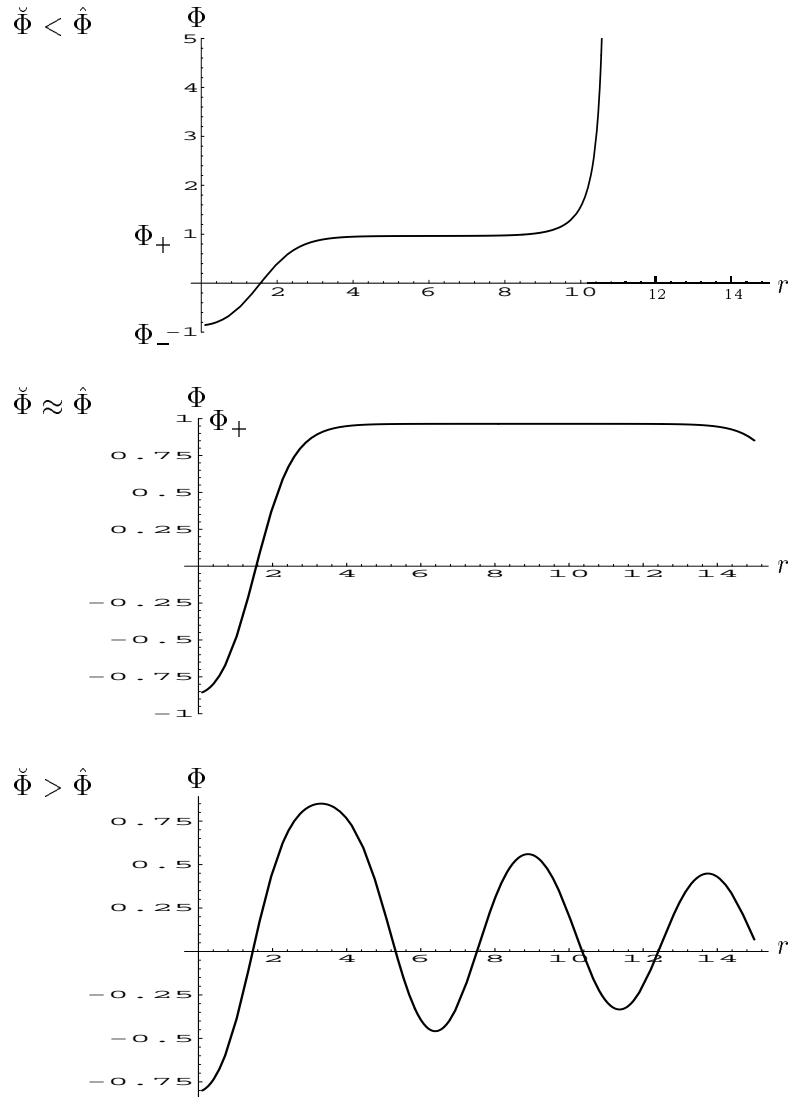


Abbildung 3.3: Verschiedene numerisch gewonnene charakteristische Lösungen der Bewegungsgleichung Gl. (3.16) für unterschiedliche Startpunkte $\hat{\Phi} = \Phi(0)$.

- Die Lösung soll für große positive Zeiten r gegen das falsche Minimum Φ_+ konvergieren:

$$\Phi(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \Phi_+ . \quad (3.20)$$

Dem entspricht im Teilchenbild, daß das Teilchen wirklich bei Φ_+ zur Ruhe kommt, und in der Nukleationstheorie heißt das, daß sich außerhalb der Blase falsches Vakuum befindet.

- Damit die dreidimensionale, rotationssymmetrische Lösung im Nullpunkt differenzierbar ist, muß die Ableitung im Nullpunkt verschwinden:

$$\Phi'(0) = 0 . \quad (3.21)$$

Das Teilchen muß am Umkehrpunkt also wirklich stillstehen.

Man hat damit zwei Randbedingungen für eine Differentialgleichung zweiter Ordnung. Um die vorliegende Differentialgleichung auch über die Thin wall approximation hinaus lösen zu können, wird hier allerdings eine Entwicklung nach η eingeführt (vgl. Abschnitt 3.2), welche gerade an den Punkten, an denen man die Randbedingungen fordert, nicht mehr konvergiert. Es wird sich zeigen, daß die entwickelte Lösung die Randbedingungen asymptotisch im Sinne einer Potenzreihenentwicklung erfüllt, man aber die Bedingung der Stationarität der Wirkung hier noch hinzunehmen muß, damit die Lösung bis zur gegebenen Ordnung eindeutig ist.

Durch Rotation der so gefundenen Kink-Lösung erhält man eine Blase aus richtigem Vakuum Φ_- innerhalb von falschem Vakuum Φ_+ mit einer dünnen Wand zwischen beiden Zuständen (daher der Name „thin wall approximation“) (vgl. Abb. 3.4).

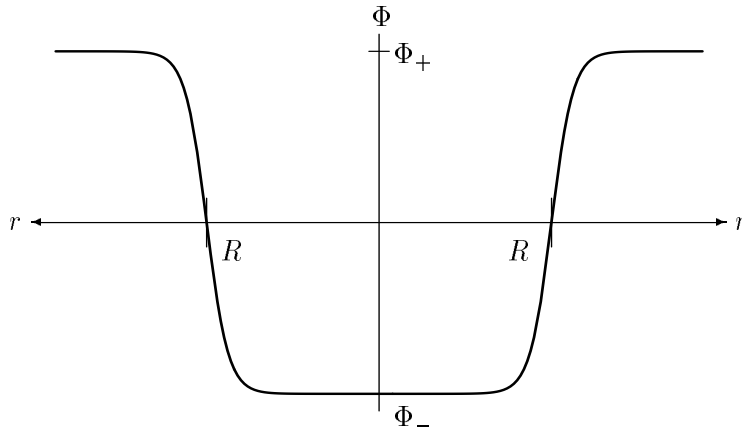


Abbildung 3.4: Ein Nukleationskeim — durch Rotation der Kinklösung entsteht eine Blase.

Der kritische Radius der Blase R wird durch den Gewinn an Volumenenergie und den Verlust an Oberflächenenergie bestimmt. Bildet sich eine Blase mit einem kleineren Radius, so ist der Gewinn an Volumenenergie kleiner als der Verlust durch Oberflächenenergie, und die Blase schrumpft zu nichts zusammen. Irgendwann wird aber eine Blase gebildet, deren Radius größer als R ist, so daß es für die Blase energetisch günstiger ist, weiter zu wachsen. Sie dehnt sich aus, bis alle verfügbare Materie in die neue Phase umgewandelt ist.

Man berechnet den kritischen Radius der Blase aus der Forderung, daß die Wirkung

$$\mathcal{S} = \int d^3x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \bar{\Phi} \partial_\mu \bar{\Phi} + U(\bar{\Phi}) \right] \quad (3.22)$$

am kritischen Radius stationär ist. Umschreiben in Kugelkoordinaten und Einsetzen des speziellen Potentials (Gl. (3.5)) ergibt:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{\Phi}}{dr} \right)^2 + U(\bar{\Phi}) \right] \\ &= 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{\Phi}}{dr} \right)^2 + U_s(\bar{\Phi}) \right] + \frac{2\pi\eta}{\alpha} \int_0^\infty r^2 dr (\bar{\Phi} - \alpha) - 4\pi \int_0^\infty r^2 dr U(\Phi_+), \end{aligned} \quad (3.23)$$

wobei der letzte Term erst in höheren Ordnungen in η Beiträge liefert.

Der zweite Term ist der Volumenterm. Er ist proportional zur Energiedifferenz η . In der Thin wall approximation ist die Lösung $\bar{\Phi}$ gegeben durch:

$$\bar{\Phi} = \begin{cases} -\alpha & : r < R - \theta/2 \\ \Phi_B & : R - \theta/2 < r < R + \theta/2 \\ \alpha & : r > R + \theta/2 \end{cases} . \quad (3.24)$$

θ ist dabei die Dicke der Blasenwand, welche als sehr viel kleiner als der Radius angenommen wird. In dieser Wand variiert die Bounce-Lösung Φ_B stark, außerhalb der Blase ($r \gg R$) nimmt sie den Wert α an und für $r \ll R$ (innerhalb der Blase) den Wert $-\alpha$. Der im zweiten Integranden stehende Ausdruck $(\Phi - \alpha)$ ist also nur innerhalb der Blase von Null verschieden, so daß näherungsweise nur über das Blaseninnere zu integrieren ist:

$$\frac{2\pi\eta}{\alpha} \int_0^R r^2 dr (-2\alpha) = -\frac{4\pi\eta R^3}{3} . \quad (3.25)$$

Dieser Term ist proportional zum Volumen einer dreidimensionalen Kugel.

Bei der Berechnung des ersten Terms der Wirkung Gl. (3.23), dem Oberflächenterm, ist nur die Blasenwand relevant, da nur hier der Ausdruck $d\Phi/dr$ wesentlich von Null verschieden ist und man das Potential und die Ableitung ineinander umrechnen kann (vgl. die Skalentransformationen auf Seite 33). Damit bekommt man für den Oberflächenterm

$$4\pi \int_{R-\theta/2}^{R+\theta/2} r^2 dr \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)^2 + U_s \right] = 4\pi R^2 \int_{-\infty}^{\infty} dr \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)^2 = 4\pi R^2 \mathcal{B} . \quad (3.26)$$

\mathcal{B} ist die eindimensionale Wirkung der Bounce-Lösung (Gl. (2.37)). Da die Wanddicke θ nach Voraussetzung viel kleiner als der Radius R ist, kann man r in der Wand durch den Wert R ersetzen. Dieser kann dann vor das Integral gezogen werden. Der Integrand verschwindet außerhalb der Wand, so daß der Integrationsbereich bei der Berechnung der eindimensionalen Wirkung \mathcal{B} ruhig wieder auf die positive oder sogar auf die ganze reelle Achse ausgedehnt werden kann. Die Vorfaktoren in Gleichung (3.26) entsprechen der Oberfläche einer dreidimensionalen Kugel.

Mit den obigen Ergebnissen schreibt sich die Wirkung in dieser einfachen Abschätzung als

$$\mathcal{S} = 4\pi R^2 \mathcal{B} - \frac{4\pi R^3}{3} \eta \quad (3.27)$$

Der kritische Radius ergibt sich daraus in der Thin wall approximation durch Variation wie folgt:

$$\frac{d\mathcal{S}}{dR} = 2 \cdot 4\pi R \mathcal{B} - 4\pi R^2 \eta = 0 \Rightarrow R = \frac{2\mathcal{B}}{\eta} . \quad (3.28)$$

Insbesondere werden die kritischen Blasen für kleines η wie erwartet sehr groß:

$$R \sim \frac{1}{\eta} . \quad (3.29)$$

Setzt man den gewonnenen Ausdruck für R wieder in die Wirkung der kritischen Blase ein, so bekommt man:

$$\mathcal{S} = \frac{16}{3}\pi \frac{\mathcal{B}^3}{\eta^2}. \quad (3.30)$$

In Abschnitt 3.3 wird gezeigt, daß dies in einer Entwicklung nach η alle Beiträge zur führenden Ordnung sind. Weitere Potenzen in η werden aber zu all diesen Ausdrücken noch hinzukommen. Daß η bei einer dünnen Wand tatsächlich klein und damit als Entwicklungsparameter geeignet ist, wird im nächsten Abschnitt gezeigt werden (Gl. (3.61)).

3.2 Berechnung der Bounce–Lösung

Die in der Literatur nur bis zur ersten Ordnung in η bekannte Bounce–Lösung, das ist die Lösung der Euler–Lagrange–Gleichung (Gl. (3.16))

$$\begin{aligned} -\frac{d^2\Phi}{d\bar{x}^2} + U'(\Phi) &= 0 \\ \Leftrightarrow -\frac{d^2\Phi}{dr^2} - \frac{2}{r}\frac{d\Phi}{dr} + \frac{\kappa}{2}\Phi(\Phi^2 - \alpha^2) + \frac{\eta}{2\alpha} &= 0, \end{aligned} \quad (3.31)$$

soll zu den im letzten Abschnitt gegebenen Randbedingungen (Gl. (3.20), Gl. (3.21))

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Phi = \Phi_+ \quad \text{und} \quad (3.32)$$

$$\Phi'(0) = 0 \quad (3.33)$$

in diesem Abschnitt störungstheoretisch bis zur zweiten Ordnung berechnet werden. Zur Abkürzung faßt man die dimensionsbehafteten Größen zusammen zu

$$\beta = \frac{\sqrt{\kappa}\alpha}{2} \quad (3.34)$$

und dividiert die Euler–Lagrange–Gleichung durch $\beta^2\alpha$

$$-\frac{1}{\beta^2}\frac{d^2(\Phi/\alpha)}{dr^2} - \frac{2}{\beta r}\frac{1}{\beta}\frac{d(\Phi/\alpha)}{dr} + 2\frac{\Phi}{\alpha}\left(\left(\frac{\Phi}{\alpha}\right)^2 - 1\right) + \frac{4}{3}\tilde{\eta} = 0. \quad (3.35)$$

Dabei wurde noch ein dimensionsloser Parameter $\tilde{\eta}$ definiert:

$$\tilde{\eta} := \frac{3}{8\alpha^2\beta^2}\eta = \frac{3}{2\alpha^4\kappa}\eta = \frac{\hat{g}_0}{2m_0^4}\eta. \quad (3.36)$$

Da die Bounce–Lösung um den Radius R herum zentriert ist, schreibt man nun die Bewegungsgleichung Gl. (3.35) auf die dimensionslose Variable

$$\xi := \beta r - \beta R = \tilde{r} - \tilde{R} \quad (3.37)$$

um. Mit dem dimensionslosen Feld

$$\tilde{\Phi}(\xi) = \frac{1}{\alpha}\Phi(\beta r - \beta R) \quad (3.38)$$

wird die Euler–Lagrange–Gleichung dann zu

$$-\frac{d^2\tilde{\Phi}}{d\xi^2} - \frac{2}{\xi + \tilde{R}} \frac{d\tilde{\Phi}}{d\xi} + 2\tilde{\Phi}(\tilde{\Phi}^2 - 1) + \frac{4}{3}\tilde{\eta} = 0. \quad (3.39)$$

Für den dimensionslosen Radius $\tilde{R} = \beta R$ der Blase setzt man aufgrund des Resultats Gl. (3.29) folgende Laurent–Reihe in $\tilde{\eta}$ an:

$$\tilde{R} = \frac{a_{-1}}{\tilde{\eta}} + a_0 + \tilde{\eta}a_1 + \tilde{\eta}^2a_2 + \cdots = \sum_{i=-1}^{\infty} a_i\tilde{\eta}^i \quad (3.40)$$

und entwickelt in der Euler–Lagrange–Gleichung den Faktor vor der ersten Ableitung nach Potenzen von $\tilde{\eta}$:

$$\frac{1}{\xi + \tilde{R}} = \frac{1}{\xi + \sum_{i=-1}^{\infty} a_i\tilde{\eta}^i} = \frac{\tilde{\eta}}{a_{-1}} - \frac{\xi + a_0}{a_{-1}^2} \tilde{\eta}^2 + \frac{(\xi + a_0)^2 - a_1a_{-1}}{a_{-1}^3} \tilde{\eta}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (3.41)$$

Die so entstehende Differentialgleichung

$$-\frac{d^2\tilde{\Phi}}{d\xi^2} - \frac{2}{a_{-1}}\tilde{\eta}\frac{d\tilde{\Phi}}{d\xi} + \frac{2(\xi + a_0)}{a_{-1}^2}\tilde{\eta}^2\frac{d\tilde{\Phi}}{d\xi} + 2\tilde{\Phi}(\tilde{\Phi}^2 - 1) + \frac{4}{3}\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) = 0 \quad (3.42)$$

löst man nun störungstheoretisch bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ durch einen Potenzreihenansatz für die Bounce–Lösung

$$\tilde{\Phi} = \tilde{\Phi}_0 + \tilde{\eta}\tilde{\Phi}_1 + \tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3). \quad (3.43)$$

Eingesetzt liefert das:

$$\begin{aligned} -\tilde{\Phi}_0'' - \tilde{\eta}\tilde{\Phi}_1'' - \tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_2'' - \frac{2}{a_{-1}}\tilde{\eta}\tilde{\Phi}_0' - \frac{2}{a_{-1}}\tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_1' + \frac{2\xi}{a_{-1}^2}\tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_0' + \frac{2a_0}{a_{-1}^2}\tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_0' + \\ + 2(\tilde{\Phi}_0^3 + 3\tilde{\eta}\tilde{\Phi}_0^2\tilde{\Phi}_1 + 3\tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1^2 + 3\tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_0^2\tilde{\Phi}_2 - \tilde{\Phi}_0 - \tilde{\eta}\tilde{\Phi}_1 - \tilde{\eta}^2\tilde{\Phi}_2) + \\ + \frac{4}{3}\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) = 0. \end{aligned} \quad (3.44)$$

In nullter Ordnung in $\tilde{\eta}$ hat man also die Gleichung

$$-\tilde{\Phi}_0'' + 2(\tilde{\Phi}_0^3 - \tilde{\Phi}_0) = 0 \quad (3.45)$$

zu lösen. Dies entspricht aber der Soliton–Gleichung, und die Lösung lautet (vgl. Gl. (2.36))

$$\tilde{\Phi}_0(\xi) = + \tanh(\xi). \quad (3.46)$$

Dabei ist das Vorzeichen gemäß den Randbedingungen so zu bestimmen, daß das System außerhalb der Blase ($r \gg R$) im falschen Vakuum ist:

$$\tilde{\Phi}_0(\infty) \stackrel{!}{=} +\alpha \quad \text{bzw.} \quad (3.47)$$

$$\tilde{\Phi}_0(\infty) \stackrel{!}{=} +1. \quad (3.48)$$

Setzt man nun die Lösung für $\tilde{\Phi}_0$ in Gleichung (3.44) ein, so erhält man die Differentialgleichung für die erste Ordnung in $\tilde{\eta}$:

$$-\tilde{\Phi}_1'' + (-6 \operatorname{sech}^2 \xi + 4)\tilde{\Phi}_1 = \frac{2}{a_{-1}} \operatorname{sech}^2 \xi - \frac{4}{3}. \quad (3.49)$$

Die durch den Index H gekennzeichneten Lösungen der zugehörigen homogenen Differentialgleichung

$$-\frac{d^2}{d\xi^2}\tilde{\Phi}_1 - (6 \operatorname{sech}^2 \xi - 4)\tilde{\Phi}_1 = 0 \quad (3.50)$$

lassen sich aus der unter Nummer 2.420 bei Kamke [56] angegebenen Differentialgleichung für $n = 3$ mit der Substitution

$$x \rightarrow i\xi \quad (3.51)$$

herleiten:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{1,H_1}(\xi) &= A_1 e^{2\xi}[2 \tanh \xi - 1 - \tanh^2 \xi] \quad \text{und} \\ \tilde{\Phi}_{1,H_2}(\xi) &= A_2 e^{-2\xi}[-2 \tanh \xi - 1 - \tanh^2 \xi]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Die beiden hier angegebenen Lösungen sind aber nicht linear unabhängig. Eine weitere, dazu äquivalente Lösung erhält man aus der Linearkombination für $A_1 = A_2 = C_1/2$, nämlich

$$\tilde{\Phi}_{1,H_3}(\xi) = -C_1 \operatorname{sech}^2 \xi. \quad (3.53)$$

Dies entspricht der Eigenfunktion zum Eigenwert 0 der später zu lösenden Schrödingergleichung (vgl. Gl. (4.209)).

Eine zweite, linear unabhängige, homogene Lösung findet man mittels Variation der Konstanten als:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{1,H_4}(\xi) &\sim C_2 \frac{12\xi + 8 \sinh(2\xi) + \sinh(4\xi)}{\cosh^2 \xi} \\ &\sim C_2 \left(\frac{3}{2}\xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{3}{2}\tanh \xi + \sinh \xi \cosh \xi \right). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Setzt man die spezielle Lösung der Differentialgleichung der ersten Ordnung in $\tilde{\eta}$ (Gl. (3.49)) als konstant an, so lassen sich eine spezielle Lösung $\tilde{\Phi}_{1,S}$ und der Parameter a_{-1} durch Koeffizientenvergleich berechnen. Aus den beiden Gleichungen

$$4\tilde{\Phi}_{1,S} = -\frac{4}{3} \quad \text{und} \quad (3.55)$$

$$-6\tilde{\Phi}_{1,S} = \frac{2}{a_{-1}} \quad (3.56)$$

folgt

$$\tilde{\Phi}_{1,S}(\xi) = -\frac{1}{3} \quad \text{und} \quad (3.57)$$

$$a_{-1} = 1. \quad (3.58)$$

Für die führende Ordnung des dimensionslosen Radius erhält man mit dem berechneten Parameter a_{-1}

$$\tilde{R} = \frac{a_{-1}}{\tilde{\eta}} = \frac{1}{\tilde{\eta}} = \frac{2}{3} \frac{\alpha^4 \kappa}{\eta} = \frac{2m_0^4}{\hat{g}_0} \frac{1}{\eta}. \quad (3.59)$$

In der Thin wall approximation soll dieser Radius nun wesentlich größer sein als die Wand der Blase dick ist. Die Dicke der Wand θ , also den Bereich, in dem die Ableitung von Φ wesentlich von Null verschieden ist, liest man an der Bounce-Lösung ab als

$$\theta = 2\frac{1}{\beta} = \frac{4}{\sqrt{\kappa}\alpha} = \frac{4}{m_0}. \quad (3.60)$$

Für das Verhältnis aus Dicke und Radius ergibt sich damit:

$$\frac{\theta}{R} = \frac{2}{\beta} \frac{3\beta\eta}{2\alpha^4\kappa} = 2\tilde{\eta}. \quad (3.61)$$

Die Voraussetzung für die Anwendbarkeit der Thin wall approximation ist, daß das Verhältnis θ/R sehr klein ist, etwa von der Größenordnung $1/5$ oder $1/10$. Dies bedeutet aber, daß, wie man an Gleichung (3.61) sieht, $\tilde{\eta}$ sehr klein ist und daß in der Entwicklung höhere Potenzen in $\tilde{\eta}$ vernachlässigt werden können.

Aus den obigen Verhältnissen ergeben sich typische $\tilde{\eta}$ -Werte von $\tilde{\eta} = 0.1$ oder $\tilde{\eta} = 0.05$.

Mit den erhaltenen Ergebnissen ist die allgemeine Bounce-Lösung in der ersten Ordnung in $\tilde{\eta}$ also gegeben durch

$$\tilde{\Phi}_1(\xi) = \left[-C_1 \operatorname{sech}^2 \xi + C_2 \left(\frac{3}{2} \xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{3}{2} \tanh \xi + \sinh \xi \cosh \xi \right) - \frac{1}{3} \right]. \quad (3.62)$$

Die einzelnen Terme dieser Ordnung haben folgende Bedeutung:

- Der konstante Term entspricht der Verschiebung des Minimums. Dies sieht man, wenn man die dimensionslosen Minima analog zu Gleichung (3.11) nach $\tilde{\eta}$ entwickelt:

$$\tilde{\Phi}_{\pm} = \pm 1 - \frac{\tilde{\eta}}{3} \mp \frac{\tilde{\eta}^2}{6} - \frac{4\tilde{\eta}^3}{27} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (3.63)$$

Dieser Term wird gebraucht, damit die Bounce-Lösung wieder einen Übergang von einem Minimum ins andere beschreibt.

- Der Term proportional zu C_2 divergiert für große ξ und darf aufgrund der Randbedingungen (Endlichkeit für große $|\xi|$) nicht zur Lösung beitragen. C_2 muß also gleich Null sein.
- $\operatorname{sech}^2 \xi$ schließlich entspricht der Ableitung der nullten Ordnung der Bounce-Lösung und hängt mit den Translationen der Bounce-Lösung zusammen (vgl. die Betrachtungen zur Nullmode, Abschnitt 2.5.1). Dabei beschreibt C_1 einen Translationsfreiheitsgrad. Um das zu sehen, entwickelt man die Funktion

$$f(\xi, \tilde{\eta}) = \tanh(\xi - C_1 \tilde{\eta}) \quad (3.64)$$

um $\tilde{\eta} = 0$ in eine Taylorreihe:

$$f(\xi, \tilde{\eta}) = \tanh \xi - C_1 \tilde{\eta} \operatorname{sech}^2 \xi - C_1^2 \tilde{\eta}^2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3). \quad (3.65)$$

C_1 entspricht also dem Parameter a_1 in dem Ansatz für den Radius Gl. (3.40). Durch diesen Ansatz ist die homogene, zu C_1 proportionale Lösung also bereits berücksichtigt und muß im folgenden nicht explizit aufgeführt werden.

Es bleibt also für $\tilde{\Phi}_1$:

$$\tilde{\Phi}_1 = -\frac{1}{3}. \quad (3.66)$$

Schreibt man (das dimensionsbehaftete) $\tilde{\Phi}$ als Potenzreihe in η statt in der dimensionslosen Größe $\tilde{\eta}$, so sieht man, daß die Lösung erster Ordnung, die dann

$$\Phi_{1,S}(r) = -\frac{1}{2\alpha^3\kappa} \quad (3.67)$$

lautet, identisch ist mit der bei Langer [15] im Anhang D angegebenen Lösung.

Die Differentialgleichung in quadratischer Ordnung in $\tilde{\eta}$ ergibt sich mit den bereits gefundenen Lösungen $\tilde{\Phi}_0$ (Gl. (3.46)) und $\tilde{\Phi}_1$ (Gl. (3.66)) und dem Wert für a_{-1} (Gl. (3.58)) zu

$$\begin{aligned} -\tilde{\Phi}_2'' + (6\tilde{\Phi}_0^2 - 2)\tilde{\Phi}_2 &= 2\tilde{\Phi}_1' - 2\xi\tilde{\Phi}_0' - 2a_0\tilde{\Phi}_0' - 6\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1^2 \\ \Leftrightarrow -\tilde{\Phi}_2'' + (6 \tanh^2 \xi - 2)\tilde{\Phi}_2 &= -2\xi \operatorname{sech}^2 \xi - 2a_0 \operatorname{sech}^2 \xi - \frac{2}{3} \tanh \xi. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Die zugehörige homogene Gleichung entspricht Gleichung (3.50) und hat die konvergente, symmetrische Lösung

$$\tilde{\Phi}_{2,H_1}(\xi) = -D_1 \operatorname{sech}^2 \xi \quad (3.69)$$

und die divergierende, antisymmetrische Lösung

$$\tilde{\Phi}_{2,H_2}(\xi) = D_2 \left(\frac{3}{2} \xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{3}{2} \tanh \xi + \sinh \xi \cosh \xi \right). \quad (3.70)$$

Die Inhomogenitäten werden nacheinander behandelt. Variation der Konstanten führt in jedem der Fälle auf eine inhomogene Differentialgleichung erster Ordnung in der Ableitung der variierten Konstante, deren spezielle Lösung sich durch nochmalige Variation der Konstanten finden läßt. So lautet z.B. die spezielle Lösung zur Inhomogenität $-2\xi \operatorname{sech}^2 \xi$

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{2,S_1}(\xi) &= \xi \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3} \cosh^2 \xi - \frac{5}{12} \operatorname{sech}^2 \xi \right) - \\ &\quad - \log \cosh \xi \left[\frac{1}{2} \xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{1}{2} \tanh \xi + \frac{1}{3} \sinh \xi \cosh \xi \right] + \\ &\quad + \frac{1}{12} \tanh \xi + \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 \xi T(\xi). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Mit $T(\xi)$ ist dabei die Stammfunktion von $\xi \tanh \xi$ gemeint:

$$T(\xi) = \int_0^\xi \xi' \tanh \xi' d\xi'. \quad (3.72)$$

Zur Inhomogenität $-\frac{2}{3} \tanh \xi$ lautet die Lösung

$$\tilde{\Phi}_{2,S_2}(\xi) = \frac{1}{9} \sinh \xi \cosh \xi, \quad (3.73)$$

und für den a_0 -abhängigen Term $-2a_0 \operatorname{sech}^2 \xi$ lautet die Lösung

$$\tilde{\Phi}_{2,S_3}(\xi) = a_0 + \frac{a_0}{3} \tanh^2 \xi \sinh^2 \xi. \quad (3.74)$$

Die der Translation entsprechende homogene Lösung für $\tilde{\Phi}_1$, nämlich $-C_1 \operatorname{sech}^2 \xi$, würde in der Differentialgleichung für die zweite Ordnung Gl. (3.68) weitere Inhomogenitäten liefern. Der Term $2\tilde{\Phi}'_1$ führt auf den Ausdruck

$$4C_1 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi, \quad (3.75)$$

der sich aber gegen den gemischten Term aus $-6\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_2^2$ weghebt. Die einzige verbleibende C_1 -Abhängigkeit wäre der in C_1 quadratische Term aus $-6\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1^2$, nämlich

$$-6C_1^2 \operatorname{sech}^5 \xi \sinh \xi \quad (3.76)$$

mit der Lösung

$$\tilde{\Phi}_{2,S_4}(\xi) = -C_1^2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi. \quad (3.77)$$

Dies ist aber genau der dritte Term in der Entwicklung Gl. (3.65). An dieser Stelle zeigt sich noch einmal deutlich die Äquivalenz der beiden Ansätze Gl. (3.40) und Gl. (3.65) und die Austauschbarkeit der Konstanten a_1 und C_1 .

Die allgemeine Lösung der inhomogenen Differentialgleichung in der zweiten Ordnung lautet also:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_2(\xi) = & -D_1 \operatorname{sech}^2 \xi + D_2 \left(\frac{3}{2} \xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{3}{2} \tanh \xi + \sinh \xi \cosh \xi \right) + \\ & + \xi \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3} \cosh^2 \xi - \frac{5}{12} \operatorname{sech}^2 \xi \right) - \\ & - \log \cosh \xi \left[\frac{1}{2} \xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{1}{2} \tanh \xi + \frac{1}{3} \sinh \xi \cosh \xi \right] + \frac{1}{12} \tanh \xi + \\ & + \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 \xi T(\xi) + \frac{1}{9} \sinh \xi \cosh \xi + a_0 \left(1 + \frac{1}{3} \tanh^2 \xi \sinh^2 \xi \right). \end{aligned} \quad (3.78)$$

Die konvergente homogene Lösung $-D_1 \operatorname{sech}^2 \xi$ hängt wieder mit der Translationsfreiheit der Bounce-Lösung zusammen. D_1 entspricht dem Parameter a_2 aus Ansatz (3.40). Dies sieht man in einer zu Gleichung (3.65) analogen Taylorentwicklung:

$$\begin{aligned} \tanh(\xi - C_1 \tilde{\eta} - D_1 \tilde{\eta}^2) = \\ \tanh \xi - C_1 \tilde{\eta} \operatorname{sech}^2 \xi - C_1^2 \tilde{\eta}^2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi - D_1 \tilde{\eta}^2 \operatorname{sech}^2 \xi + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3). \end{aligned} \quad (3.79)$$

Im folgenden wird also auch diese homogene Lösung weggelassen und der verbleibenden Freiheit durch die Größe a_2 im Ansatz für den Radius Gl. (3.40) Rechnung getragen.

Die Lösung muß nun noch an die Randbedingungen angepaßt werden. Insbesondere muß die Lösung also für große ξ (gegen das instabile Minimum) konvergieren. Um die Asymptotik besser einzusehen, schreibt man $\log \cosh \xi$ als

$$\log \cosh \xi = \log \left(\frac{1}{2} (e^\xi + e^{-\xi}) \right) = -\log 2 + \xi + \log(1 + e^{-2\xi}). \quad (3.80)$$

Damit findet man die folgenden Divergenzen in der Lösung $\tilde{\Phi}_2$ (Gl. (3.78)):

$$D_2 \sinh \xi \cosh \xi + \frac{1}{3} \log 2 \sinh \xi \cosh \xi + \frac{1}{9} \sinh \xi \cosh \xi + \frac{a_0}{3} \tanh^2 \xi \sinh^2 \xi. \quad (3.81)$$

Die Summe der anderen Terme ist konvergent. Durch Addition eines geeigneten Vielfachen der divergierenden homogenen Lösung kann man die ersten drei Divergenzen beseitigen. Dazu wählt man

$$D_2 = -\frac{1}{9} - \frac{1}{3} \log 2. \quad (3.82)$$

Der letzte Term proportional zu a_0 ist symmetrisch in ξ , während die divergierende homogene Lösung antisymmetrisch ist. Damit lassen sich die Randbedingung der Konvergenz bei großem ξ und die verschwindende Steigung im Punkt $\tilde{r} = 0$ für $a_0 \neq 0$ nicht gleichzeitig erfüllen. Hieraus bestimmt sich die Konstante a_0 der Entwicklung Gl. (3.40) zu Null. Dies wird bei der Berechnung der Wirkung bestätigt werden (vgl. Seite 61).

Die gesuchte Lösung kann damit in eine Form gebracht werden, der man die Konvergenz für große ξ ansieht:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_2(\xi) = & -\frac{\xi}{2}(\tanh \xi - 1) + \frac{\xi}{6}(\cosh \xi - \sinh \xi)^2 - \frac{1}{2}\xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi - \frac{7}{12}\xi \operatorname{sech}^2 \xi - \\ & - \log(1 + e^{-2\xi}) \left(\frac{1}{2}\xi \operatorname{sech}^2 \xi + \frac{1}{2} \tanh \xi \right) - \frac{1}{3} \log(1 + e^{-2\xi}) \sinh \xi \cosh \xi - \\ & - \frac{1}{12} \tanh \xi + \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 \xi T(\xi). \end{aligned} \quad (3.83)$$

Mit der Regel von de l'Hospital zeigt man:

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} -\frac{1}{3} \log(1 + e^{-2\xi}) \sinh \xi \cosh \xi = -\frac{1}{3} \cdot \frac{1}{4} = -\frac{1}{12}, \quad (3.84)$$

ebenso:

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 \xi T(\xi) = 0, \quad (3.85)$$

womit sich dann als Grenzwert von $\tilde{\Phi}_2$ für große ξ

$$\tilde{\Phi}_2 \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} -\frac{1}{12} - \frac{1}{12} = -\frac{1}{6} \quad (3.86)$$

ergibt, was dem Term dieser Ordnung in dem instabilen Minimum entspricht (vgl. Gl. (3.63)). Damit ist die erste Randbedingung erfüllt.

Bei $\tilde{\Phi}_0$ wird diese Randbedingung durch Konstruktion erfüllt, die spezielle Lösung von $\tilde{\Phi}_1$ entspricht der Verschiebung des Minimums und erfüllt damit ebenfalls die Randbedingung. Auch bei $\tilde{\Phi}_2$ treten Terme auf, die der Verschiebung des Minimums entsprechen, und Terme, welche die Translation beschreiben (proportional zu C_1 und D_1). Darüber hinaus gibt es hier aber auch Terme, die echte Deformationen der Blase beschreiben.

Nun betrachtet man noch die zweite Randbedingung, nämlich das Verhalten der Steigung am Ursprung ($\tilde{r} = 0$ bzw. $\xi = -\tilde{R}$). Für $\tilde{\Phi}'_0(\xi) = \operatorname{sech}^2 \xi$ findet man für $\xi = -\tilde{R} = -\frac{1}{\tilde{\eta}} + \mathcal{O}(\tilde{\eta})$ als führenden Term

$$\tilde{\Phi}'_0(-\tilde{R}) = e^{-\frac{2}{\tilde{\eta}}}(4 + \mathcal{O}(\tilde{\eta})). \quad (3.87)$$

Da $\tilde{\eta}$ auf positive Werte beschränkt ist, kann man diesen Ausdruck entwickeln, und die geforderte Randbedingung ist im Sinne einer Potenzreihenentwicklung erfüllt.

$\tilde{\Phi}'_1$ ist überall identisch gleich Null, da $\tilde{\Phi}_1$ konstant ist, und erfüllt damit ebenfalls die Randbedingung.

Für die Ableitung von $\tilde{\Phi}_2$ findet man

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}'_2(\xi) &= \frac{1}{6} \tanh^2 \xi - \frac{\log 2}{3} (\cosh^2 \xi + \sinh^2 \xi) - \log 2 \operatorname{sech}^2 \xi + \\ &+ \xi \left[\frac{2}{3} \cosh \xi \sinh \xi + \left(\frac{7}{6} + \log 2 \right) \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi \right] - \\ &- \log \cosh \xi \left[\operatorname{sech}^2 \xi - \xi \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi + \frac{1}{3} (\sinh^2 \xi + \cosh^2 \xi) \right] - \\ &- \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi T(\xi) .\end{aligned}\quad (3.88)$$

Umschreiben von $\log \cosh \xi$ als

$$\log \cosh \xi = -\log 2 - \xi + \log(e^{2\xi} + 1) \quad (3.89)$$

liefert die Form

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}'_2(\xi) &= \frac{1}{6} \tanh^2 \xi + \frac{\xi}{3} (\sinh \xi + \cosh \xi)^2 + \\ &+ \frac{7}{6} \xi \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi + \xi \operatorname{sech}^2 \xi - \xi^2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi - \\ &- \log(e^{2\xi} + 1) [\operatorname{sech}^2 \xi - \xi \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi] - \\ &- \frac{1}{3} \log(e^{2\xi} + 1) (\sinh^2 \xi + \cosh^2 \xi) - \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi T(\xi) .\end{aligned}\quad (3.90)$$

Die Grenzwerte der beiden letzten Terme am Ursprung ($\xi = -\tilde{R}$) findet man wieder mit der Regel von de l'Hospital:

$$\lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \log(e^{2\xi} + 1) (\sinh^2 \xi + \cosh^2 \xi) = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad (3.91)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi T(\xi) = 0 . \quad (3.92)$$

Insgesamt findet man also auch für $\tilde{\Phi}_2$ die gesuchte asymptotische Steigung am Ursprung:

$$\tilde{\Phi}'_2(\xi = -\tilde{R}) = \frac{1}{6} - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} = 0 . \quad (3.93)$$

Um zu wissen, wie die Ableitung gegen Null geht, schaut man sich auch hier wieder die führenden Ausdrücke der einzelnen Terme an. Man findet Vielfache von $e^{4\xi}$, $\xi e^{2\xi}$, $\xi e^{4\xi}$ und $\xi^2 e^{2\xi}$, welche für positives $\tilde{\eta}$ wieder die Randbedingung im Sinne einer Potenzreihenentwicklung erfüllen.

In Abbildung 3.5 ist die zweite Ordnung der Bounce-Lösung als Funktion von ξ gezeichnet.

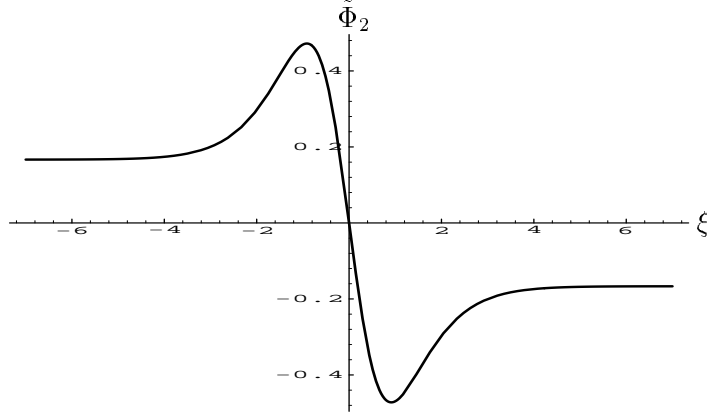


Abbildung 3.5: Die Korrekturen $\tilde{\Phi}_2$ zur Bounce-Lösung in quadratische Ordnung in $\tilde{\eta}$.

Im Gegensatz zu den Differentialgleichungen nullter und erster Ordnung in $\tilde{\eta}$ ist die Differentialgleichung zweiter Ordnung nicht mehr translationsinvariant, d.h. daß eine Verschiebung des Arguments ($\tilde{R} \neq 0$) die Form der Lösung nicht invariant läßt. Diese Translation äußert sich, wenn man die Bounce-Lösung analog zu Gleichung (3.79) taylorentwickelt, in zusätzlichen Inhomogenitäten. Das Verschwinden des Koeffizienten a_0 entspricht der Translationsinvarianz von $\tilde{\Phi}_1$. Die weiteren Koeffizienten lassen sich nicht aus den Randbedingungen bestimmen, da diese nur asymptotisch erfüllt sind. Man müßte auch hier jeweils die beiden nächsthöheren Ordnungen der Bounce-Lösung kennen.

Die hier noch unbestimmten Konstanten a_1 und a_2 lassen sich aber durch Variation der Wirkung analog der Rechnung auf Seite 45 bestimmen. Dies soll im nächsten Abschnitt geschehen.

3.3 Berechnung der Wirkung der Bounce-Lösung und des kritischen Radius

In diesem Abschnitt soll die Wirkung \mathcal{S} der Bounce-Lösung nach Gleichung (3.23)

$$\mathcal{S} = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\bar{\Phi}}{dr} \right)^2 + U_s \right] + \frac{2\pi\eta}{\alpha} \int_0^\infty dr r^2 (\bar{\Phi} - \alpha) - 4\pi \int_0^\infty dr r^2 U(\Phi_+) \quad (3.94)$$

bis zur zweiten Ordnung in η berechnet werden. Umschreiben auf dimensionslose Größen liefert den Ausdruck

$$\mathcal{S} = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left[\left(\frac{d\tilde{\Phi}(\xi)}{d\tilde{r}} \right)^2 + [(\tilde{\Phi}^2(\xi) - 1)^2 - (\tilde{\Phi}_+^2 - 1)^2] \right] + 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left[\frac{8}{3} \tilde{\eta} (\tilde{\Phi}(\xi) - \tilde{\Phi}_+) \right]. \quad (3.95)$$

$\tilde{r} = \beta r$ ist dabei eine dimensionslose Variable, vgl. Gl. (3.37).

Die vorkommenden Integrale sind von der Form

$$\int_0^\infty \tilde{r}^2 f(\tilde{r} - \tilde{R}) d\tilde{r}. \quad (3.96)$$

$f(\tilde{r} - \tilde{R})$ ist eine um $\tilde{r} = \tilde{R}$ zentrierte Funktion, die für große $\xi = \tilde{r} - \tilde{R}$ aufgrund der Wahl des Nullpunkts von U gegen Null geht. Wegen des Faktors \tilde{r}^2 verschwinden die Randterme bei partieller Integration auch an der unteren Grenze, und man bekommt

$$\int_0^\infty \tilde{r}^2 f(\tilde{r} - \tilde{R}) d\tilde{r} = -\frac{1}{3} \int_0^\infty \tilde{r}^3 f'(\tilde{r} - \tilde{R}) d\tilde{r}. \quad (3.97)$$

Nun wird das Argument der Funktion $\tilde{r} - \tilde{R} = \xi$ substituiert und der Integrationsbereich auf die ganze reelle Achse ausgedehnt. Der dabei gemachte Fehler entspricht dem Abfall der Funktion, geht also exponentiell wie $e^{-\text{const}/\tilde{\eta}}$. Man erhält:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \tilde{r}^2 dr f(\tilde{r} - \tilde{R}) &= -\frac{1}{3} \int_{-\tilde{R}}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^3 f'(\xi) \approx \\ &\approx -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^3 f'(\xi) - \tilde{R} \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^2 f'(\xi) - \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi f'(\xi) - \frac{1}{3} \tilde{R}^3 \int_{-\infty}^\infty d\xi f'(\xi). \end{aligned} \quad (3.98)$$

Die einzelnen Beiträge lassen sich je nach resultierender \tilde{R} -Potenz in Volumenterme, Oberflächenterme, lineare und konstante Terme aufteilen. Für eine gerade Funktion $f(\xi)$ ist die Ableitung ungerade und der zweite und der letzte Term in Gleichung (3.98) verschwinden. Übrig bleibt ein Term proportional zu \tilde{R}^2 (Oberflächenterm):

$$-\tilde{R}^2 \int_{-\infty}^\infty \xi f'(\xi) d\xi = \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^\infty f(\xi) d\xi =: \tilde{R}^2 O \quad (3.99)$$

und ein konstanter Term:

$$-\frac{1}{3} \int_{-\infty}^\infty \xi^3 f'(\xi) d\xi = \int_{-\infty}^\infty \xi^2 f(\xi) d\xi =: P. \quad (3.100)$$

Da $f(\xi)$ gemäß der Fallunterscheidung eine gerade Funktion ist, verschwinden auch bei dieser partiellen Integration die Randterme wieder. Die rechte Form der Integrale ist genau das Zweifache der im Anhang C angegebenen Integrale.

Wenn dagegen die Ableitung $f'(\xi)$ eine gerade Funktion ist, wird aus dem zweiten Term ein in \tilde{R} linearer Term

$$-\tilde{R} \int_{-\infty}^\infty \xi^2 f'(\xi) d\xi =: \tilde{R} L, \quad (3.101)$$

und der letzte Term wird zu einem Volumenterm proportional zu \tilde{R}^3

$$-\frac{1}{3} \tilde{R}^3 \int_{-\infty}^\infty f'(\xi) d\xi = \frac{1}{3} \tilde{R}^3 f(-\infty) := \tilde{R}^3 v. \quad (3.102)$$

An der oberen Grenze verschwindet der letzte Integrand. Die anderen beiden Integrale liefern keinen Beitrag.

Um nun die Parität der Ableitung $f'(\xi)$ abzuschätzen, betrachtet man zuerst die Koeffizientenfunktionen der Bounce-Lösung $\tilde{\Phi}_i$. Für gerades i sind dies ungerade Funktionen:

$$\tilde{\Phi}_i(-\xi) = -\tilde{\Phi}_i(\xi), \quad i \text{ gerade} \quad (3.103)$$

und umgekehrt:

$$\tilde{\Phi}_j(-\xi) = \tilde{\Phi}_j(\xi), \quad j \text{ ungerade.} \quad (3.104)$$

Bei den ersten drei, im letzten Abschnitt explizit ausgerechneten Funktionen kann man diese Parität direkt ablesen. Für die weiteren Koeffizientenfunktionen zeigt man obigen Zusammenhang durch vollständige Induktion. Um im Induktionsschritt von $\tilde{\Phi}_{i-1}$ auf $\tilde{\Phi}_i$ zu schließen, betrachtet man alle Terme der i -ten Ordnung in $\tilde{\eta}$ in der Differentialgleichung Gl. (3.44): Nach Induktionsvoraussetzung ist die Parität der Terme $-2\tilde{\Phi}'_{i-1}$ und $\xi\tilde{\Phi}'_{i-2}$ und von einigen Termen aus dem $\tilde{\Phi}^3$ -Ausdruck bekannt und in allen diesen Termen dieselbe. Eine mögliche konsistente Lösung besteht nun darin, daß die anderen in der Gleichung vorkommenden Terme, nämlich $\tilde{\Phi}_i$, $\tilde{\Phi}_i''$ und die restlichen Terme aus dem $\tilde{\Phi}^3$ -Ausdruck auch eben diese Parität haben. Um die Parität des $\tilde{\Phi}^3$ -Terms festzustellen, überlegt man sich, daß hier alle möglichen Kombinationen aus drei Koeffizientenfunktionen vorkommen, so daß die Summe der Indizes die Ordnung in $\tilde{\eta}$ ergibt. Man findet also, daß mit der obigen Vermutung dieser Term in gerader Ordnung in $\tilde{\eta}$ eine ungerade Funktion ist und umgekehrt. Er hat damit dieselbe Parität wie die bekannten Terme. Da außerdem die Ableitung von $\tilde{\Phi}_{i-1}$ vorkommt, ergibt sich für den $\tilde{\Phi}_i$ -Term und dessen zweite Ableitung $\tilde{\Phi}_i''$ also gerade die andere Parität als für $\tilde{\Phi}_{i-1}$, nämlich wie oben angegeben.

Es existiert also eine Lösung der Differentialgleichung mit der in Gleichung (3.103) und Gleichung (3.104) erwähnten Parität. Diese Lösung ist eindeutig, wenn man noch die Randbedingungen hinzunimmt: Die Bounce-Lösung beschreibt einen Übergang von einem Minimum ins andere. Die Koeffizienten vor geraden $\tilde{\eta}$ -Potenzen in der Entwicklung der Minima haben aber je nach Minimum ein unterschiedliches Vorzeichen, vgl. Gl. (3.63),

$$\tilde{\Phi}_{\pm} = \pm 1 - \frac{\tilde{\eta}}{3} \mp \frac{\tilde{\eta}^2}{6} - \frac{4\tilde{\eta}^3}{27} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (3.105)$$

Daß dies auch in den höheren Ordnungen gültig ist, kann man zeigen, wenn man den Ausdruck für $\tilde{\Phi}_{\pm}$ in die Ableitung des Potentials einsetzt:

$$\left. \frac{dU}{d\tilde{\Phi}} \right|_{\tilde{\Phi}_{\pm}} = 0 \quad (3.106)$$

und nach Potenzen von $\tilde{\eta}$ sortiert.

Eine gerade Funktion geht nun für große positive und negative Argumente gegen denselben Wert, während sich die asymptotischen Werte bei ungeraden Funktionen im Vorzeichen unterscheiden. Dies wird konsistent durch die Koeffizienten in der Entwicklung für die Minima widerspiegelt: Sie wechseln in gerader Ordnung in $\tilde{\eta}$, wo die Koeffizientenfunktionen $\tilde{\Phi}_i$ ungerade sind, ihr Vorzeichen.

Die Ableitungen $\tilde{\Phi}'_i$ zeigen genau die andere Parität.

Damit lassen sich die Paritäten der einzelnen Terme des Integranden

$$\left[\left(\frac{d\tilde{\Phi}(\xi)}{d\xi} \right)^2 + [(\tilde{\Phi}^2(\xi) - 1)^2 - (\tilde{\Phi}_+^2 - 1)^2] \right] + \left[\frac{8}{3}\tilde{\eta} (\tilde{\Phi}(\xi) - \tilde{\Phi}_+) \right] \quad (3.107)$$

bzw. seiner Ableitung abschätzen: Für eine ungerade $\tilde{\eta}$ -Potenz des Integranden braucht man im Ableitungsterm im ersten Integral genau eine ungerade und eine gerade Koeffizientenfunktion, das Produkt der Ableitungen und damit der erste Term sind also wieder ungerade. Ebenso braucht man für Beiträge aus dem Potentialterm in ungerader Ordnung in $\tilde{\eta}$ eine ungerade Anzahl von $\tilde{\Phi}_j$ -Funktionen mit j ungerade, die also durch eine ungerade Anzahl von $\tilde{\Phi}_i$ -Funktionen mit geradem i zu einem quartischen und einem quadratischen Term ergänzt werden müssen, welche damit auch ungerade sind. Der Potentialterm enthält noch konstante Terme, welche immer gerade sind, aber für die Parität der Ableitung des Integranden keine Bedeutung haben. Damit ist die Ableitung des Integranden gerade, so daß das erste Integral aus Gleichung (3.95) in jeder ungeraden Ordnung in $\tilde{\eta}$ einen linearen Term $L_j\tilde{R}$ und einen Volumenterm $v_j\tilde{R}^3$ liefert. Mit einer analogen Begründung sieht man, daß die Ableitung des Integranden für gerade Ordnungen in $\tilde{\eta}$ ungerade ist, und man also einen Oberflächenterm $O_i\tilde{R}^2$ und einen konstanten Term P_i bekommt.

Da in dem zweiten Integral noch ein $\tilde{\eta}$ auftaucht, sind dies Beiträge zur nächsthöheren Ordnung in $\tilde{\eta}$. Auch hier fällt die gerade Konstante beim Ableiten weg, und man erhält für ungerades j Beiträge zu P_{j+1} und O_{j+1} . Für gerades i bekommt man einen linearen Term L_{i+1} und einen Volumenterm v_{i+1} .

Es gibt also nur Oberflächen- und konstante Terme mit geradem Index und Volumen- und lineare Terme mit ungeradem Index. Damit läßt sich die allgemeine, dimensionlose Wirkung schreiben als

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{S}} &= \frac{\mathcal{S}}{2\pi\alpha^2/\beta} = \tilde{\mathcal{S}}_0 + \tilde{\eta}\tilde{\mathcal{S}}_1 + \tilde{\eta}^2\tilde{\mathcal{S}}_2 + \tilde{\eta}^3\tilde{\mathcal{S}}_3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \\ &= (O_0\tilde{R}^2 + P_0) + \tilde{\eta}(L_1\tilde{R} + v_1\tilde{R}^3) + \tilde{\eta}^2(O_2\tilde{R}^2 + P_2) + \\ &\quad + \tilde{\eta}^3(L_3\tilde{R} + v_3\tilde{R}^3) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \end{aligned} \quad (3.108)$$

Den kritischen Radius erhält man daraus wie in Abschnitt 3.1 durch Variation: Aus

$$\frac{d\mathcal{S}}{d\tilde{R}} = 2(O_0 + \tilde{\eta}^2 O_2)\tilde{R} + 3(\tilde{\eta}v_1 + \tilde{\eta}^3 v_3)\tilde{R}^2 + (\tilde{\eta}L_1 + \tilde{\eta}^3 L_3) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.109)$$

folgt

$$\begin{aligned} \tilde{R} &= \frac{-2\sum O_i\tilde{\eta}^i \pm \sqrt{4(\sum O_i\tilde{\eta}^i)^2 - 12(\sum L_j\tilde{\eta}^j)(\sum v_j\tilde{\eta}^j)}}{6\sum v_j\tilde{\eta}^j} \\ &= -\frac{2}{3}\frac{O_0}{v_1}\frac{1}{\tilde{\eta}} + \tilde{\eta}\frac{1}{3v_1} \left[-2O_2 + \frac{3L_1v_1}{2O_0} + \frac{2O_0v_3}{v_1} \right] + \\ &\quad + \tilde{\eta}^3\frac{1}{3v_1} \left[\frac{9L_1^2v_1^2}{8O_0^3} - 2O_4 + \frac{3L_3v_1}{2O_0} - \frac{3L_1O_2v_1}{2O_0^2} + \frac{2O_2v_3}{v_1} - \frac{2O_0v_3^2}{v_1^2} + \frac{2O_0v_5}{v_1} \right] + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^5). \end{aligned} \quad (3.110)$$

Es kommen nur ungerade Potenzen in $\tilde{\eta}$ vor, so daß der Fehler von fünfter Ordnung ist.

Jetzt sollen die einzelnen Terme für die im vorigen Abschnitt gefundene Bounce-Lösung

$$\tilde{\Phi} = \tanh \xi - \frac{1}{3} \tilde{\eta} + \tilde{\eta}^2 \tilde{\Phi}_2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (3.111)$$

berechnet werden:

O_0 ist der Oberflächenterm aus Gleichung (3.26), $2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \tilde{R}^2 O_0 = 4\pi \frac{\tilde{R}^2}{\beta^2} \mathcal{B}$. Die darin vorkommende niedrigste Ordnung der Wirkung der eindimensionalen Bounce-Lösung (Gl. (2.38))

$$\mathcal{B} = \int_{-\infty}^{\infty} dr \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\tilde{\Phi}}{dr} \right)^2 + U_s \right] \quad (3.112)$$

ergibt sich mit $\tilde{\Phi}_0(\xi) = \tanh(\xi)$ zu

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\xi}{\beta} \left[\frac{1}{2} \alpha^2 \beta^2 \left(\frac{d\tilde{\Phi}_0}{d\xi} \right)^2 + \frac{\kappa \alpha^4}{8} (\tilde{\Phi}_0^2 - 1)^2 \right] \\ &= \alpha^2 \beta \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \operatorname{sech}^4 \xi = \frac{4}{3} \alpha^2 \beta. \end{aligned} \quad (3.113)$$

Damit lautet der gesuchte Term

$$O_0 = \frac{2}{\alpha^2 \beta} \mathcal{B} = \frac{8}{3}. \quad (3.114)$$

Eingesetzt in die Gleichung für den Radius Gl. (3.28) ergibt sich in niedrigster Ordnung

$$R = \frac{2\mathcal{B}}{\eta} = \frac{8}{3} \alpha^2 \beta \frac{1}{\eta}. \quad (3.115)$$

Dieser Ausdruck zeigt Übereinstimmung mit dem in Gleichung (3.59) gefundenen dimensionslosen Ausdruck

$$\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}} = \frac{2}{3} \frac{\alpha^4 \kappa}{\eta}. \quad (3.116)$$

Den zu berechnenden konstanten Term kann man aus Symmetriegründen auf das Zweifache des Integrals I_4 aus Anhang C zurückführen:

$$\begin{aligned} P_0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \left[\frac{d\tilde{\Phi}_0^2}{d\xi} + (\tilde{\Phi}_0^2 - 1)^2 - (\tilde{\Phi}_{0+}^2 - 1)^2 \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} 2\xi^2 \operatorname{sech}^4 \xi d\xi = 4I_4 = \frac{-12 + 2\pi^2}{9}. \end{aligned} \quad (3.117)$$

Damit findet man für die Wirkung in nullter Ordnung

$$S_0 = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left(\frac{8}{3} \tilde{R}^2 - \frac{12 - 2\pi^2}{9} \right). \quad (3.118)$$

Der Volumenterm in erster Ordnung in $\tilde{\eta}$ ist auch schon bekannt. Rechnet man Gleichung (3.25) auf den dimensionslosen Parameter $\tilde{\eta}$ um, so ergibt sich:

$$v_1 \tilde{R}^3 = -\frac{16}{9} \tilde{R}^3. \quad (3.119)$$

Dies resultiert alleine aus dem zweiten Integral in Gleichung (3.95); die beiden Anteile im Potentialterm des ersten Integranden

$$4\tilde{\Phi}_0^3\tilde{\Phi}_1 - 2 \cdot 2\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1 \quad (3.120)$$

heben sich für großes negatives Argument gerade weg, ebenso die Terme mit $\tilde{\Phi}_+$. Die Ableitungen von Funktionen, die asymptotisch gegen eine Konstante gehen, gehen für große Argumente gegen Null, und der Ableitungsterm in der Wirkung liefert hier also auch keinen Beitrag.

Die Funktion f_1 , über deren Ableitung man in dem linearen Term erster Ordnung zu integrieren hat, lautet

$$f_1 = 2\tilde{\Phi}'_0\tilde{\Phi}'_1 + 4(\tilde{\Phi}_0^2 - 1)\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1 - 4(\tilde{\Phi}_{+0}^2 - 1)\tilde{\Phi}_{+0}\tilde{\Phi}_{+1} - \frac{8}{3}\tilde{\eta}(\tilde{\Phi}_0 - \tilde{\Phi}_{+0}). \quad (3.121)$$

Da $\tilde{\Phi}_1$ konstant ist, verschwindet der Ableitungsterm. Ebenso fallen die konstanten $\tilde{\Phi}_+$ -Terme beim Ableiten heraus, und es bleiben die folgenden zwei Anteile zu berechnen:

$$\begin{aligned} -4\tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 ((3\tilde{\Phi}_0^2 - 1)\tilde{\Phi}'_0\tilde{\Phi}_1) &= 4\tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \tanh^2 \xi \operatorname{sech}^2 \xi - \frac{4}{3}\tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi = \\ &= (2 \cdot 4M_{4,2} - 2 \cdot \frac{4}{3}I_2)\tilde{R} = \frac{8}{3}\tilde{R} \end{aligned} \quad (3.122)$$

und

$$-\tilde{R} \frac{8}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \tilde{\Phi}'_0(\xi) d\xi = -\tilde{R} \frac{8}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi = -\tilde{R} \frac{16}{3} I_2 = -\frac{4}{9} \pi^2 \tilde{R}. \quad (3.123)$$

Die Integrale $M_{4,2}$ und I_2 sind wieder im Anhang C zu finden. \mathcal{S}_1 ist also gegeben durch

$$\mathcal{S}_1 = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left(-\frac{16}{9} \tilde{R}^3 + \left(\frac{8}{3} - \frac{4\pi^2}{9} \right) \tilde{R} \right). \quad (3.124)$$

In der zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ liefert das erste Integral

$$\mathcal{S}_2 = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left[\left(\tilde{\Phi}_1'^2 + 2\tilde{\Phi}'_0\tilde{\Phi}'_2 \right) + 6\tilde{\Phi}_0^2\tilde{\Phi}_1^2 - 2\tilde{\Phi}_1^2 + 4\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_2(\tilde{\Phi}_0^2 - 1) - \frac{4}{9} \right] \quad (3.125)$$

nur Oberflächen- und konstante Terme. Die Potentialterme ohne $\tilde{\Phi}_2$ lassen sich weiter zusammenfassen zu

$$6\tilde{\Phi}_0^2\tilde{\Phi}_1^2 - 2\tilde{\Phi}_1^2 - \frac{4}{9} = \frac{6}{9} \tanh^2 \xi - \frac{2}{9} - \frac{4}{9} = -\frac{2}{3} \operatorname{sech}^2 \xi. \quad (3.126)$$

Im Oberflächenterm ergibt die Integration über diesen Term

$$-\frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = -\frac{4}{3}. \quad (3.127)$$

Die Integrale über $\tilde{\Phi}_2$ aus dem Ableitungs- und dem Potentialterm

$$\int_{-\infty}^{\infty} 2\tilde{\Phi}'_2\tilde{\Phi}'_0 d\xi \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} 4\tilde{\Phi}_2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi d\xi \quad (3.128)$$

heben sich gegeneinander weg, da das eine durch partielle Integration aus dem anderen hervorgeht. Der andere Ableitungsterm $\int \tilde{r}^2 \tilde{\Phi}_1'^2 d\tilde{r}$ verschwindet wieder, da $\tilde{\Phi}'_1 = 0$ ist. Man findet also für den Oberflächenterm

$$O_2 \tilde{R}^2 = -\frac{4}{3} \tilde{R}^2. \quad (3.129)$$

Für den konstanten Term braucht man wieder das Integral I_2 aus Anhang C:

$$-\frac{2}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = -\frac{4}{3} I_2 = -\frac{\pi^2}{9}. \quad (3.130)$$

Die verbleibenden beiden Integrale über $\tilde{\Phi}_2$ werden numerisch gelöst:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 2\tilde{\Phi}'_2\tilde{\Phi}'_0 d\xi &= 0.15921 \quad \text{und} \\ \int_{-\infty}^{\infty} -\xi^2 4\tilde{\Phi}_2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi d\xi &= 1.92018. \end{aligned} \quad (3.131)$$

Der konstante Term lautet also

$$P_2 = 0.982767. \quad (3.132)$$

Die Beiträge zum Oberflächen- und konstanten Term aus dem zweiten Integral in Gleichung (3.95) liefern keinen Beitrag, da die Ableitung von $\tilde{\Phi}_1 = -1/3$ identisch Null ist. Damit hat man den Koeffizienten der zweiten Ordnung bestimmt:

$$\mathcal{S}_2 = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left[-\frac{4}{3} \tilde{R}^2 + 0.982767 \right]. \quad (3.133)$$

Insgesamt ist die Wirkung bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ also gegeben durch:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left[\left(\frac{8}{3} \tilde{R}^2 - \frac{12 - 2\pi^2}{9} \right) + \tilde{\eta} \left(-\frac{16}{9} \tilde{R}^3 + \left(\frac{8}{3} - \frac{4\pi^2}{9} \right) \tilde{R} \right) + \right. \\ \left. + \tilde{\eta}^2 \left(-\frac{4}{3} \tilde{R}^2 + 0.982767 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \right]. \end{aligned} \quad (3.134)$$

Um den linearen Term in dritter Ordnung in $\tilde{\eta}$ berechnen zu können, müßte man die nächsthöhere Ordnung der Bounce-Lösung $\tilde{\Phi}_3$ kennen. Zur Bestimmung des Radius bis zur quadratischen Ordnung genügt aber die Kenntnis des Volumenterms in dieser Ordnung, welcher sich aus dem asymptotischen Verhalten von $\tilde{\Phi}_2$ bestimmen läßt. Auch hier sind die

Terme mit der Bounce-Lösung $\tilde{\Phi}$ und die mit dem Minimum $\tilde{\Phi}_+$ entgegengesetzt gleich und lassen sich zusammenfassen. Das erste Integral liefert den Anteil

$$\frac{1}{3}\tilde{R}^3 f_3(-\infty) = \frac{2}{3}\tilde{R}^3 \left[4(\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1^3 + 3\tilde{\Phi}_0^2\tilde{\Phi}_1\tilde{\Phi}_2 + \tilde{\Phi}_0^3\tilde{\Phi}_3) - 2(2\tilde{\Phi}_1\tilde{\Phi}_2 + 2\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_3) \right]_{\xi=-\infty} = -\frac{16}{81}\tilde{R}^3. \quad (3.135)$$

Die $\tilde{\Phi}_3$ -Terme heben sich dabei weg. Analog findet man für das zweite Integral:

$$-\frac{8}{9} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}'_2(\xi) d\xi = -\frac{16}{9}\tilde{\Phi}_{+2} = \frac{8}{27}, \quad (3.136)$$

so daß sich v_3 zu

$$v_3 = \frac{8}{27} - \frac{16}{81} = \frac{8}{81} \quad (3.137)$$

bestimmt.

Für den Radius ergibt sich damit, wenn man die gefundenen Terme in Gleichung (3.110) einsetzt:

$$\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}} + 0 + \frac{2 - 3\pi^2}{36}\tilde{\eta} + 0 \cdot \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3). \quad (3.138)$$

Durch Vergleich mit dem Laurentreihenansatz für \tilde{R} (Gl. (3.40)) liest man $a_0 = 0$ ab, wie schon auf Seite 52 aus den Randbedingungen ermittelt. Darüber hinaus sind jetzt aber auch

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{2 - 3\pi^2}{36} & \text{und} \\ a_2 &= 0 \end{aligned} \quad (3.139)$$

und damit die fehlenden Parameter in der Bounce-Lösung bestimmt.

Einsetzen des Ausdrucks für den Radius in den Ausdruck für die Wirkung liefert die nächste Korrektur zu Gleichung (3.30):

$$\mathcal{S} = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left[\frac{8}{9} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \frac{2(4 - 9\pi^2)}{81} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right]. \quad (3.140)$$

Es gibt noch eine zweite, dazu äquivalente Möglichkeit, die Konstanten zu bestimmen, welche hier als Kontrolle dienen soll. Dazu geht man jetzt von dem Ansatz Gl. (3.79) aus, in welchem die zu den Parametern a_1 und a_2 äquivalenten Parameter C_1 und D_1 explizit in der Bounce-Lösung auftauchen und \tilde{R} durch $\frac{1}{\tilde{\eta}}$ gegeben ist. Man bekommt dann bei der Berechnung der Wirkung zusätzliche Terme. Die Konstanten C_1 und D_1 müssen jetzt so bestimmt werden, daß im Ausdruck für den Radius die Terme proportional zu nichtnegativen $\tilde{\eta}$ -Potenzen verschwinden.

Den ersten Unterschied in der Bounce-Lösung findet man in $\tilde{\Phi}_1$:

$$\tilde{\Phi}_1 = -\frac{1}{3} - C_1 \operatorname{sech}^2 \xi. \quad (3.141)$$

Dadurch bekommt man aus den einzelnen Termen der Wirkung neue Beiträge im linearen

Term der ersten Ordnung. So liefern die einzelnen Integrale die zusätzlichen Ausdrücke:

$$-\tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 (2\tilde{\Phi}'_0 \tilde{\Phi}'_1)' d\xi \Rightarrow -4C_1 \tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} (-5 \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi + \operatorname{sech}^4 \xi) d\xi = \frac{8}{3} C_1 \tilde{R}$$

und

$$-\tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 (4(\tilde{\Phi}_0^2 - 1)\tilde{\Phi}_0 \tilde{\Phi}'_1)' d\xi \Rightarrow -4C_1 \tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} (-5 \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi + \operatorname{sech}^4 \xi) d\xi = \frac{8}{3} C_1 \tilde{R}. \quad (3.142)$$

Insgesamt erhält man also als neuen linearen Term

$$\tilde{L}_1 = \frac{8}{3} - \frac{4\pi^2}{9} + C_1 \frac{16}{3}. \quad (3.143)$$

Der Volumenterm v_1 erfährt keine Veränderung.

Die Bounce-Lösung in zweiter Ordnung in $\tilde{\eta}$ hat zwei Korrekturen:

$$\tilde{\Phi}_2 = \tilde{\Phi}_{2,\text{alt}} - C_1^2 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi - D_1 \operatorname{sech}^2 \xi. \quad (3.144)$$

Die durch den C_1 -Term bedingten Korrekturen im Oberflächenterm zweiter Ordnung lauten:

$$\begin{aligned} \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Phi}_1'^2 d\xi &\Rightarrow C_1^2 4\tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi d\xi = \frac{16}{15} C_1^2 \tilde{R}^2 \\ \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} 2\tilde{\Phi}'_0 \tilde{\Phi}'_2 d\xi &\Rightarrow -2C_1^2 \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^2 \xi (-3 \operatorname{sech}^4 \xi \sinh^2 \xi + \operatorname{sech}^2 \xi) d\xi = \\ &= -\frac{16}{15} C_1^2 \tilde{R}^2 \\ \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} 6\tilde{\Phi}_0 \tilde{\Phi}_1'^2 d\xi &\Rightarrow 6\tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(C_1^2 \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi + \frac{2}{3} C_1 \tanh^2 \xi \operatorname{sech}^2 \xi \right) d\xi = \\ &= \left(\frac{8}{5} C_1^2 + \frac{8}{3} C_1 \right) \tilde{R}^2 \\ \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} (-2\tilde{\Phi}_1'^2) d\xi &\Rightarrow -2\tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left(C_1^2 \operatorname{sech}^4 \xi + \frac{2}{3} C_1 \operatorname{sech}^2 \xi \right) d\xi = \\ &= \left(-\frac{8}{3} C_1^2 - \frac{8}{3} C_1 \right) \tilde{R}^2 \\ \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{8}{3} \tilde{\Phi}_1 d\xi &\Rightarrow -C_1 \frac{8}{3} \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = -\frac{16}{3} C_1 \tilde{R}^2 \\ \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} 4\tilde{\Phi}_0 \tilde{\Phi}_2 (\tilde{\Phi}_0^2 - 1) d\xi &\Rightarrow 4C_1^2 \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi d\xi = \frac{16}{15} C_1^2 \tilde{R}^2. \end{aligned} \quad (3.145)$$

Die Ausdrücke proportional zu C_1^2 heben sich gerade weg und übrig bleiben nur Korrekturen proportional zu C_1 , so daß man für den gesamten neuen Ausdruck

$$\tilde{O}_2 = -\frac{4}{3} - \frac{16 C_1}{3} \quad (3.146)$$

findet. Dieselben Terme liefern Korrekturen zum konstanten Term:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \tilde{\Phi}_1'^2 d\xi &\Rightarrow C_1^2 4 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi d\xi = \frac{4\pi^2}{45} C_1^2 \\
\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 2\tilde{\Phi}_0' \tilde{\Phi}_2' d\xi &\Rightarrow -2C_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi (-3 \operatorname{sech}^4 \xi \sinh^2 \xi + \operatorname{sech}^2 \xi) d\xi = \\
&= -\frac{2(30 - 2\pi^2)}{45} C_1^2 \\
\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 6\tilde{\Phi}_0^2 \tilde{\Phi}_1^2 d\xi &\Rightarrow 6 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \left(C_1^2 \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi + \frac{2}{3} C_1 \tanh^2 \xi \operatorname{sech}^2 \xi \right) d\xi = \\
&= \frac{2\pi^2}{15} C_1^2 + \frac{2(12 + \pi^2)}{9} C_1 \\
\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 (-2\tilde{\Phi}_1^2) d\xi &\Rightarrow -2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \left(C_1^2 \operatorname{sech}^4 \xi + \frac{2}{3} \xi^2 C_1 \operatorname{sech}^2 \xi \right) d\xi = \\
&= -\frac{2(-6 + \pi^2)}{9} C_1^2 - \frac{2\pi^2}{9} C_1 \\
\int_{-\infty}^{\infty} \frac{8}{3} \xi^2 \tilde{\Phi}_- 1 d\xi &\Rightarrow -C_1 \frac{8}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = -\frac{4\pi^2}{9} C_1 \\
\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 4\tilde{\Phi}_0 \tilde{\Phi}_2 (\tilde{\Phi}_0^2 - 1) d\xi &\Rightarrow 4C_1^2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^6 \xi \sinh^2 \xi d\xi = \frac{4\pi^2}{45} C_1^2. \tag{3.147}
\end{aligned}$$

Damit ergibt sich der neue konstante Term zu

$$\tilde{P}_2 = 0.982767 + \frac{4(6 - \pi^2)}{9} C_1 + \frac{8}{3} C_1^2. \tag{3.148}$$

Die Größe v_3 bleibt wie v_1 ebenfalls unverändert, da auch hier die Korrekturterme in der Lösungsfunktion bei $\pm\infty$ verschwinden.

Die Korrektur in der Bounce-Lösung proportional zu D_1 ist eine gerade Funktion, während die restlichen Terme in $\tilde{\Phi}_2$ ungerade sind. Durch den D_1 -Term bekommt man also auch in zweiter Ordnung einen linearen Term \tilde{L}_2 , ebenso in nächsthöherer Ordnung einen Oberflächenterm \tilde{O}_3 und so weiter. Diese, im bisherigen Ansatz nicht vorhandenen Terme führen aber im Ausdruck für den Radius Gl. (3.110) auf nichtverschwindende Koeffizienten vor geraden $\tilde{\eta}$ -Potenzen. Dies läßt sich nur widerspruchsfrei lösen, wenn alle die den a_i mit geradem i entsprechenden Koeffizienten, wie das hier auftauchende, dem a_2 entsprechende D_1 , Null sind.

Setzt man die korrigierten Ausdrücke für \tilde{L}_1 (Gl. (3.143)) und \tilde{O}_2 (Gl. (3.146)) in die Gleichung für den Radius Gl. (3.110) ein, so findet man für a_1

$$a_1 = \frac{1}{3v_1} \left[-2\tilde{O}_2 + \frac{3\tilde{L}_1 v_1}{O_0} + \frac{2O_0 v_3}{v_1} \right] = -\frac{3}{16} \left[\frac{4(-2 + 12C_1 + \pi^2)}{9} \right] = \frac{1}{18} - C_1 - \frac{\pi^2}{12}. \tag{3.149}$$

Aus der Forderung, daß $a_1 = 0$ sein soll, ergibt sich auch hier in konsistenter Weise

$$C_1 = \frac{2 - 3\pi^2}{36}. \tag{3.150}$$

Einsetzen des hiesigen Ansatz für den Radius $\tilde{R} = 1/\tilde{\eta}$ in die korrigierte Wirkung

$$\mathcal{S} = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left[\frac{8}{9} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-\frac{8}{3} - \frac{16C_1}{3} + \frac{2(4-9\pi^2)}{81} + 2 \left(\frac{4}{3} + \frac{8C_1}{3} - \frac{2\pi^2}{9} \right) \right) + 2D_1 \tilde{L}_2 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right] \quad (3.151)$$

zeigt ebenfalls Übereinstimmung, wenn $D_1 = 0$ ist.

Kapitel 4

Die hoch- und niederfrequenten Anteile der Fluktuationsdeterminante

4.1 Übersicht über die Methodik der Berechnung

Der schwierigste Schritt bei der Berechnung der Übergangsrates Gl. (2.107) ist die Berechnung der Fluktuationsdeterminante

$$\frac{\det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]}. \quad (4.1)$$

Dabei bedeutet U'' die zweite Ableitung des Potentials nach dem Feld $\Phi(x_\mu)$ und $\partial^2 = \partial_\mu \partial_\mu$ die Summe über die Ableitungen nach den (drei) kartesischen Koordinaten x_μ . Φ_+ ist das lokale Minimum des Potentials (Gl. (3.63)) und $\bar{\Phi}$ die im Abschnitt 3.2 berechnete Bounce-Lösung (Gl. (3.111)). Ferner bedeutet \det' das Auslassen der Nullmoden und der negativen Mode bei der Berechnung der Determinante, welche, wie auf Seite 25ff. beschrieben, gesondert behandelt werden.

Die zum Operator der Fluktuationsdeterminante gehörenden Eigenwertgleichungen (Schrödingergleichungen) lauten (Gl. (2.18)):

$$[-\partial^2 + U''(\Phi)] \Psi_n = \lambda_n \Psi_n. \quad (4.2)$$

Dabei steht Φ entweder für die Bounce-Lösung $\bar{\Phi}$ oder für das lokale Minimum Φ_+ . Ψ_n ist die Eigenfunktion zum Eigenwert λ_n . Für das spezielle Potential der Thin wall approximation (Gl. (3.2) und Gl. (3.3)) findet man in dimensionsbehafteten Größen (zur Definition von β vgl. Gl. (3.34))

$$U''(\Phi) = \frac{\kappa}{2} \left(3\Phi^2(r) - \alpha^2 \right) = \beta^2 \left(\frac{6}{\alpha^2} \Phi^2(r) - 2 \right) \quad (4.3)$$

und hat damit die Schrödingergleichung

$$\left[-\partial_r^2 + \beta^2 \left(\frac{6}{\alpha^2} \Phi^2(r) - 2 \right) \right] \Psi_n = \lambda_n \Psi_n \quad (4.4)$$

zu lösen. Es ist vorteilhaft, diese Gleichung auf die dimensionslosen Größen $\tilde{\Phi} = \Phi/\alpha$ und

$$\xi := \tilde{r} - \tilde{R} = \beta(r - R) \quad (4.5)$$

(vgl. Gl. (3.37)) umzuschreiben und durch β^2 zu dividieren. \tilde{R} ist dabei mit den in Abschnitt 3.3 berechneten Konstanten und dem Laurentreihenansatz Gl. (3.40) durch

$$\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}} + \frac{2 - 3\pi^2}{36} \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (4.6)$$

gegeben. Man bekommt so den dimensionslosen Operator M :

$$\left[-\partial_\xi^2 + \left(6\tilde{\Phi}^2(\xi) - 2 \right) \right] = M \quad (4.7)$$

und den dimensionslosen freien Operator \mathring{M} :

$$\left[-\partial_\xi^2 + \left(6\tilde{\Phi}_+^2(\xi) - 2 \right) \right] = \mathring{M}. \quad (4.8)$$

Die zu M und \mathring{M} gehörenden Eigenwerte werden ebenfalls dimensionslos:

$$\frac{1}{\beta^2} \lambda_n = \frac{4}{m_0^2} \lambda_n = \omega_n \quad \text{und} \quad \frac{1}{\beta^2} \mathring{\lambda}_n = \frac{4}{m_0^2} \mathring{\lambda}_n = \mathring{\omega}_n. \quad (4.9)$$

Der Faktor $(4/m_0^2)$ kann nun aus jedem Eigenwert herausgezogen und gekürzt werden. Bei einer ungleichen Anzahl von Eigenwerten bleibt der Faktor in einer noch zu bestimmenden Potenz u übrig. Mit dem Herausnehmen der drei Nullmoden und der negativen Mode aus der oberen Determinante ergibt sich die Potenz $u - 4$, und man findet schließlich für das Verhältnis der Determinanten:

$$\frac{\det'[-\partial^2 + U''(\tilde{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\tilde{\Phi}_+)]} = \frac{\prod'_n \lambda_n}{\prod_n \mathring{\lambda}_n} = \frac{\prod'_n \omega_n}{\prod_n \mathring{\omega}_n} \left(\frac{1}{\beta^2} \right)^{u-4} = \frac{\det' M}{\det \mathring{M}} \left(\frac{4}{m_0^2} \right)^{u-4}. \quad (4.10)$$

Die Größe u wird in Abschnitt 4.4.4 mit Hilfe der Zetafunktion berechnet werden. Es ergibt sich der Wert (vgl. Gl. (4.194))

$$u = 0. \quad (4.11)$$

Die sich aus dem u -Wert ergebende Dimension für das Verhältnis der Determinanten ist auch konsistent mit der Gleichung für die Übergangsrate (Gl. (2.107)).

Setzt man in den Operator aus Gleichung (4.7) jetzt die Entwicklung für die dimensionslose Bounce-Lösung (Gl. (3.43))

$$\tilde{\Phi}(\xi) = \tilde{\Phi}_0(\xi) + \tilde{\eta} \tilde{\Phi}_1(\xi) + \tilde{\eta}^2 \tilde{\Phi}_2(\xi) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (4.12)$$

ein, so erhält man bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ die Eigenwertgleichung

$$\left[-\partial^2 + 6 \left(\tilde{\Phi}_0^2 + 2\tilde{\eta}\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_1 + \tilde{\eta}^2(\tilde{\Phi}_1^2 + 2\tilde{\Phi}_0\tilde{\Phi}_2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \right) - 2 \right] \Psi_n = \left[-\partial^2 + V(\xi) \right] \Psi_n = M \Psi_n = \omega_n \Psi_n. \quad (4.13)$$

Die einzelnen Koeffizienten des Potentials

$$\frac{1}{\beta^2} U''(\tilde{\Phi}) = \hat{V}(\tilde{r}) = V(\xi) = V_0(\xi) + \tilde{\eta}V_1(\xi) + \tilde{\eta}^2V_2(\xi) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (4.14)$$

ergeben sich dabei mit den Ausdrücken Gl. (3.46), Gl. (3.66) und Gl. (3.83) für die Bounce-Lösung zu

$$V_0(\xi) = -6 \operatorname{sech}^2 \xi + 4, \quad (4.15)$$

$$V_1(\xi) = -4 \tanh \xi, \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} V_2(\xi) = & \frac{2}{3} + \xi \left[4 \tanh \xi + 4 \sinh \xi \cosh \xi - (7 + 6 \log 2) \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi \right] - \\ & - \tanh \xi \log \cosh \xi \left(6\xi \operatorname{sech}^2 \xi + 4 \cosh \xi \sinh \xi + 6 \tanh \xi \right) - \\ & - (1 + 6 \log 2) \tanh^2 \xi - 4 \log 2 \sinh^2 \xi + \\ & + 6 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi T(\xi). \end{aligned} \quad (4.17)$$

$T(\xi)$ ist die Stammfunktion von $\xi \tanh \xi$, $T(\xi) = \int_0^\xi \xi' \tanh \xi' d\xi'$.

Für den freien Operator bekommt man aus Gleichung (4.8) durch Einsetzen des lokalen Minimums $\tilde{\Phi}_+ = 1 - \frac{\tilde{\eta}}{3} - \frac{\tilde{\eta}^2}{6} - \frac{4}{27}\tilde{\eta}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)$ (Gl. (3.63)) das „freie“ Potential

$$\frac{1}{\beta^2} U''(\tilde{\Phi}_+) = \mathring{V} = \mathring{V}_0 + \tilde{\eta}\mathring{V}_1 + \tilde{\eta}^2\mathring{V}_2 + \tilde{\eta}^3\mathring{V}_3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \quad (4.18)$$

mit den konstanten Koeffizienten:

$$\mathring{V}_0(\xi) = 4, \quad (4.19)$$

$$\mathring{V}_1(\xi) = -4, \quad (4.20)$$

$$\mathring{V}_2(\xi) = -\frac{4}{3}, \quad (4.21)$$

$$\mathring{V}_3(\xi) = -\frac{10}{9}. \quad (4.22)$$

Hier ist die dritte Ordnung noch mit angegeben. Sie entspricht dem asymptotischen Verhalten der dritten Ordnung des Potentials aus Gleichung (4.14) und wird als solches in der weiteren Rechnung benötigt. Man bestimmt sie ebenfalls aus der Position des Minimums.

Außer den drei Nullmoden ω_{01} und der negativen Mode ω_{00} von M werden nun, damit die Anzahl der Eigenwerte gleich ist, die vier niedrigsten Moden $\mathring{\omega}_0$ von \mathring{M} aus der Determinante herausgenommen und vorgezogen. Dabei entspricht der erste Index an den Eigenwerten dem ungestörten Eigenwert nullter Ordnung, und der zweite Index kennzeichnet den später zu besprechenden Drehimpulseigenwert (vgl. S. 99). Die freien Eigenwerte sind nur mit einem Index gekennzeichnet. Den verbleibenden Ausdruck der Determinante

betrachtet man in der Schwingerschen Eigenzeitdarstellung, welche im nächsten Abschnitt eingeführt wird:

$$\log \frac{|\omega_{00}| \det' M}{\det \dot{M}} = \log \left(\frac{|\omega_{00}|}{(\dot{\omega}_0)^4} \right) + \left(- \int_0^\infty \frac{dt}{t} (\text{Tr}' e^{-tM} - \text{Tr}' e^{-t\dot{M}}) \right) = \log \left(\frac{|\omega_{00}|}{(\dot{\omega}_0)^4} \right) + I'. \quad (4.23)$$

Bei der Spurbildung werden die vorgezogenen Eigenwerte jeweils nicht mit berücksichtigt, mit Tr' ist also das Herausnehmen von vier Eigenwerten gemeint.

Das Integral I' wird nun aufgespalten in einen hochfrequenten Anteil für kleine t , $0 < t < \Lambda$, in welchem die Spur der Heat kernel $K_t = \text{Tr}'_{<} = \text{Tr}' e^{-tM} - \text{Tr}' e^{-t\dot{M}}$ durch die Seeley–Entwicklung angenähert wird, und einen Niederfrequenzanteil für große t . Das Verhalten der Spur in diesem Bereich mit $\Lambda < t < \infty$ ist durch die niedrigsten Frequenzen, also die kleinsten Eigenwerte ohne die Nullmoden und ohne die negative Mode gegeben. Für I' schreibt man also:

$$I'(\Lambda) = I'_{<}(\Lambda) + I'_{>}(\Lambda). \quad (4.24)$$

Der Cutoff Λ wird dann so bestimmt, daß die Fluktuationsdeterminante möglichst unabhängig von seiner Wahl ist.

Die Koeffizienten der Seeley–Entwicklung werden nach einem algebraischen Verfahren von D'yakonov, Petrov und Yung (DPY) [40, 57] in Abschnitt 4.3.3 berechnet. Zuvor sollen jedoch noch zwei weitere Verfahren zur Bestimmung der Koeffizienten aufgezeigt werden. Ein Rekursionsverfahren wurde von Belkov et al. [58] angewandt und wird in Abschnitt 4.3.1 beschrieben. Fliegner et al. [59] zeigen noch einen durch die Stringtheorie inspirierten Weg auf, der in Abschnitt 4.3.2 beschrieben werden soll. Das Integral über die entwickelte Spur wird in Abschnitt 4.4 dimensionell regularisiert und mittels Zeta–Funktion (vgl. Abschnitt 4.2) berechnet.

Der Operator M besitzt diskrete Eigenwerte, welche „Bänder“ um die Werte Null und Drei bilden. Sie werden in Abschnitt 4.5 störungstheoretisch bis zur zweiten Ordnung berechnet und in Abschnitt 4.6.1 bzw. Abschnitt 4.6.2 aufaddiert. Außerdem besitzt der Operator noch kontinuierliche Eigenwerte, welche in Abschnitt 4.6.3 zusammen mit den Eigenwerten des freien Operators \dot{M} mit Hilfe der Spektraldichte aufsummiert werden. Dadurch ist der niederfrequente Anteil gegeben.

Diese beiden Teile werden schließlich in Kapitel 5 auf verschiedene Weisen zu I' zusammengesetzt.

4.2 Zetafunktions–Regularisierung

In diesem Abschnitt soll die Methode der Zetafunktionsregularisierung [60] vorgestellt werden:

Es sei M ein positiv definit, selbstadjungierter Operator mit Eigenwerten λ_n und Eigenfunktionen ψ_n :

$$M\psi_n = \lambda_n\psi_n. \quad (4.25)$$

Dann ist die zu diesem Operator gehörende Zeta-Funktion für hinreichend große $\text{Re } z$ wie folgt definiert:

$$\zeta_M(z) := \sum_n \lambda_n^{-z} = \text{Tr } M^{-z}. \quad (4.26)$$

Wenn M der Hamiltonoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators ohne die Nullpunktsenergie ist, also als Eigenwerte die natürlichen Zahlen hat, dann ist die zugehörige Zetafunktion identisch mit der Riemannschen Zetafunktion

$$\zeta_R(z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^z}. \quad (4.27)$$

Die Zetafunktion kann analytisch fortgesetzt werden. Mit dieser Fortsetzung läßt sich nun die regularisierte Determinante des zugehörigen Operators definieren:

$$-\left. \frac{d}{dz} \zeta_M(z) \right|_{z=0} = \log \det M \quad (4.28)$$

bzw. $\det M = e^{-\left. \frac{d\zeta_M}{dz} \right|_{z=0}}.$

Dies läßt sich am konvergenten Fall plausibel machen:

$$-\left. \frac{d}{dz} \zeta_M(z) \right|_{z=0} = -\sum_n \left. \frac{d}{dz} \lambda_n^{-z} \right|_{z=0} = -\sum_n (-\log \lambda_n) \lambda_n^{-z} \Big|_{z=0} = -\sum_n (-\log \lambda_n) = \log \det M. \quad (4.29)$$

Eine Möglichkeit, die Zetafunktion zu berechnen, bedient sich des zum Operator M gehörenden Wärmeleitungskerns oder „*Heat kernels*“ [61]. Dieser ist definiert als

$$e^{-tM} = \sum_n e^{-t\lambda_n} \psi_n \psi_n^*. \quad (4.30)$$

Der Name kommt daher, daß diese Funktion die Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-tM} + M e^{-tM} = 0 \quad (4.31)$$

erfüllt. Dies entspricht der Wärmeleitungsgleichung („*Heat equation*“)

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \theta \Delta T = 0 \quad (4.32)$$

mit einer Temperaturleitfähigkeit θ und einer Temperatur T mit der Anfangsverteilung

$$T_0 = e^{-0\theta\Delta} = 1. \quad (4.33)$$

Zwischen dem Heat kernel des Operators M und der zugehörigen Zetafunktion besteht nun der folgende Zusammenhang:

$$\zeta_M(z) = \sum_n \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t\lambda_n} dt = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty t^{z-1} K_t dt \quad (4.34)$$

mit

$$K_t = \text{Tr} e^{-tM} = \sum_n e^{-t\lambda_n} . \quad (4.35)$$

Dies zeigt man wie folgt: Mit der Definition der Gammafunktion

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-s} s^{z-1} ds, \quad \text{Re } z > 0 \quad (4.36)$$

folgt für $s = t\lambda_n$:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t\lambda_n} t^{z-1} \lambda_n^{z-1} \lambda_n dt = \lambda_n^z \int_0^\infty e^{-t\lambda_n} t^{z-1} dt . \quad (4.37)$$

Löst man dies nach λ_n^{-z} auf und summiert über n , so erhält man die Behauptung.

Zur Berechnung der Determinante braucht man nun die Ableitung der Zetafunktion, welche durch

$$\frac{d\zeta_M}{dz} = -\frac{\Gamma'(z)}{\Gamma^2(z)} \int_0^\infty t^{z-1} K_t dt + \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{d}{dz} \left(\int_0^\infty t^{z-1} K_t dt \right) \quad (4.38)$$

gegeben ist. An der Stelle $z = 0$ findet man mit $-\frac{\Gamma'(0)}{\Gamma^2(0)} = 1$ und $\frac{1}{\Gamma(0)} = 0$, wenn das zweite Integral endlich ist, den Ausdruck

$$\left. \frac{d\zeta_M}{dz} \right|_{z=0} = \int_0^\infty \frac{dt}{t} K_t . \quad (4.39)$$

Nach Gleichung (4.28) ist dadurch aber bereits der (negative) Logarithmus der Determinante gegeben:

$$\log \det M = - \int_0^\infty \frac{dt}{t} K_t . \quad (4.40)$$

Dies ist die Schwingersche Eigenzeitdarstellung [62]. Sie gilt exakt, wenn die Determinante konvergiert. Symbolisch wird diese Gleichung auch für divergente Determinanten verwendet werden. Gemeint ist dann die nach Gleichung (4.39) zetafunktionsregularisierte Determinante

$$\log \det M = - \left. \frac{d}{dz} \zeta_M(z) \right|_{z=0} . \quad (4.41)$$

4.3 Die Seeley–Entwicklung — Heat kernel für kleine t

Für kleine positive t läßt sich e^{-Mt} in D Dimensionen in eine asymptotische Reihe entwickeln [63]:

$$e^{-Mt}(x, y) = (4\pi t)^{-D/2} \exp \left\{ -\frac{(x-y)^2}{4t} \right\} \sum_{n=0}^{\infty} t^n \tilde{O}_n(x, y) . \quad (4.42)$$

Für die in der Spur des Heat kernels aufsummierten Diagonalelemente erhält man daraus:

$$K_t = \text{Tr} e^{-Mt} = (4\pi t)^{-D/2} \sum_{n=0}^{\infty} t^n \mathcal{O}_n, \quad (4.43)$$

wobei in den Koeffizienten über x integriert worden ist:

$$\mathcal{O}_n = \int dx \tilde{\mathcal{O}}_n(x, x). \quad (4.44)$$

Dies ist die sogenannte *Seeley-Entwicklung*, die in diesem Abschnitt berechnet werden soll. Zuerst werden einige Verfahren zur Berechnung der Koeffizienten aus der Literatur zitiert, im Abschnitt 4.3.3 werden dann die Koeffizienten für das hier gegebene Potential berechnet.

4.3.1 Die rekursive Bestimmung der Koeffizienten

Die Koeffizienten $\tilde{\mathcal{O}}_n(x, y)$ können, wie z.B. bei Belkov [58] geschehen, rekursiv aus der Wärmeleitungsgleichung bestimmt werden. Dazu spaltet man in dem Operator e^{-Mt} den Heat kernel des freien Laplace-Operators

$$\bar{q}_t = e^{t\Delta} \quad (4.45)$$

ab. Der zu entwickelnde Operator Kern schreibt sich dann als

$$e^{-Mt} = q_t(x, y) u_t(x, y) \quad (4.46)$$

mit

$$q_t(x, y) = (4\pi t)^{-D/2} \exp\left\{-\frac{(x-y)^2}{4t}\right\} \quad \text{und} \quad (4.47)$$

$$u_t(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} t^n \tilde{\mathcal{O}}_n(x, y). \quad (4.48)$$

Durch Einsetzen in die Wärmeleitungsgleichung Gl. (4.31) läßt sich für einen Operator M , der wie in Gleichung (4.2) aus einer zweiten Ableitung und einem Potential V besteht,

$$M = -\partial^2 + V, \quad (4.49)$$

zeigen, daß folgende Beziehung gilt:

$$[\partial_t + M]q_t(x, y)u_t(x, y) = q_t(x, y) \left[\left(\partial_t + \frac{1}{t} \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} + M \right) u_t(x, y) \right] = 0. \quad (4.50)$$

Zum Beweis wendet man die Produktregel

$$\partial^2 AB = (\partial^2 A)B + 2(\partial_{x_i} A)(\partial_{x_i} B) + A(\partial^2 B) \quad (4.51)$$

auf die linke Seite an:

$$\begin{aligned} [\partial_t + M]q_t u_t &= [\partial_t - \partial^2 + V]q_t u_t \\ &= (\partial_t q_t)u_t + q_t(\partial_t u_t) - (\partial^2 q_t)u_t - 2(\partial_{x_i} q_t)(\partial_{x_i} u_t) - q_t(\partial^2 u_t) + V q_t u_t \\ &= q_t[(\partial_t - \partial^2 + V)u_t] + [(\partial_t - \partial^2)q_t]u_t - 2(\partial_{x_i} q_t)(\partial_{x_i} u_t). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Der mittlere Term verschwindet nach Wahl von $q_t(x, y)$ aufgrund der Wärmeleitungsgleichung Gl. (4.31) des freien Laplace-Operators,

$$(\partial_t - \partial^2)q_t(x, y) = 0. \quad (4.53)$$

Für die Ableitung von $q_t(x, y)$ findet man durch Einsetzen des Ausdrucks Gl. (4.47)

$$\begin{aligned} \partial_{x_i} q_t(x, y) &= \partial_{x_i} \left[(4\pi t)^{-D/2} \exp \left\{ -\frac{(x-y)^2}{4t} \right\} \right] \\ &= (4\pi t)^{-D/2} \left(-\frac{2(x_i - y_i)}{4t} \exp \left\{ -\frac{(x-y)^2}{4t} \right\} \right) \\ &= -\frac{x_i - y_i}{2t} q_t \end{aligned} \quad (4.54)$$

und damit für das Skalarprodukt im letzten Term von Gleichung (4.52):

$$2(\partial_{x_i} q_t)(\partial_{x_i} u_t) = -\frac{1}{t} q_t \left(\sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \frac{\partial}{\partial x_i} u_t \right). \quad (4.55)$$

Gleichung (4.52) wird also zu:

$$\begin{aligned} [\partial_t + M]q_t u_t &= q_t [(\partial_t + M)u_t] + \frac{1}{t} q_t \left(\sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \frac{\partial}{\partial x_i} u_t \right) \\ &= q_t \left[\left(\partial_t + \frac{1}{t} \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} + M \right) u_t \right] = 0, \end{aligned} \quad (4.56)$$

womit obige Behauptung gezeigt ist.

Nun setzt man für $u_t(x, y)$ die konkrete Reihe Gl. (4.48) ein:

$$0 \stackrel{!}{=} \left(\partial_t + \frac{1}{t} \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} + M \right) \left(\sum_{n=0}^{\infty} t^n \tilde{\mathcal{O}}_n(x, y) \right). \quad (4.57)$$

Durch Ausmultiplikation erhält man:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{n=0}^{\infty} n t^{n-1} \tilde{\mathcal{O}}_n + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{t} t^n \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} \tilde{\mathcal{O}}_n + \sum_{n=0}^{\infty} t^n M \tilde{\mathcal{O}}_n \\ &= \frac{1}{t} \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} \tilde{\mathcal{O}}_0 + \\ &\quad + \sum_{n=0}^{\infty} t^n \left[(n+1) \tilde{\mathcal{O}}_{n+1} + \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} \tilde{\mathcal{O}}_{n+1} + M \tilde{\mathcal{O}}_n \right]. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Koeffizientenvergleich führt auf die zwei Beziehungen

$$\sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} \tilde{\mathcal{O}}_0 = 0 \quad \text{und} \quad (4.59)$$

$$\left[(n+1) + \sum_{i=1}^D (x_i - y_i) \partial_{x_i} \right] \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x, y) = -M \tilde{\mathcal{O}}_n(x, y) \quad \forall n \in \mathbb{N}_0. \quad (4.60)$$

Gleichung (4.59) liefert den Rekursionsanfang: $\tilde{\mathcal{O}}_0$ muß konstant sein. Man wählt die Konstante zu Eins, um Übereinstimmung mit dem Fall des freien Laplace-Operators zu bekommen:

$$\tilde{\mathcal{O}}_0 = 1. \quad (4.61)$$

Die Integration der zweiten Gleichung (Gl. (4.60)) liefert die Rekursionsbeziehung

$$\tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x, y) = \int_0^1 s^n (-M) \tilde{\mathcal{O}}_n(x_s, y) ds, \quad (4.62)$$

wobei durch s eine Gerade x_s parametrisiert wird:

$$x_s(s) = y + s(x - y). \quad (4.63)$$

Diese Rekursionsbeziehung Gl. (4.62) zeigt man, indem man für ein festes n die Funktion

$$\varphi(s) = s^{n+1} \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x_s, y) \quad (4.64)$$

betrachtet. Dann gilt

$$\int_0^1 ds \frac{d}{ds} \varphi(s) = \varphi(1) - \varphi(0) = \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x, y). \quad (4.65)$$

Dies ist die linke Seite von Gleichung (4.62).

Andererseits gilt nach der Produktregel:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \varphi(s) &= (n+1) s^n \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x_s, y) + s^{n+1} \frac{d}{ds} \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x_s, y) \\ &= s^n \left[(n+1) + s \frac{d}{ds} \right] \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x_s, y) \\ &= s^n [-M(x_s)] \tilde{\mathcal{O}}_n(x_s, y), \end{aligned} \quad (4.66)$$

denn für eine beliebige Funktion ϕ gilt:

$$\begin{aligned} s \frac{d}{ds} \phi(x_s, y) &= s \frac{d}{ds} \phi(y + s(x - y), y) = s \sum_k \frac{d\phi}{dx_{s_k}} \frac{dx_{s_k}}{ds} \\ &= \sum_k s(x - y)_k \frac{d\phi}{dx_{s_k}} = \sum_k (x_s - y)_k \partial_{x_{s_k}} \phi, \end{aligned} \quad (4.67)$$

so daß man $\left[(n+1) + s \frac{d}{ds} \right] \tilde{\mathcal{O}}_{n+1}$ nach Gleichung (4.60) ersetzen kann und nach Integration die rechte Seite von Gleichung (4.62) bekommt.

Die gesuchten Rekursionsbeziehungen lauten also:

$$\tilde{\mathcal{O}}_0(x, y) = 1 \quad \text{und} \quad (4.68)$$

$$\tilde{\mathcal{O}}_{n+1}(x, y) = \int_0^1 s^n (-M) \tilde{\mathcal{O}}_n(x_s, y) ds. \quad (4.69)$$

Damit sind die x -abhängigen Koeffizienten des Heat kernels bestimmt.

4.3.2 Bestimmung der Koeffizienten mittels Greenfunktionen

In diesem Abschnitt soll eine weitere, von Fliegner et al. [59] vorgestellte, durch die String-Theorie inspirierte Methode, die Koeffizienten der Seeley-Entwicklung der Spur des Heat kernels Gl. (4.43) mit Hilfe von Greenfunktionen auszurechnen, skizziert werden. Dazu entwickelt man die Spur des Heat kernels

$$K_t = \text{Tr} \exp[-t(-\partial^2 + V)] \quad (4.70)$$

im D -dimensionalen Ortsraum und zerlegt in der Exponentialfunktion das t -Intervall in N gleiche Teile. Man bekommt diskrete x -Werte x_i , die periodischen Randbedingungen gehorchen sollen ($x_0 = x_N$):

$$\begin{aligned} K_t &= \int_{x(t)=x(0)} d^D x \langle x | \exp[-t(-\partial^2 + V)] | x \rangle \\ &= \int_{x_0=x_n} \prod_{i=1}^N d^D x_i \langle x_i | \exp \left[-\frac{t}{N} \left(-\partial^2 + V(x_i) \right) \right] | x_{i-1} \rangle \\ &=: \int_{x_0=x_n} \prod_{i=1}^N d^D x_i K_{i,i-1}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Der Kern $K_{i,i-1}$ kann berechnet werden, indem man eine Impulsbasis einfügt, die verbleibenden Matrixelemente als ebene Wellen ausdrückt und deren zweite Ableitung berechnet:

$$\begin{aligned} K_{i,i-1}(x_i, x_{i-1}) &= \int \frac{d^D p_i}{(2\pi)^D} \langle x_i | \exp \left[-\frac{t}{N} \left(-\partial^2 + V(x_i) \right) \right] | p_i \rangle \langle p_i | x_{i-1} \rangle \\ &= \int \frac{d^D p_i}{(2\pi)^D} \exp \left[-\frac{t}{N} \left(p^2 + V(x_i) \right) \right] e^{i p_i x_i} e^{-i p_i x_{i-1}} \\ &= \int \frac{d^D p_i}{(2\pi)^D} \exp \left[-\frac{t}{N} \left(p^2 + V(x_i) + i p_i \frac{(x_{i-1} - x_i)}{t/N} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Im Limes großer N wird $\frac{x_{i-1} - x_i}{t/N}$ zur Ableitung \dot{x} nach einer Variablen $s = t/N$. Nach einer quadratischen Ergänzung im Exponenten kann die Impulsintegration als Gaußintegration ausgeführt werden, und man erhält:

$$K_{i,i-1}(x_i, x_{i-1}) = \frac{1}{(4\pi t/N)^{D/2}} \exp \left[-\frac{t}{N} \left(\frac{\dot{x}^2}{4} + V(x) \right) \right]. \quad (4.73)$$

Wieder eingesetzt in den Ausdruck für die Spur Gl. (4.71) findet man für große N eine Pfadintegraldarstellung. Das Produkt über i wird dabei als s -Integration in die Exponentialfunktion gezogen:

$$K_t = (4\pi t)^{-D/2} \mathcal{P} \int_{x(t)=x(0)} [dx] \exp \left[-\int_0^t ds \left(\frac{\dot{x}^2}{4} + V(x) \right) \right]. \quad (4.74)$$

\mathcal{P} bedeutet Pfadordnung. Das Pfadintegral ist so normiert, daß für den freien Fall gilt:

$$\mathcal{P} \int [dx] \exp \left[-\int_0^t ds \left(\frac{\dot{x}^2}{4} \right) \right] = 1. \quad (4.75)$$

Führt man in dem Pfadintegral Schwerpunktskoordinaten

$$x(s) = x_0 + y(s) \quad (4.76)$$

ein, so kann man die Integration über den Schwerpunkt separieren und für einen Operator A den Term

$$\int [dy] \exp \left[- \int_0^t ds \left(\frac{\dot{y}^2}{4} \right) \right] \cdot A = \langle A \rangle \quad (4.77)$$

als Erwartungswert von A interpretieren. Damit wird die Spur des Heat kernel zu

$$K_t = (4\pi t)^{-D/2} \int d^D x_0 \mathcal{P} \left\langle \exp \left[- \int_0^t ds V(x) \right] \right\rangle. \quad (4.78)$$

In diesen Ausdruck setzt man jetzt sowohl die Taylorentwicklung für die pfadgeordnete Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \exp \left[- \int_0^t ds V(x) \right] &= 1 - \int_0^t ds_1 V(x(s_1)) + \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 V(x(s_2)) V(x(s_1)) - \dots \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \dots \int_0^{s_{l-1}} ds_l V^l(x(s_l)), \end{aligned} \quad (4.79)$$

als auch die Taylorentwicklung um x_0 für das Potential

$$V(x) = e^{y\partial} V(x_0) \quad (4.80)$$

ein:

$$\begin{aligned} K_t &= (4\pi t)^{-D/2} \int d^D x_0 \sum_{l=0}^{\infty} (-)^l \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \dots \int_0^{s_{l-1}} ds_l \left\langle e^{y\partial(1)} \dots e^{y\partial(l)} V^{(1)} \dots V^{(l)} \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Dabei ist $\partial_{(i)}$ eine Ableitung, die nur auf $V^{(i)}$ wirkt.

Der Erwartungswert steht durch das verallgemeinerte Wicksche Theorem

$$\left\langle e^{y(s_1)\partial_{(1)}} \dots e^{y(s_l)\partial_{(l)}} V^{(1)} \dots V^{(l)} \right\rangle = \exp \left(- \left[\sum_{\substack{i < k, \\ i, k = 1}}^l G(s_i, s_k) \partial_{(i)} \partial_{(k)} \right] \right) V^{(1)} \dots V^{(l)} \quad (4.82)$$

in Zusammenhang mit den Greenfunktionen des Laplace-Operators auf dem Kreis:

$$G(s_i, s_k) = |s_i - s_k| - \frac{(s_i - s_k)^2}{t}. \quad (4.83)$$

Mit der Umskalierung $s_i = t \cdot u_i$ gelangt man mit $G(s_i, s_k) = t G(u_i, u_k)$ zu

$$K_t = (4\pi t)^{-D/2} \int d^D x_0 \sum_{l=0}^{\infty} (-t)^l \int_0^1 du_1 \int_0^{u_1} du_2 \cdots \int_0^{u_{l-1}} du_l \cdot \\ \cdot \exp \left(- \left[t \sum_{\substack{i < k, \\ i, k=1}}^l G(u_i, u_k) \partial_{(i)} \partial_{(k)} \right] \right) V^{(1)} \dots V^{(l)}. \quad (4.84)$$

Durch Taylorentwicklung der verbleibenden Exponentialfunktion und Umsummation bekommt der Ausdruck die Form

$$K_t = (4\pi t)^{-D/2} \sum_{n=0}^{\infty} t^n \mathcal{O}_n, \quad (4.85)$$

an der man die gesuchten Koeffizienten ablesen kann:

$$\mathcal{O}_n = \int d^D x_0 \sum_{m=2}^n \frac{(-)^n}{(n-m)!} \int_0^1 du_1 \int_0^{u_1} du_2 \cdots \int_0^{u_{m-1}} du_m \cdot \\ \cdot \left[\sum_{\substack{i < k, \\ i, k=1}}^m G(u_i, u_k) \partial_{(i)} \partial_{(k)} \right]^{n-m} V^{(1)}(u) \dots V^{(m)}(u). \quad (4.86)$$

Der besseren Vergleichbarkeit mit den Ergebnissen des nächsten Abschnitts wegen ist das $(-)^n$ hier im Gegensatz zu der Arbeit von Fliegner et al. [59] mit in die Koeffizienten gezogen worden.

Die Integrationen über die u_i sind im Prinzip leicht auszuführen, da die Greenfunktionen $G(u_i, u_k) = u_i - u_k - (u_i - u_k)^2$ für $u_i > u_k$ einfache Polynome sind. Sie ergeben Zahlenfaktoren vor den Ableitungen. Fliegner et al. haben so die ersten sieben Koeffizienten bestimmt und Äquivalenz zu den Ergebnissen von Carson [57] gefunden.

4.3.3 Entwicklung nach ebenen Wellen

In diesem Abschnitt sollen für die Differenz der Spuren der Heat kernel der speziellen Operatoren

$$M(\xi) = -\partial^2 + V(\xi) \quad \text{und} \quad \mathring{M}(\xi) = -\partial^2 + \mathring{V}(\xi) \quad (4.87)$$

die ersten Koeffizienten der Seeley–Entwicklung (Gl. (4.43)) in drei Dimensionen inklusive der niedrigsten Eigenwerte, deshalb hier ohne Strich,

$$\text{Tr}_< = \text{Tr} e^{-tM} - \text{Tr} e^{-t\mathring{M}} = (4\pi t)^{-3/2} \sum_n t^n \mathcal{O}_n \quad (4.88)$$

nach dem Verfahren von D'yakonov, Petrov und Yung [40] berechnet werden, woraus man dann — nach Abzug der niedrigsten Eigenwerte und nach Regularisierung, siehe Abschnitt 4.4.2 — die gesuchte Determinante berechnen kann:

$$I = \log \frac{\det(-\partial^2 + V)}{\det(-\partial^2 + \overset{\circ}{V})} = \log \frac{\det M}{\det \overset{\circ}{M}} = - \int_0^\infty \frac{dt}{t} (\text{Tr} e^{-tM} - \text{Tr} e^{-t\overset{\circ}{M}}). \quad (4.89)$$

Die letzte Gleichheit ist wieder nur symbolisch zu verstehen, da die zu berechnende Determinante ja regularisiert werden muß. Die Spur für diese speziellen Operatoren wird je nach Näherung mit $\text{Tr}_<$ bzw. $\text{Tr}_>$ bezeichnet.

Ausgangspunkt für das DPY-Verfahren [40] ist die Entwicklung der Spur nach einem vollständigen Orthonormalsystem. Dafür werden hier dreidimensionale ebene Wellen genommen:

$$\text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t} \right) = \int_{-\infty}^\infty d^3x \int_{-\infty}^\infty \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{p}\vec{x}} (e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t}) e^{i\vec{p}\vec{x}}. \quad (4.90)$$

Der Faktor $e^{i\vec{p}\vec{x}}$ wird jetzt an dem Ausdruck $(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t})$ vorbeigezogen, um die beiden ebenen Wellen zusammenfassen zu können. Dabei erfahren die Ableitungen in M in allen drei Komponenten eine Verschiebung gemäß:

$$\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + i p_\mu. \quad (4.91)$$

Um dies zu sehen (siehe auch [64]) entwickelt man den Heat kernel bis zum linearen Term und wendet die Produktregel an. Man erhält dann folgende Operatoridentität:

$$\begin{aligned} e^{-i\vec{p}\vec{x}} (1 - Mt) e^{i\vec{p}\vec{x}} &= 1 - t \left(- e^{-i\vec{p}\vec{x}} \partial_\mu \partial_\mu e^{i\vec{p}\vec{x}} + V \right) \\ &= 1 - t \left(- e^{-i\vec{p}\vec{x}} \partial_\mu \left[\partial_\mu e^{i\vec{p}\vec{x}} \right] - e^{-i\vec{p}\vec{x}} \partial_\mu \left[e^{i\vec{p}\vec{x}} \partial_\mu \right] + V \right) \\ &= 1 - t \left(-(i p_\mu)^2 - 2 i p_\mu \partial_\mu - \partial_\mu^2 + V \right) \\ &= 1 - t \left(-(\partial_\mu + i p_\mu)^2 + V \right), \end{aligned} \quad (4.92)$$

analog für $\overset{\circ}{M}$. Mit vollständiger Induktion läßt sich die Identität auch in höheren Ordnungen zeigen. Ein anderer Beweis benutzt eine Fouriertransformation.

Mit der Verschiebung Gl. (4.91) erhält man für die Spur den Ausdruck:

$$\text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t} \right) = \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left(e^{-M(\partial \rightarrow \partial + i p)t} - e^{-\overset{\circ}{M}(\partial \rightarrow \partial + i p)t} \right) \cdot \mathbb{1}. \quad (4.93)$$

Im Integranden wird dabei der gesamte Operator auf die Einheitsfunktion angewandt.

Der verschobene Operator $M(\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + i p_\mu)$ berechnet sich darin zu

$$-(\partial_\mu + i p_\mu)^2 + V = -\partial^2 - 2 i p_\mu \partial_\mu + p_\mu^2 + V = M - 2 i p_\mu \partial_\mu + p^2 = \delta M + p^2, \quad (4.94)$$

ebenso für $\overset{\circ}{M}$. p^2 kommutiert mit δM , so daß man schreiben kann:

$$\text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t} \right) = \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-p^2 t} \left(e^{-\delta M t} - e^{-\delta \overset{\circ}{M} t} \right) \cdot \mathbb{1}. \quad (4.95)$$

$\delta M = M - 2i p_\mu \partial_\mu$ enthält noch Terme linear in p_μ , welche aufgrund der Ableitung nicht mit M vertauschen. Um nun die p -Integration ausführen zu können, entwickelt man ($e^{-\delta M t} - e^{-\delta \overset{\circ}{M} t}$) in eine Taylorreihe:

$$e^{-\delta M t} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{l!} (\delta M)^l (-t)^l. \quad (4.96)$$

Hierbei ist wieder zu beachten, daß die vier Summanden aus $\delta M = M - 2i p_\mu \partial_\mu$ nicht miteinander kommutieren. Es wird dazu folgende Notation eingeführt:

$\{A^m B^n\}$ meint die Summe aller verschiedenen Permutationen, in denen m mal der Faktor A und n mal der Faktor B vorkommt. (Dies sind $\binom{m+n}{m}$ Terme.) Zur Erläuterung seien folgende Beispiele gegeben:

$$\{A^2 B^1\} = AAB + ABA + BAA \quad (4.97)$$

$$\{A^2\} = AA \quad (4.98)$$

$$\text{falls } [A, B] = 0 \quad \text{gilt: } \{A^m B^n\} = \binom{m+n}{m} A^m B^n. \quad (4.99)$$

Mit dieser Notation folgt nun

$$(A + B + C + D)^l = \sum_{j=0}^l \sum_{i=0}^{l-j} \sum_{k=0}^{l-j-i} \{A^k B^i C^j D^{l-k-i-j}\}. \quad (4.100)$$

Dies eingesetzt in die Taylorreihe Gl. (4.96) ergibt für die Spur Gl. (4.95)

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(e^{-M t} - e^{-\overset{\circ}{M} t} \right) &= \sum_{l=0}^{\infty} \int d^3 x \frac{(-t)^l}{l!} \sum_{j=0}^l \sum_{i=0}^{l-j} \sum_{k=0}^{l-j-i} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-p^2 t} \\ &\cdot \left(\left\{ (-2i p_x \partial_x)^k (-2i p_y \partial_y)^i (-2i p_z \partial_z)^{l-k-i-j} M^j \right\} - \right. \\ &\left. - \left\{ (-2i p_x \partial_x)^k (-2i p_y \partial_y)^i (-2i p_z \partial_z)^{l-k-i-j} \overset{\circ}{M}^j \right\} \right) \cdot \mathbb{1}. \quad (4.101) \end{aligned}$$

Die Faktoren $(-2i p_\mu)$ kommutieren sowohl mit ∂_μ als auch mit M und können aus der geschweiften Klammer gezogen werden:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(e^{-M t} - e^{-\overset{\circ}{M} t} \right) &= \sum_{l=0}^{\infty} \int d^3 x \frac{(-t)^l}{l!} \sum_{j=0}^l \sum_{i=0}^{l-j} \sum_{k=0}^{l-j-i} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{-p^2 t} (-2i)^{l-j} p_x^k p_y^i p_z^{l-k-i-j} \\ &\cdot \left(\left\{ \partial_x^k \partial_y^i \partial_z^{l-k-i-j} M^j \right\} - \left\{ \partial_x^k \partial_y^i \partial_z^{l-k-i-j} \overset{\circ}{M}^j \right\} \right) \cdot \mathbb{1}. \quad (4.102) \end{aligned}$$

Jetzt kann man die Integration über p ausführen. Da $e^{-p^2 t}$ eine gerade Funktion ist und von $-\infty$ bis $+\infty$ integriert wird, verschwinden die Integrale über ungerade p -Potenzen. Dem wird durch folgende Umsummation Rechnung getragen: Mit $n = \frac{l+j}{2}$, $m = \frac{l-j}{2}$ und

daraus folgend $l = n + m$, $j = n - m$ gilt:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{j=0}^l \text{Beiträge mit geradem } (l-j) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \text{alle Beiträge.} \quad (4.103)$$

Damit bekommt man für die Spur

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t} \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int d^3x \sum_{m=0}^n \frac{(-t)^{m+n}}{(m+n)!} \sum_{i=0}^{2m} \sum_{k=0}^{2m-i} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-p^2t} (-)^m 4^m p_x^k p_y^i p_z^{2m-k-i} \\ &\cdot \left(\left\{ \partial_x^k \partial_y^i \partial_z^{2m-k-i} M^{n-m} \right\} - \left\{ \partial_x^k \partial_y^i \partial_z^{2m-k-i} \overset{\circ}{M}^{n-m} \right\} \right) \cdot \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (4.104)$$

Ausgehend von dem Gaußschen Integral $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{-p^2t} = 1/\sqrt{4\pi t}$ erhält man die Integrale mit höheren (geraden) p -Potenzen durch Ableiten nach t :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} p^{2m} e^{-p^2t} = -\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} p^{2m-2} e^{-p^2t} = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \frac{1 \cdot 3 \cdots (2m-1)}{(2t)^m} \quad (m \geq 1). \quad (4.105)$$

Die p -Integration liefert damit den folgenden Beitrag (in D Dimensionen):

$$\begin{aligned} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_{2m}=1}^D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^D p}{(2\pi)^D} e^{-p^2t} p_{\mu_1} \cdots p_{\mu_{2m}} \partial_{\mu_1} \cdots \partial_{\mu_{2m}} = \\ \frac{1}{(4\pi t)^{D/2}} \left(\frac{1}{2t} \right)^m \sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^D \{ \partial_{\mu_1}^2 \cdots \partial_{\mu_m}^2 \} \frac{1}{m!}. \end{aligned} \quad (4.106)$$

Durch die Summation über $2m$ Indizes von 1 bis D über das Produkt $\partial_{\mu_1} \cdots \partial_{\mu_{2m}}$ auf der linken Seite erzeugt man neben Termen, die bei der Integration keinen Beitrag liefern, da mindestens eine Ableitung in ungerader Potenz vorkommt, alle Permutationen aus $2m$ Ableitungen, in denen je eine gerade Anzahl von Ableitungen gleich ist, also $\{ \partial_{\mu_1}^2 \cdots \partial_{\mu_m}^2 \}$.

Wenn auf der linken Seite n Indizes gleich sind, bekommt man aus dem Integral einen zusätzlichen Faktor

$$(2n-1)!! = 1 \cdot 3 \cdots (2n-1) = \frac{1}{2^n} \frac{(2n)!}{n!}, \quad (4.107)$$

der aber identisch ist mit dem, den man bekommt, wenn man in der geschweiften Klammer auf der rechten Seite erst die Permutation ausführt und dann die Indizes einsetzt und damit mehrmals den gleichen Term summiert.

Da die Summation auf der rechten Seite über alle Indizes läuft, zählt man manche Kombinationen mehrfach, was durch den Faktor $1/m!$ wieder ausgeglichen wird.

Eingesetzt in den Ausdruck für die Spur Gl. (4.104) ergibt das

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\mathring{M}t} \right) &= \sum_{n=0}^{\infty} \int d^3x \sum_{m=0}^n \frac{(-)^n t^{m+n}}{(m+n)!} 4^m \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \left(\frac{1}{2t} \right)^m \frac{1}{m!} \cdot \\
&\quad \cdot \left[\sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^3 \left(\left\{ \partial_{\mu_1}^2 \partial_{\mu_2}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 M^{n-m} \right\} - \left\{ \partial_{\mu_1}^2 \partial_{\mu_2}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 \mathring{M}^{n-m} \right\} \right) \right] \cdot \mathbb{1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t^n (-)^n \int d^3x \sum_{m=0}^n \frac{2^m}{(m+n)!} \frac{1}{m!} \cdot \\
&\quad \cdot \left[\sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^3 \left(\left\{ \partial_{\mu_1}^2 \partial_{\mu_2}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 M^{n-m} \right\} - \left\{ \partial_{\mu_1}^2 \partial_{\mu_2}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 \mathring{M}^{n-m} \right\} \right) \right] \cdot \mathbb{1} .
\end{aligned} \tag{4.108}$$

Dabei wirken die partiellen Ableitungen, soweit keine anderen Klammern gesetzt sind, auf alle hinter ihr stehenden Ausdrücke, also z.B.:

$$V \partial_{\mu} V \partial_{\mu} V = V \partial_{\mu} (V \partial_{\mu} V) . \tag{4.109}$$

Aus der ersten geschweiften Klammer tragen nur Permutationen bei, in denen als letztes das Potential V aus dem Operator M steht ($M = \partial^2 + V$, Gl. (4.87)), denn die Ableitung der Einheitsfunktion verschwindet.

Durch partielle Integration kann man zeigen, daß auch Terme, in denen als erstes eine Ableitung vorkommt, verschwinden müssen, denn für beliebige Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ gilt nach Anwendung der Produktregel für die Komponente, nach der abgeleitet wird:

$$\int dx_{\mu} \partial_{\mu} (f(x)g(x)) = \int dx_{\mu} (\partial_{\mu} f(x))g(x) + \int dx_{\mu} f(x) (\partial_{\mu} g(x)) . \tag{4.110}$$

Der zweite Term wird nun partiell integriert. Dabei verschwinden die Randterme, da alle Kombinationen von Ableitungen und Potenzen des Potentials für große positive und negative Argumente hinreichend schnell gegen Null gehen. Also gilt

$$\int dx_{\mu} \partial_{\mu} (f(x)g(x)) = \int dx_{\mu} (\partial_{\mu} f(x))g(x) - \int dx_{\mu} (\partial_{\mu} f(x))g(x) = 0 , \quad \text{q.e.d.} . \tag{4.111}$$

\mathring{V} ist konstant, so daß aus der letzten geschweiften Klammer im n -ten Koeffizienten überhaupt nur der Term mit der n ten Potenz von \mathring{V} übrigbleibt. Damit findet man für die Spur einen Ausdruck mit einer ab dem zweiten Koeffizienten einfacheren Form:

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\mathring{M}t} \right) &= \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \cdot \int d^3x (V - \mathring{V}) + \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=2}^{\infty} t^n (-)^n \cdot \\
&\quad \cdot \int d^3x \left[\left(\sum_{m=0}^{n-2} \frac{2^m}{(m+n)!} \frac{1}{m!} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^3 V \left\{ \partial_{\mu_1}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 M^{n-m-2} \right\} V \right) - \frac{\mathring{V}^n}{n!} \right] .
\end{aligned} \tag{4.112}$$

Der nullte Koeffizient ist für die beiden Spuren von M und $\overset{\circ}{M}$ gleich und hebt sich in der Differenz weg.

Die gesuchte Seeley–Reihe Gl. (4.43) ist also gegeben durch

$$\text{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t} \right) = \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} t^n \mathcal{O}_n \quad (4.113)$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= - \int d^3x \left(V - \overset{\circ}{V} \right) \quad \text{und} \\ \mathcal{O}_n &= (-)^n \int d^3x \left[\left(\sum_{m=0}^{n-2} \frac{2^m}{(m+n)!} \frac{1}{m!} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^3 V \left\{ \partial_{\mu_1}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 M^{n-m-2} \right\} V \right) - \frac{\overset{\circ}{V}^n}{n!} \right] \\ &\quad (n \geq 2). \end{aligned} \quad (4.114)$$

Für V und $\overset{\circ}{V}$ setzt man hier die radialsymmetrischen Ausdrücke Gl. (4.14) und Gl. (4.18) ein. Die kartesischen Ableitungen müßte man nun in Kugelkoordinaten umschreiben und so die Koeffizienten berechnen. Dies ist aber ein sehr umständlicher und rechenzeitintensiver Weg. Da man weiß, daß das Endergebnis wieder radialsymmetrisch sein muß und daß die kartesischen Ableitungen immer paarweise auftreten, wird man probieren, gleiche Ableitungen mittels partieller Integration zu dem Laplace–Operator $\partial_\mu \partial_\mu = \partial^2 = \Delta_{\tilde{r}} + \Delta_\Omega$ in drei Dimensionen, der auf radialsymmetrische Funktionen wie

$$\Delta_{\tilde{r}} = \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} \quad (4.115)$$

wirkt, zusammenzufassen. Dabei nutzt man aus, daß die Ableitungen untereinander vertauschen: $\partial_\mu \partial_\nu = \partial_\nu \partial_\mu$ und daß, wie bereits vorne erwähnt, die Randterme in der partiellen Integration verschwinden. Die zu berechnenden Terme sind von der allgemeinen Form

$$\int d^3x V^a \partial_\mu V^b \partial_\nu V^c \dots V^x \partial_\lambda V^y \partial_\kappa V^z, \quad (4.116)$$

wobei die Ableitungsindizes paarweise gleich sind. Die lateinischen Buchstaben geben die Potenz des Potentials an und nehmen ganze positive Werte und Null an. Es sei daran erinnert, daß die partiellen Ableitungen, wenn keine Klammern gesetzt sind, auf alle hinter ihnen stehenden Ausdrücke wirken.

Als erstes zeigt man, daß diese Ausdrücke symmetrisch sind:

$$\begin{aligned} \int d^3x V^a \partial_\mu V^b \partial_\nu V^c \dots V^x \partial_\lambda V^y \partial_\kappa V^z &= - \int d^3x (\partial_\mu V^a) (V^b \partial_\nu V^c \dots V^x \partial_\lambda V^y \partial_\kappa V^z) \\ &= - \int d^3x (V^b \partial_\mu V^a) (\partial_\nu V^c \dots V^x \partial_\lambda V^y \partial_\kappa V^z) \\ &= + \int d^3x (\partial_\nu V^b \partial_\mu V^a) (V^c \dots V^x \partial_\lambda V^y \partial_\kappa V^z) \\ &= \dots \\ &= + \int d^3x V^z \partial_\kappa V^y \partial_\lambda V^x \dots V^c \partial_\nu V^b \partial_\mu V^a. \end{aligned} \quad (4.117)$$

Dabei wurde immer abwechselnd über die entsprechende Komponente partiell integriert und die Kommutativität des Potentials mit seinen Ableitungen ausgenutzt. Da die Gesamtzahl der Ableitungen gerade ist, resultiert ein positives Vorzeichen. Es lassen sich also zueinander symmetrische Terme zusammenfassen.

Nutzt man nun weiter die Beziehung

$$V^a \partial V^b = \frac{b}{a+b} \partial V^{a+b} \quad (4.118)$$

aus und wendet diese abwechselnd mit der Produktregel an, so erreicht man mit partieller Integration, daß die Ableitungen paarweise hintereinanderstehen:

Für Ausdrücke mit zwei Ableitungen zeigt man so die allgemeine Formel

$$\int d^3x V^a \partial V^b \partial V^c = \frac{ac}{n-1} \int d^3x V^{n-1} \partial^2 V \quad \text{mit } n = a + b + c. \quad (4.119)$$

Um den Laplace-Operator zu verschieben, wendet man Gleichung (4.118) auf die zweite Ableitung an und benutzt für die erste Ableitung die Produktregel.

Für einen Ausdruck mit vier Ableitungen und beliebig vielen V -Potenzen findet man:

$$\begin{aligned} & \int d^3x V^a \partial_\mu V^b \partial_\nu V^c \partial_\lambda V^d \partial_\kappa V^e \\ &= \frac{e}{d+e} \int d^3x V^a \partial_\mu V^b \partial_\nu V^c \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e} \\ &= \frac{e}{d+e} \int d^3x \left\{ V^a \partial_\mu \left[V^b (\partial_\nu V^c) (\partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) \right] + V^a \partial_\mu \left[V^{b+c} \partial_\nu \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e} \right] \right\} \\ &= \frac{e}{d+e} \int d^3x \left\{ \frac{c}{c+b} V^a \partial_\mu \left[(\partial_\nu V^{b+c}) (\partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) \right] + V^a \partial_\mu \left[V^{b+c} \partial_\nu \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e} \right] \right\} \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{ce}{(d+e)(b+c)} V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^{b+c}) (\partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{ce}{(d+e)(b+c)} V^a (\partial_\nu V^{b+c}) (\partial_\mu \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \frac{e}{d+e} V^a (\partial_\mu V^{b+c}) (\partial_\nu \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{e}{d+e} V^{a+b+c} \partial^2 \partial^2 V^{d+e} \right\} \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{ce}{(d+e)(b+c)} V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^{b+c}) (\partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{ce}{(d+e)(b+c)} \frac{b+c}{a+b+c} (\partial_\nu V^{a+b+c}) (\partial_\mu \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{e}{d+e} \frac{b+c}{a+b+c} (\partial_\mu V^{a+b+c}) (\partial_\nu \partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \frac{e}{d+e} V^{a+b+c} \partial^2 \partial^2 V^{d+e} \right\} \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{ce}{(d+e)(b+c)} V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^{b+c}) (\partial_\lambda \partial_\kappa V^{d+e}) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{e(a-c)}{(d+e)(a+b+c)} V^{a+b+c} \partial^2 \partial^2 V^{d+e} \right\}. \quad (4.120) \end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde in den mittleren Termen über die entsprechende Komponente partiell integriert. Jetzt stehen im vorderen Term aber noch nicht unbedingt die Ableitungen mit demselben Index hintereinander. Dies erreicht man unter Verwendung folgender

Hilfsformel:

$$\int d^3x (\partial_i V^{a+d})(\partial_i \partial_j V^b)(\partial_j V^b) = \int d^3x \left\{ -\frac{1}{4} V^{a+d} \partial^2 \partial^2 V^{2b} + \frac{1}{2} V^b (\partial^2 V^{a+d})(\partial^2 V^b) \right\}. \quad (4.121)$$

Beim Beweis dieser Formel nutzt man aus, daß sich der Term der linken Seite bei zweifacher partieller Integration reproduziert und $(\partial_\mu V)(\partial_\mu V) = \frac{1}{2} \partial^2 V^2 - V \partial^2 V$ gilt. Schreibt man jetzt den ursprünglichen Term $V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^b)(\partial_\mu \partial_\nu V^c)$ als $V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^b)(\partial_\mu \partial_\nu V^{b+(c-b)})$, mit $c - b = d$, wobei o.B.d.A. $c > b$ ist, da beide Terme kommutieren, so kann man nach Anwendung der Beziehung Gl. (4.118), der Produktregel und partieller Integration im zweiten Term die Hilfsformel benutzen:

$$\begin{aligned} & \int d^3x V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^b) \left(\partial_\mu \frac{b+d}{b} V^d \partial_\nu V^b \right) \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{c}{b} V^a (\partial_\mu \partial_\nu V^b)(\partial_\mu V^d)(\partial_\nu V^b) + \frac{c}{b} V^{a+d} (\partial_\mu \partial_\nu V^b)(\partial_\mu \partial_\nu V^b) \right\} \\ &= \int d^3x \left\{ \frac{c}{b} \frac{d}{a+d} (\partial_\mu V^{a+d})(\partial_\mu \partial_\nu V^b)(\partial_\nu V^b) - \frac{c}{b} (\partial_\mu V^{a+d})(\partial_\mu \partial_\nu V^b)(\partial_\nu V^b) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{c}{b} V^{a+d} (\partial^2 \partial_\nu V^b)(\partial_\nu V^b) \right\}. \end{aligned} \quad (4.122)$$

Für sechs Ableitungen sind die entsprechenden Regeln nur für Terme mit drei Potentialen abgeleitet worden, da andere Ausdrücke, soweit wie hier gerechnet wird, nicht vorkommen, aber die Verallgemeinerung stellt kein prinzipielles Problem dar. Für höhere Potenzen der Potentiale gelten die partielle Integration und die Produktregel unverändert, lediglich die Anwendung von Gleichung (4.118) führt auf andere Vorfaktoren. Da das Resultat auf jeden Fall radialsymmetrisch sein muß, existieren solche Regeln auch für eine größere Zahl von Ableitungen.

Damit erhält man für die ersten sechs Koeffizienten die Ausdrücke:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= - \int d^3x (V - \dot{V}), \\ \mathcal{O}_2 &= \int d^3x \left(\frac{V^2}{2} - \frac{\dot{V}^2}{2} \right), \\ \mathcal{O}_3 &= - \int d^3x \left(\frac{V^3}{6} - \frac{\dot{V}^3}{6} - \frac{V \Delta V}{12} \right), \\ \mathcal{O}_4 &= \int d^3x \left(\frac{V^4}{24} - \frac{\dot{V}^4}{24} - \frac{V^2 \Delta V}{24} + \frac{V \Delta^2 V}{120} \right), \\ \mathcal{O}_5 &= - \int d^3x \left(\frac{V^5}{120} - \frac{\dot{V}^5}{120} - \frac{V^3 \Delta V}{72} - \frac{V (\Delta V)(\Delta V)}{1260} + \frac{V^2 \Delta^2 V}{360} + \frac{V \Delta (V \Delta V)}{360} - \right. \\ & \quad \left. - \frac{V \Delta^2 V^2}{840} - \frac{V \Delta^3 V}{1680} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_6 = \int d^3x & \left[\frac{V^6}{720} - \frac{\overset{\circ}{V}^6}{720} - \frac{V^4 \Delta V}{288} - \frac{V(\Delta V)(\Delta V^2)}{1440} + \frac{V^3 \Delta^2 V}{2160} - \frac{(\Delta V)(\Delta V)(\Delta V)}{15120} - \right. \\
& - \frac{11V \Delta(V \Delta^2 V)}{30240} + \frac{V^2 \Delta(V \Delta V)}{1440} + \frac{V \Delta(V^2 \Delta V)}{1440} + \frac{V^2 \Delta^2 V^2}{5760} + \\
& + \frac{V \Delta(V \Delta V^2)}{1440} - \frac{13V^2 \Delta^3 V}{20160} + \frac{V \Delta(V \Delta^2 V)}{3780} - \\
& \left. - \frac{V \Delta^2(V \Delta V)}{3024} - \frac{V \Delta^3 V^2}{6048} + \frac{V \Delta^4 V}{30240} \right]. \tag{4.123}
\end{aligned}$$

$\Delta = \partial^2$ bezeichnet den Laplace-Operator.

Bei all diesen Schritten wurde von der Radialsymmetrie des Potentials kein Gebrauch gemacht. Diese also noch für ein beliebiges, kommutierendes Potential gültigen Formeln sind äquivalent zu den Formeln von Carson [57] und Fliegner et al. [59].

Jetzt kann man die Entwicklung auf die Potentiale aus Gleichung (4.14)

$$V = V_0 + \tilde{\eta} V_1 + \tilde{\eta}^2 V_2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \tag{4.124}$$

bzw. Gleichung (4.18)

$$\overset{\circ}{V} = \overset{\circ}{V}_0 + \tilde{\eta} \overset{\circ}{V}_1 + \tilde{\eta}^2 \overset{\circ}{V}_2 + \tilde{\eta}^3 \overset{\circ}{V}_3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \tag{4.125}$$

anwenden. Die Koeffizienten der Potentiale lauten im einzelnen:

$$V_0(\xi) = -6 \operatorname{sech}^2 \xi + 4, \tag{4.126}$$

$$V_1(\xi) = -4 \tanh \xi, \tag{4.127}$$

$$\begin{aligned}
V_2(\xi) = & \frac{2}{3} + \xi [4 \tanh \xi + 4 \sinh \xi \cosh \xi - (7 + 6 \log 2) \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi] - \\
& - \tanh \xi \log \cosh \xi (6\xi \operatorname{sech}^2 \xi + 4 \cosh \xi \sinh \xi + 6 \tanh \xi) - \\
& - (1 + 6 \log 2) \tanh^2 \xi - 4 \log 2 \sinh^2 \xi + \\
& + 6 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi T(\xi) \tag{4.128}
\end{aligned}$$

und

$$\overset{\circ}{V}_0(\xi) = 4, \tag{4.129}$$

$$\overset{\circ}{V}_1(\xi) = -4, \tag{4.130}$$

$$\overset{\circ}{V}_2(\xi) = -\frac{4}{3}, \tag{4.131}$$

$$\overset{\circ}{V}_3(\xi) = -\frac{10}{9}. \tag{4.132}$$

$T(\xi)$ ist die Stammfunktion $\int_0^\xi \xi' \tanh \xi' d\xi'$ (vgl. Gl. (3.72)). Die dritte Ordnung des freien Potentials entspricht dem asymptotischen Verhalten von V_3 und wird gebraucht, um die höchste Ordnung der Seeley-Entwicklung zu berechnen.

Da das Potential radialsymmetrisch ist, läßt sich die Winkelintegration in den Koeffizienten leicht ausführen. Sie ergibt einen Faktor 4π . Das Potential ist aber nicht um Null,

sondern um \tilde{R} zentriert, $\xi = \tilde{r} - \tilde{R}$. Dies muß bei der \tilde{r} -Integration und der Anwendung des Laplace-Operators beachtet werden. Partielle Integration, Substitution und Erweiterung des Integrationsbereichs analog der Berechnung der Wirkung in Abschnitt 3.3 führen auf die vier Terme

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \tilde{r}^2 dr f(\tilde{r} - \tilde{R}) &= -\frac{1}{3} \int_{-\tilde{R}}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^3 f'(\xi) \approx \\ &\approx -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^3 f'(\xi) - \tilde{R} \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^2 f'(\xi) - \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi f'(\xi) - \frac{1}{3} \tilde{R}^3 \int_{-\infty}^\infty d\xi f'(\xi), \end{aligned} \quad (4.133)$$

von denen je zwei verschwinden, wenn es sich, wie hier der Fall ist, bei der Ableitung $f'(\xi)$ entweder um eine gerade oder um eine ungerade Funktion handelt.

Wie man an Gleichung (4.126) bis Gleichung (4.128) sieht, sind die Koeffizienten des Potentials $V_i(\xi)$ in geraden Ordnungen in $\tilde{\eta}$ gerade und umgekehrt. Damit ist auch die in der Formel der Koeffizienten vorkommende Potenz des Potentials in gerader Ordnung gerade und umgekehrt (vgl. die Berechnung der Wirkung, S. 57).

Das Anwenden des Laplace-Operators verringert die \tilde{r} -Potenz, gleichzeitig ändert sich durch das Ableiten aber auch die Parität der abgeleiteten Funktion, so daß der Laplace-Operator die Parität des gesamten Integranden unverändert läßt.

Die in der nullten und zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ vorkommenden Integrale über gerade Funktionen lassen sich durch nochmalige partielle Integration wieder auf die Form

$$-\frac{1}{3} \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^3 f'(\xi) - \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi f'(\xi) = \int_{-\infty}^\infty d\xi \xi^2 f(\xi) + \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^\infty d\xi f(\xi) \quad (4.134)$$

bringen und sind dann genau das Zweifache der im Anhang C angegebenen Integrale.

In ungerader Ordnung liefern nur das zweite und das letzte Integral aus Gleichung (4.133) einen Beitrag. Das Integral proportional zu \tilde{R} findet sich in dieser Form wieder in Anhang C. Für das letzte Integral, dessen dritte Ordnung in $\tilde{\eta}$ noch zum konstanten Term der Koeffizienten beiträgt, da \tilde{R} reziprok proportional zu $\tilde{\eta}$ ist, vgl. Gl. (3.138), ist es ausreichend, die Asymptotik des Integranden zu kennen:

$$-\frac{\tilde{R}^3}{3} \tilde{\eta}^3 \int_{-\infty}^\infty d\xi f'(\xi) = -\frac{\tilde{R}^3}{3} \tilde{\eta}^3 f(\xi) \Big|_{-\infty}^\infty = -\frac{2}{3} \tilde{R}^3 \tilde{\eta}^3 f(\infty). \quad (4.135)$$

Die Asymptotik von V ist dabei durch $\overset{\circ}{V}$ gegeben, da das Potential in der Differenz gegen Null geht. Die in den höheren Koeffizienten vorkommenden Terme mit Laplace-Operatoren liefern zu diesen Termen dritter Ordnung keinen Beitrag, da die Ableitung einer asymptotisch konstanten Funktion im Unendlichen verschwindet.

Bei der Berechnung des sechsten Koeffizienten tauchen, ebenfalls bedingt durch den Laplace-Operator, Terme mit drei \tilde{r} -Potenzen im Nenner auf, so daß also auch nach Multiplikation mit \tilde{r}^2 ein Faktor $(\xi + \tilde{R})$ im Nenner übrig bleibt. Eine räumlich differenzierbare Funktion, die also insbesondere auch im Ursprung differenzierbar ist, läßt sich

aber in gerade, positive \tilde{r} -Potenzen entwickeln und ist also analytisch. Wendet man hierauf den Laplace-Operator $\Delta = \left(\frac{1}{\tilde{r}}\partial_{\tilde{r}}\tilde{r}\right)\left(\frac{1}{\tilde{r}}\partial_{\tilde{r}}\tilde{r}\right)$ an, so bekommt man wieder eine gerade Potenzreihe, insbesondere also, auch bei wiederholtem Anwenden des Laplace-Operators, keine singuläre Funktion. Die Integrale sollten also existieren. Das Auftreten der reziproken \tilde{r} -Potenz hier ist ein Artefakt der genäherten Bounce-Lösung, welche die Randbedingung, daß die Bounce-Lösung am Ursprung eine verschwindende Steigung hat, ja nur asymptotisch erfüllt. Die Funktion, über die integriert wird, ist aber nur in einem Bereich um \tilde{R} herum wesentlich von Null verschieden. Dieser Bereich ist deutlich kleiner als \tilde{R} . Damit läßt sich die künstliche Singularität ausschneiden, indem der Integrationsbereich auf ein Intervall um \tilde{R} eingeschränkt wird:

$$\int_0^\infty \frac{f(\tilde{r} - \tilde{R})}{\tilde{r}} d\tilde{r} \approx \int_{\tilde{R}-a}^{\tilde{R}+a} \frac{f(\tilde{r} - \tilde{R})}{\tilde{r}} d\tilde{r} = \int_{-a}^a \frac{f(\xi)}{\xi + \tilde{R}} d\xi. \quad (4.136)$$

In diesem Bereich läßt sich der Nenner nun in eine geometrische Reihe entwickeln:

$$\int_{-a}^a \frac{d\xi}{\xi + \tilde{R}} f(\xi) = \frac{1}{\tilde{R}} \int_{-a}^a \frac{d\xi}{(\xi/\tilde{R}) + 1} f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{\tilde{R}^{k+1}} \int_{-a}^a d\xi \xi^k f(\xi). \quad (4.137)$$

Da die \tilde{R} -Abhängigkeit in der Entwicklung vor die Integrale gezogen werden kann, ist dies eine Reihe in $\tilde{\eta}$, welche mit dem linearen Term anfängt, so daß bis zur hier berechneten Ordnung alle Beiträge vernachlässigt werden können. Zur Orientierung werden die Integrationen aber dennoch ausgeführt, und zwar numerisch, indem der Integrationsbereich wieder auf die gesamte Achse ausgedehnt wird. Der dabei gemachte Fehler ist exponentiell klein und numerisch nicht sichtbar. In dieser Entwicklung kommen, wenn f eine ungerade Funktion ist, nur gerade \tilde{R} -Potenzen vor. Dies ist in der nullten und zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ der Fall, in erster Ordnung kommen nur ungerade \tilde{R} -Potenzen vor.

Eine genaue Berechnung der ersten sechs Koeffizienten findet sich in Anhang D. Für die ersten beiden Koeffizienten ist die Rechnung bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ mit einschließlich dem zu \tilde{R}^3 proportionalen Term der dritten Ordnung wiedergegeben; da die Zahl der Terme aber sehr schnell ansteigt und das Prinzip dasselbe bleibt, beschränken sich die weiteren Ausführungen auf die konstante Ordnung in $\tilde{\eta}$. Für die höheren Ordnungen in $\tilde{\eta}$ werden dann nur die Ergebnisse angegeben. Sie wurden mit Hilfe von Mathematica [65] auf einer „IBM/RS6000“-Maschine berechnet.

Einsetzen des Ausdrucks für \tilde{R} (Gl. (3.138))

$$\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}} + \frac{2 - 3\pi^2}{36}\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (4.138)$$

in die durch Integration erhaltenen Koeffizienten (Gl. (D.11)) führt auf folgende Ausdrücke:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= \frac{112\pi}{3} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(82.6833 + 4\pi \left(\frac{4}{27} - \pi^2 \right) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_2 &= -\frac{160\pi}{3} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-287.022 + 8\pi \left(\frac{442}{3} + \pi^2 \right) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_3 &= \frac{832\pi}{15} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(1199.32 - \frac{16\pi(3698 + 99\pi^2)}{135} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_4 &= -\frac{11392\pi}{315} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-2564.51 + \frac{32\pi(399866 + 5535\pi^2)}{14175} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\
\mathcal{O}_5 &= \frac{3328\pi}{315} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(3579.95 - \frac{64\pi(2059174 + 16065\pi^2)}{99225} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\
\mathcal{O}_6 &= -\frac{49664\pi}{24255} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-3717.3 + \frac{128\pi(63822662 + 330675\pi^2)}{5457375} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2).
\end{aligned} \tag{4.139}$$

Auch hier bietet der andere Ansatz für \tilde{R} , $\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}}$, bei dem dann im Potential zusätzliche Terme proportional zu C_1 und D_1 auftauchen (vgl. Seite 61), wieder eine Kontrollmöglichkeit.

Man findet also für die Spur insgesamt den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_< &= \text{Tr}_< \left(e^{-Mt} - e^{-\hat{M}t} \right) = \\
&\frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \left[\frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left(\frac{112\pi}{3} t - \frac{160\pi}{3} t^2 + \frac{832\pi}{15} t^3 - \frac{11392\pi}{315} t^4 + \frac{3328\pi}{315} t^5 - \frac{49664\pi}{24255} t^6 + \dots \right) + \right. \\
&+ \left. \left(-39.4801 t + 372.46 t^2 - 541.384 t^3 + 658.823 t^4 - 913.886 t^5 + 1225.92 t^6 - \dots \right) \right. \\
&\left. + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right].
\end{aligned} \tag{4.140}$$

Abbildung 4.1 zeigt die Spur als Funktion von t , wobei jeweils eine unterschiedliche Anzahl n von Koeffizienten in der Seeley–Entwicklung berücksichtigt wird. Für t -Werte kleiner als 0.8 verändert sich die Spur bei Hinzunahme von höheren Koeffizienten kaum noch.

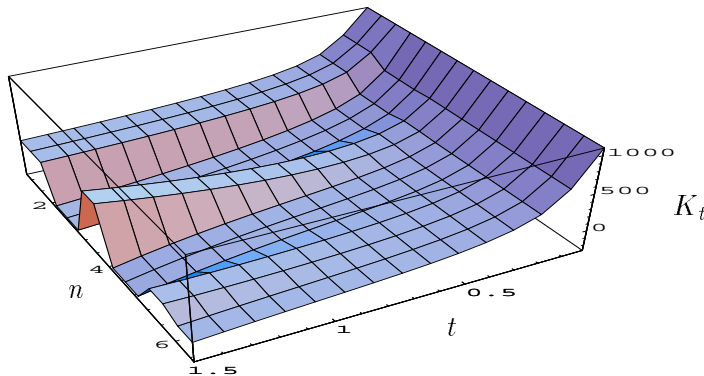


Abbildung 4.1: Die Spur als Funktion von t für $\tilde{\eta} = 0.1$, wobei jeweils eine unterschiedliche Anzahl n von Koeffizienten in der Seeleyentwicklung mitgenommen wird.

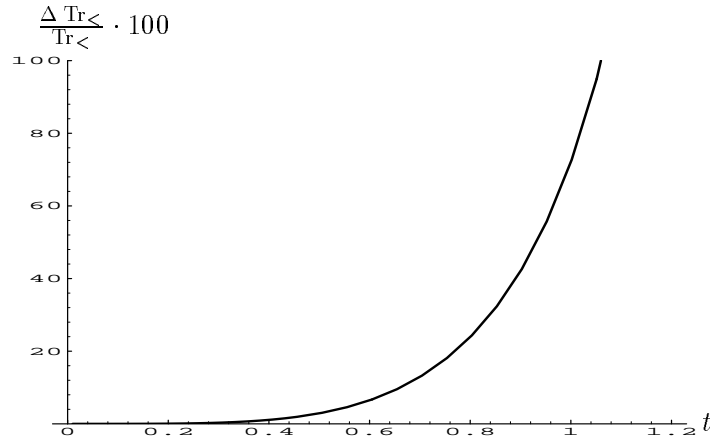


Abbildung 4.2: Prozentualer, relativer Fehler bei der Berücksichtigung von vier statt sechs Koeffizienten in der Seeley-Entwicklung für $\tilde{\eta} = 0.1$.

In Abbildung 4.2 ist die Differenz zwischen der mit sechs und der mit vier Koeffizienten ausgewerteten Spur, bezogen auf die mit sechs Koeffizienten ausgewertete Spur als prozentualer, relativer Fehler für $\tilde{\eta} = 0.1$ aufgetragen. Wegen des alternierenden Vorzeichens wurden sechs mit vier Koeffizienten verglichen. Für $t = 0.8$ beträgt der Fehler 23.9 %.

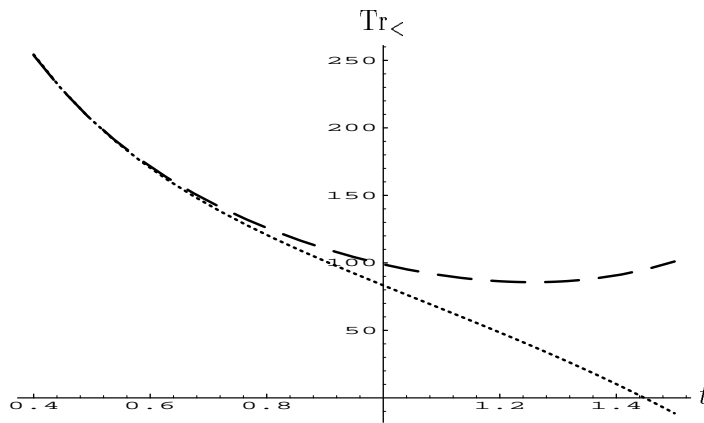


Abbildung 4.3: Die Seeley-Entwicklung bis zur sechsten Ordnung mit (—) und ohne (·····) die konstante Ordnung $\mathcal{O}(\tilde{\eta}^0)$ in den Koeffizienten für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Um den Einfluß der höheren Ordnungen in $\tilde{\eta}$ abzuschätzen, ist in Abbildung 4.3 die Spur $\text{Tr}_<$ einmal nur unter Berücksichtigung der führenden Terme $\mathcal{O}(1/\tilde{\eta}^2)$ und dann unter Hinzunahme der Terme $\mathcal{O}(\tilde{\eta}^0)$ aufgetragen. In der Seeley-Entwicklung werden beide Male die ersten sechs Koeffizienten mitgenommen. Hier findet man eine ungefähre Übereinstimmung für $t < 0.7$. Abbildung 4.4 zeigt den zugehörigen, prozentualen Fehler.

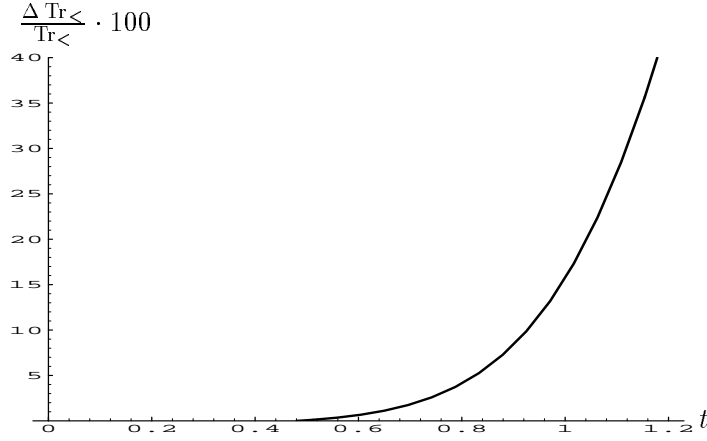


Abbildung 4.4: Prozentualer Fehler bei Vernachlässigung der Korrekturen $\mathcal{O}(\tilde{\eta}^0)$ in den Koeffizienten der Seeley–Entwicklung für $\tilde{\eta} = 0.1$.

4.3.4 Entwicklung nach Kugelflächen- und Besselfunktionen

Da das spezielle Potential, für das die Spur der Heat kernel berechnet werden soll, radialsymmetrisch ist, kann man die Lösung auch direkt in Kugelkoordinaten ansetzen. Der Operator M (Gl. (4.87)) lautet in Kugelkoordinaten

$$M = -\partial^2 + \hat{V}(\tilde{r}) = -\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{L^2}{\tilde{r}^2} + \hat{V}(\tilde{r}). \quad (4.141)$$

Dabei ist L^2 das Quadrat des Drehimpulsoperators. Dieser enthält die gesamte Winkelabhängigkeit. Da man die Eigenfunktionen zu L^2 — nämlich die Kugelflächenfunktion —

$$L^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (4.142)$$

kennt, kann man das Problem eventuell auf ein eindimensionales, nur von \tilde{r} abhängiges Problem reduzieren. Die Eigenfunktionen zum \tilde{r} -abhängigen Teil des freien Operators sind die sphärischen Besselfunktionen:

$$\left[\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} - \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} \right] j_l(k\tilde{r}) = -k^2 j_l(k\tilde{r}). \quad (4.143)$$

Man sieht dies durch direktes Umformen der Besselschen Differentialgleichung [66, Gl. 10.1.1] mit $\rho = k\tilde{r}$:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] j_l(\rho) = 0. \quad (4.144)$$

Die (normierten) Produkte aus Besselfunktionen und Kugelflächenfunktionen

$$\Psi_{klm}(\tilde{r}, \Omega) = \frac{2k}{\sqrt{2\pi}} j_l(k\tilde{r}) Y_{lm}(\Omega) \quad (\text{ohne Summenkonvention}) \quad (4.145)$$

bilden ein vollständiges Orthonormalsystem [67, S. 305]:

$$\int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \Psi_{klm}(\tilde{r}, \vartheta, \varphi) \Psi_{klm}^*(\tilde{r}', \vartheta', \varphi') = \frac{1}{\tilde{r}^2 \sin \vartheta} \delta(\tilde{r} - \tilde{r}') \delta(\vartheta - \vartheta') \delta(\varphi - \varphi')$$

$$\int \tilde{r}^2 d\tilde{r} d\Omega \Psi_{klm}(\tilde{r}, \Omega) \Psi_{k'l'm'}^*(\tilde{r}, \Omega) = \delta(k - k') \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (4.146)$$

so daß man die Spur von $e^{-M(\tilde{r})t}$ hiernach entwickeln kann:

$$\text{Tr} e^{-M(\tilde{r})t} = \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \int d\Omega \Psi_{klm}^*(\tilde{r}, \Omega) e^{-M(\tilde{r})t} \Psi_{klm}(\tilde{r}, \Omega). \quad (4.147)$$

Die Kugelflächenfunktionen vertauschen mit den Besselfunktionen, weiter vertauscht L^2 mit den restlichen Termen aus M , so daß man unter Ausnutzung der Eigenwertgleichung für die Winkelabhängigkeit Gl. (4.142) die Kugelflächenfunktion nach vorne ziehen kann:

$$\text{Tr} e^{-M(\tilde{r})t} = \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \int d\Omega \frac{2k}{\sqrt{2\pi}} j_l(k\tilde{r}) Y_{lm}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega) e^{-M_l(\tilde{r})t} \frac{2k}{\sqrt{2\pi}} j_l(k\tilde{r}). \quad (4.148)$$

Da die Besselfunktionen reell sind, stimmen sie mit ihrem konjugiert Komplexem überein. M_l ist der Operator, in dem der Drehimpulsoperator L^2 durch seinen Eigenwert ersetzt wurde:

$$M_l = -\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} + \hat{V}(\tilde{r}). \quad (4.149)$$

Die Winkelintegration läßt sich jetzt aufgrund der Orthogonalitätsrelation der Kugelflächenfunktionen

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^*(\Omega) Y_{lm}(\Omega) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (4.150)$$

ausführen:

$$\text{Tr} e^{-M(\tilde{r})t} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dk k^2 \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^l \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 j_l(k\tilde{r}) e^{-M_l(\tilde{r})t} j_l(k\tilde{r}). \quad (4.151)$$

Damit ist im Summanden aber die m -Abhängigkeit verschwunden und die Summe über m ergibt genau den Entartungsgrad $(2l+1)$:

$$\text{Tr} e^{-M(\tilde{r})t} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dk k^2 \sum_{l=0}^\infty (2l+1) \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 j_l(k\tilde{r}) e^{-M_l(\tilde{r})t} j_l(k\tilde{r}). \quad (4.152)$$

Analog zur Rechnung Gl. (4.92) in den kartesischen Koordinaten möchte man jetzt $j_l(k\tilde{r})$ und $e^{-M_l(\tilde{r})t}$ vertauschen. Dazu entwickelt man $e^{-M_l(\tilde{r})t}$ wieder bis zum linearen

Term und betrachtet den folgenden, noch auf eine Funktion anzuwendenden Operator:

$$\begin{aligned}
(1 - M_l(\tilde{r})t) j_l(k\tilde{r}) &= j_l(k\tilde{r}) - t \left(-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} + \hat{V} \right) j_l(k\tilde{r}) \\
&= j_l(k\tilde{r}) + t \left(\left(\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} j_l(k\tilde{r}) \right) + 2 \left(\frac{d}{d\tilde{r}} j_l(k\tilde{r}) \right) \frac{d}{d\tilde{r}} + j_l(k\tilde{r}) \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{2}{\tilde{r}} \left(\frac{d}{d\tilde{r}} j_l(k\tilde{r}) \right) + \frac{2}{\tilde{r}} j_l(k\tilde{r}) \frac{d}{d\tilde{r}} - \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} j_l(k\tilde{r}) - j_l(k\tilde{r}) \hat{V} \right) \\
&= j_l(k\tilde{r}) + t \left((-k^2) j_l(k\tilde{r}) + 2 \left(\frac{d}{d\tilde{r}} j_l(k\tilde{r}) \right) \frac{d}{d\tilde{r}} + j_l(k\tilde{r}) \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{2}{\tilde{r}} j_l(k\tilde{r}) \frac{d}{d\tilde{r}} - j_l(k\tilde{r}) \hat{V} \right). \tag{4.153}
\end{aligned}$$

In der letzten Zeile wurde die Besselsche Differentialgleichung Gl. (4.144) ausgenutzt. Ein entscheidender Unterschied zum kartesischen Fall liegt aber darin, daß die ebene Welle dort sowohl Eigenfunktion zur ersten, wie auch zur zweiten Ableitung ist, während $j_l(k\tilde{r})$ nur zu $\left[\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} - \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} \right]$ Eigenfunktion ist. Daher kann man den zweiten Term in der Klammer, proportional zu $\frac{dj_l(k\tilde{r})}{d\tilde{r}}$, nicht weiter vereinfachen und $j_l(k\tilde{r})$ nicht wie gewünscht nach vorne ziehen. Findet man keinen anderen Weg, um die l -Summation oder eines der Integrale weiter auszuführen, so läßt sich das Verfahren nicht anwenden.

Im Falle des freien Laplace-Operator läßt sich die l -Summation ausführen und die Richtigkeit der Rechnung so überprüfen: Sei also $M = -\partial^2$. Dann folgt direkt aus der Besselschen Differentialgleichung Gl. (4.144):

$$e^{-M_l t} j_l(k\tilde{r}) = e^{-\Delta_l t} j_l(k\tilde{r}) = e^{-k^2 t} j_l(k\tilde{r}), \tag{4.154}$$

und die l -Summation wird nach Formel 10.1.50 aus [66]

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l^2(z) = 1 \tag{4.155}$$

ausführbar. Gleichung (4.152) wird zu:

$$\begin{aligned}
\text{Tr } e^{-(\partial^2 t)} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dk k^2 \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 e^{-k^2 t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l^2(k\tilde{r}) \\
&= 4\pi \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\infty} dk k^2 e^{-k^2 t} \\
&= 4\pi \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}}. \tag{4.156}
\end{aligned}$$

Dies ist, wie erwartet, der erste Term der Seeley-Entwicklung. In dem Ergebnis Gl. (4.140) taucht dieser Term nicht auf, da er sich in der Differenz der beiden Spuren gerade weghebt.

Zum Vergleich berechnet man jetzt die Spur des Heat kernels des freien Laplace-Operators in kartesischen Koordinaten analog zu Abschnitt (4.3.3). Der Ausdruck $\delta M = M - 2ip_\mu \partial_\mu = -\partial^2 - 2ip_\mu \partial_\mu$ enthält jetzt aber nur noch Ableitungen, so daß $e^{-\delta M t}$

angewandt auf die Einheitsfunktion gleich Eins ist. Damit wird Gleichung (4.95) zu

$$\mathrm{Tr} e^{-(\Delta t)} = \int d^3x \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{-p^2 t} \cdot \mathbb{1} = \int d^3x \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}}. \quad (4.157)$$

Dies stimmt mit dem Ergebnis in Kugelkoordinaten Gl. (4.156) überein.

4.4 Dimensionelle Regularisierung — Berechnung von $I'_<$

In der Schwingerschen Eigenzeitdarstellung bekommt man den Logarithmus der Determinante durch Integration über die Spur der Heat kernel (Gl. (4.40)):

$$I_< = - \int_0^\Lambda \frac{dt}{t} \mathrm{Tr}_<, \quad (4.158)$$

welche im Hochfrequenzbereich, also für kleine t , durch die Seeley–Entwicklung Gl. (4.140) genähert wird. In der Formel für die Übergangsamplitude Gl. (2.107) kommt aber nur das Verhältnis der Determinanten I' ohne Nullmoden und ohne negative Mode vor, da diese in der Sattelpunktentwicklung gesondert behandelt werden müssen (vgl. die Abschnitte 2.5.1 und 2.6). Diese Moden werden hier jetzt explizit aus der Spur wieder herausgenommen, indem die exponierten Eigenwerte von $\mathrm{Tr}_<$ abgezogen werden. Im einzelnen sind dies drei, den räumlichen Translationen entsprechende Nullmoden, welche alle mit $\omega_{01} = 0$ bezeichnet werden und eine die Metastabilität verursachende negative Mode $\omega_{00} = -2\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)$. Sie wird in Abschnitt 4.5 berechnet werden. Damit die Zahl der Eigenwerte in beiden Determinanten dieselbe ist, hat man in Abschnitt 4.1 auch aus $\det \overset{\circ}{M}$ die vier niedrigsten Eigenwerte $\overset{\circ}{\omega}_0 = 4 - 4\tilde{\eta} - \frac{4}{3}\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3)$ (vgl. Gl. (4.204)) herausgezogen. Diese acht Moden werden jetzt explizit von der Spur der Heat kernel abgezogen:

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}'_< &= \mathrm{Tr}' e^{-tM} - \mathrm{Tr}' e^{-t\overset{\circ}{M}} \\ &= \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 t^n \mathcal{O}_n - 3 e^{-0t} - e^{t2\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)} + 4 e^{-t\overset{\circ}{\omega}_0}. \end{aligned} \quad (4.159)$$

Das Integral in Gleichung (4.158) enthält im Limes kleiner t Ultraviolettdivergenzen und ist deshalb nur symbolisch zu verstehen. Es muß noch regularisiert werden, was in diesem Abschnitt dimensionell geschehen soll. Dazu wird die Seeley–Entwicklung in $D = 3 - \epsilon$ Dimensionen berechnet.

4.4.1 Seeley–Entwicklung in $D = 3 - \epsilon$ Dimensionen

Die Berechnung der Seeley–Entwicklung aus Abschnitt 4.3.3 läßt sich analog auf D Dimensionen übertragen, indem man nach D –dimensionalen Wellen entwickelt. Das Ergebnis der Impulsintegration ist in Gleichung (4.106) bereits für D Dimensionen angegeben. Insbesondere wird in der Seeley–Entwicklung aus dem Faktor $1/(4\pi t)^{3/2}$ ein Faktor $1/(4\pi t)^{D/2}$.

Die restliche Dimensionsabhängigkeit steckt in den Koeffizienten Gl. (4.114), welche in D Dimensionen wie folgt lauten:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= \int d^D x \left(V - \mathring{V} \right) \quad \text{und für } n \geq 2 \\ \mathcal{O}_n &= (-)^n \int d^D x \left[\left(\sum_{m=0}^{n-2} \frac{2^m}{(m+n)!} \frac{1}{m!} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^D V \left\{ \partial_{\mu_1}^2 \cdots \partial_{\mu_m}^2 M^{n-m-2} \right\} V \right) - \frac{\mathring{V}^n}{n!} \right]. \end{aligned} \quad (4.160)$$

Auch hier wird man wieder gleiche Ableitungen zum radialsymmetrischen Laplace-Operator zusammenfassen. Dieser lautet in $D = 3 - \epsilon$ Dimensionen:

$$\Delta_{\tilde{r}} = \frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{D-1}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} = \Delta_{\tilde{r}}|_{D=3} - \frac{\epsilon}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}}. \quad (4.161)$$

Nun muß man eine Fallunterscheidung bezüglich der Metrik machen, je nachdem, ob die zusätzlichen ϵ Dimensionen flach oder gekrümmt sind. Falls sie gekrümmt sind, schreibt sich das D -dimensionale Integral über eine Funktion $f(\tilde{r})$ als

$$\int d^D \tilde{x} f(\tilde{r}) = S^D \int d\tilde{r} \tilde{r}^{D-1} f(\tilde{r}). \quad (4.162)$$

Dabei ist $S^D \tilde{r}^{D-1}$ die Oberfläche einer D -dimensionalen Kugel. Den Term \tilde{r}^{D-1} entwickelt man nach Potenzen von ϵ :

$$\tilde{r}^{D-1} = \tilde{r}^2 e^{-\epsilon \log \tilde{r}} = \tilde{r}^2 \sum_k \frac{1}{k!} \epsilon^k (-\log \tilde{r})^k. \quad (4.163)$$

Damit bekommt man für das D -dimensionale Integral im Fall der gekrümmten zusätzlichen Dimensionen:

$$\begin{aligned} \int d^D x f(\tilde{r}) &= \\ S^D \int d\tilde{r} \tilde{r}^2 f(\tilde{r}) &+ \epsilon S^D \int d\tilde{r} \tilde{r}^2 (-\log \tilde{r}) f(\tilde{r}) + \epsilon^2 \frac{S^D}{2} \int d\tilde{r} \tilde{r}^2 (-\log \tilde{r})^2 f(\tilde{r}) + \dots \end{aligned} \quad (4.164)$$

Die auftretenden Integrale haben die Form $\int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \log^k \tilde{r} \operatorname{sech}^n \tilde{r} \sinh^m \tilde{r}$ und konvergieren, wie durch Grenzwertbetrachtungen gezeigt werden kann.

Wenn die zusätzlichen Dimensionen dagegen flach sind, wird das D -dimensionale Integral zu

$$\int d^D \tilde{x} f(\tilde{r}) = 4\pi \int d\tilde{r} \tilde{r}^2 \int d^{D-3} \tilde{x} f(\tilde{r}) = \bar{L}^{D-3} 4\pi \int d\tilde{r} \tilde{r}^2 f(\tilde{r}). \quad (4.165)$$

Der einem endlichen Volumen entsprechende Faktor \bar{L}^{D-3} kommt aus der Kompaktifizierung der zusätzlichen Dimensionen und muß sich nachher wegheben. Auch hier sieht man die ϵ -Abhängigkeit, indem man den Term \bar{L}^{D-3} taylorentwickelt:

$$\bar{L}^{D-3} = e^{-\epsilon \log \bar{L}} = 1 - \epsilon \log \bar{L} + \frac{\epsilon^2}{2} \log^2 \bar{L} - \dots \quad (4.166)$$

In beiden Fällen findet man also für die Koeffizienten Ausdrücke der Form

$$\mathcal{O}_n = \mathcal{O}_n^0 + \epsilon \mathcal{O}_n^1 + \epsilon^2 \mathcal{O}_n^2 + \dots \quad (4.167)$$

\mathcal{O}_n^0 ist dabei der durch gewöhnliche dreidimensionale Integration im Anhang D berechnete Koeffizient. Die Ausdrücke für die höheren Ordnungen \mathcal{O}_n^m , $m \geq 1$ unterscheiden sich je nach Topologie des Raumes. Eine genaue Berechnung ist aber nicht nötig, da sich diese Terme, wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, bis zur berechneten Ordnung wegheben werden.

4.4.2 Regularisierung

Betrachtet man das zu berechnende Integral (hier inklusive der niedrigsten Eigenwerte)

$$\begin{aligned} I_{<} &= - \int_0^\Lambda \frac{dt}{t} \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \frac{1}{t^{3/2}} (t\mathcal{O}_1 + t^2\mathcal{O}_2 + \dots) \\ &= - \frac{\mathcal{O}_1}{(4\pi)^{3/2}} \int_0^\Lambda \frac{dt}{t^{3/2}} - \frac{\mathcal{O}_2}{(4\pi)^{3/2}} \int_0^\Lambda \frac{dt}{t^{1/2}} - \dots, \end{aligned} \quad (4.168)$$

so sieht man, daß in drei Dimensionen nur der erste Term, proportional zu $\int_0^\Lambda \frac{dt}{t^{3/2}}$, Ultraviolett-divergent ist. Die Abspaltung dieser Divergenz beim $(D = 3 - \epsilon)$ -dimensionalen Integral liefert:

$$\begin{aligned} I_{<} &= - \int_0^\Lambda \frac{dt}{t} \left[\text{Tr}_{<|_{D=3}} - \Theta(1-t) \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \mathcal{O}_{1(D=3)} \right] + \mathcal{O}(\epsilon) - \\ &\quad - \int_0^1 \frac{dt}{t} \frac{1}{(4\pi t)^{D/2}} t \mathcal{O}_1. \end{aligned} \quad (4.169)$$

$\Theta(t)$ ist die Stufenfunktion. Das erste Integral konvergiert nach Konstruktion für $D = 3$. Um die Divergenzen des letzten Terms zu sehen, entwickelt man ihn nach Potenzen von ϵ .

Der Vorfaktor liefert:

$$\frac{1}{(4\pi)^{D/2}} = \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} e^{\frac{\epsilon}{2} \log(4\pi)} = \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \left(1 + \frac{\epsilon}{2} \log(4\pi) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right). \quad (4.170)$$

Die ϵ -Abhängigkeit von \mathcal{O}_1 ist im vorigen Abschnitt besprochen worden (Gl. (4.167)). Es fehlt noch die Berechnung des Integrals, welche sich für hinreichend kleines D leicht durchführen läßt:

$$\int_0^1 dt t^{-D/2} = \frac{1}{-D/2 + 1} t^{1-D/2} \Big|_0^1 = \frac{1}{-D/2 + 1} = \frac{2}{\epsilon - 1} = -2(1 + \epsilon + \epsilon^2 + \dots), \quad (4.171)$$

und durch diesen Ausdruck analytisch in die anderen Dimensionen fortgesetzt werden kann.

Damit lautet die abgezogene Divergenz aus Gleichung (4.169) bis zur Ordnung ϵ :

$$\begin{aligned}
-\int_0^1 \frac{dt}{t} \frac{1}{(4\pi t)^{D/2}} t \mathcal{O}_1 &= -\frac{-2}{(4\pi)^{3/2}} \left(1 + \frac{\epsilon}{2} \log(4\pi) + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right) \left(\mathcal{O}_1^0 + \epsilon \mathcal{O}_1^1 + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right) \cdot \\
&\quad \cdot \left(1 + \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right) \\
&= \frac{2}{(4\pi)^{3/2}} \left(\mathcal{O}_1^0 + \epsilon \left(\frac{1}{2} \log(4\pi) \mathcal{O}_1^0 + \mathcal{O}_1^0 + \mathcal{O}_1^1\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2)\right).
\end{aligned} \tag{4.172}$$

Trotz der vorhandenen UV-Divergenzen tauchen hier keine Pole in ϵ auf, an denen man die Divergenzen direkt ablesen könnte. Dies ist eine Eigenheit der dimensionellen Regularisierung in drei Dimensionen.

Für das zu berechnende Integral läßt sich nach Gleichung (4.34) für $\text{Re } z > 1$ auch eine Operator-Zetafunktion definieren:

$$\zeta_M(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} \text{Tr}(e^{-Mt} - e^{-\mathring{M}t}). \tag{4.173}$$

Sie läßt sich analytisch nach $z = 0$ fortsetzen, indem man in Analogie zu Gleichung (4.169) den divergenten Teil abspaltet:

$$\begin{aligned}
\zeta_M(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} \left\{ \text{Tr}_{<} -\Theta(1-t) \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \mathcal{O}_1 \right\} + \\
+ \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^1 dt t^{z-1} \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \mathcal{O}_1.
\end{aligned} \tag{4.174}$$

Auch hier existiert das erste Integral. Das Integral im letzten Term berechnet sich wieder durch analytische Fortsetzung zu

$$\int_0^1 dt t^{z-3/2} = \frac{1}{z - 1/2}, \tag{4.175}$$

so daß man hier für die abgespaltene Divergenz den Ausdruck

$$\frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^1 dt t^{z-1} \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \mathcal{O}_1 = \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{\mathcal{O}_1}{z - 1/2} \tag{4.176}$$

findet.

Der Logarithmus der Determinante berechnet sich nach Gleichung (4.28) als negative Ableitung der Zetafunktion an der Stelle Null. Unter Berücksichtigung der Beziehungen $(1/\Gamma(z))'|_{z=0} = 1$ und $1/\Gamma(0) = 0$ ergibt sich für die konvergente, erste Zeile aus Gleichung (4.174)

$$-\frac{d}{dz} \zeta'_M(z) \Big|_{z=0} = -\int_0^\Lambda \frac{dt}{t} \left\{ \text{Tr}_{<} -\Theta(1-t) \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \mathcal{O}_1 \right\} \tag{4.177}$$

in Übereinstimmung mit dem konvergenten Teil der dimensionell regularisierten Determinante $I_{<}$ aus Gleichung (4.169). Die Ableitung der in der Zetafunktion Gl. (4.174)

abgezogenen Divergenz Gl. (4.176) an der Stelle $z = 0$,

$$-\frac{d}{dz} \left(\frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^1 dt t^{z-1} \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} t \mathcal{O}_1 \right) \Big|_{z=0} = \frac{1}{(4\pi)^{(3/2)}} 2\mathcal{O}_1, \quad (4.178)$$

hebt sich gegen die in der dimensionellen Regularisierung abgezogene Divergenz Gl. (4.172) weg und man findet den wichtigen Zusammenhang zwischen den beiden Regularisierungen in drei Dimensionen:

$$I_{<} = - \frac{d}{dz} \zeta_M(z) \Big|_{z=0} + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (4.179)$$

In nullter Ordnung stimmen also beide Regularisierungen überein, es tauchen keine Korrekturterme auf. Dies ist eine Besonderheit der dimensionellen Regularisierung in ungeraden Dimensionen. Damit fallen aber auch, wie angekündigt, die Korrekturterme \mathcal{O}_n^i , $i \geq 1$ in höheren Ordnungen in ϵ in den Koeffizienten und also die Abhängigkeit von dem kompaktifiziertem Volumen im Fall der flachen zusätzlichen Dimensionen heraus. Insbesondere geht die Topologie der zusätzlichen Dimensionen nicht ein.

4.4.3 Berechnung der Zetafunktion

Die spezielle, zu dem hier interessierenden Operator gehörende Zetafunktion ohne die drei Nullmoden, die negative Mode und die vier niedrigsten Eigenwerte von \hat{M} ,

$$\zeta'_{<}(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} \left\{ \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \mathcal{O}_n t^n - 3 - e^{2t\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)} + 4 e^{-t\dot{\omega}_0} \right\}, \quad (4.180)$$

soll in diesem Abschnitt berechnet werden. Dieser Ausdruck ist allerdings nur für $\text{Re } z > 1$ definiert. Für solche z -Werte lassen sich die führenden Ordnungen der einzelnen Terme umformen:

$$\begin{aligned} \zeta'_{<}(z) &= \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \int_0^\Lambda dt t^{z-5/2+n} \mathcal{O}_n - \frac{3}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} - \\ &\quad - \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} e^{2t\tilde{\eta}^2} + \frac{4}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} e^{-\dot{\omega}_0 t} \\ &= \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \frac{1}{z-3/2+n} \Lambda^{z-3/2+n} \mathcal{O}_n - \frac{3}{\Gamma(z)} \frac{1}{z} \Lambda^z - \\ &\quad - \frac{(2\tilde{\eta}^2)^{-z}}{\Gamma(z)} \int_0^{2\tilde{\eta}^2 \Lambda} ds s^{z-1} (e^s - 1) - \frac{(2\tilde{\eta}^2)^{-z}}{\Gamma(z)} \int_0^{2\tilde{\eta}^2 \Lambda} ds s^{z-1} + \frac{4(\dot{\omega}_0)^{-z}}{\Gamma(z)} \gamma(z, \dot{\omega}_0 \Lambda) \\ &= \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \frac{\mathcal{O}_n}{z-3/2+n} \Lambda^{z-3/2+n} - 3 \frac{\Lambda^z}{\Gamma(z+1)} - \\ &\quad - \frac{(2\tilde{\eta}^2)^{-z}}{\Gamma(z)} \int_0^{2\tilde{\eta}^2 \Lambda} ds s^{z-1} (e^s - 1) - \frac{\Lambda^z}{\Gamma(z+1)} + 4 \Lambda^z \gamma^*(z, \dot{\omega}_0 \Lambda). \end{aligned} \quad (4.181)$$

Im letzten Term wurde die in Gleichung 6.5.4 in [66] definierte Funktion

$$\gamma^*(z, a) = \frac{a^{-z}}{\Gamma(z)} \gamma(z, a) \quad (4.182)$$

eingeführt. Das Integral im drittletzten Term in Gleichung (4.181) ist reell und insbesondere auch an der Stelle $z = 0$ endlich, da der divergente Term abgezogen wurde. Auch die anderen Terme existieren in dieser integrierten Form für $z = 0$. Damit ist die analytische Fortsetzung gefunden.

Die Ableitung an der Stelle Null ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
\left. \frac{d}{dz} \zeta'_<(z) \right|_{z=0} &= \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_n}{n-3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} - 4 \log \Lambda + 4 \frac{\Gamma'(1)}{\Gamma^2(1)} \Lambda^0 - \\
&\quad - \int_0^{2\tilde{\eta}^2 \Lambda} ds \frac{e^s - 1}{s} + 4 \log \Lambda \gamma^*(0, \dot{\omega}_0 \Lambda) + 4 \Lambda^0 \left. \frac{\partial}{\partial z} \gamma^*(z, \dot{\omega}_0 \Lambda) \right|_{z=0} \\
&= \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_n}{n-3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} - 4 \log \Lambda - 4\gamma - \\
&\quad - \text{Ei}(2\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \log(2\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \gamma + 4 \log \Lambda + 4 \text{Ei}(-\dot{\omega}_0 \Lambda) - 4 \log(\dot{\omega}_0 \Lambda).
\end{aligned} \tag{4.183}$$

$\gamma = -\Gamma'(1) = 0.57721$ ist die Eulersche Konstante. Das Integral im vierten Term steht z.B. in [66, Gl. 5.1.40]. Dort findet man auch Ausdrücke für den Wert von $\gamma^*(0, a)$ [66, Gl. 6.5.14]:

$$\gamma^*(-n, a) = a^n \Rightarrow \gamma^*(0, a) = 1 \tag{4.184}$$

und dessen Ableitung an der Stelle Null [66, Gl. 6.5.24]:

$$\left(\frac{\partial \gamma^*(z, a)}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = \text{Ei}(-a) - \log a. \tag{4.185}$$

Damit ist der hochfrequente Teil der Fluktuationsdeterminante als negative Ableitung der Zetafunktion an der Stelle Null berechnet:

$$\begin{aligned}
I'_< &= -\frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_n}{n-3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} + \\
&\quad + 3\gamma + \text{Ei}(2\tilde{\eta}^2 \Lambda) - \log(2\tilde{\eta}^2) + 4 \log(\dot{\omega}_0 \Lambda) - 4 \text{Ei}(-\dot{\omega}_0 \Lambda).
\end{aligned} \tag{4.186}$$

Die Koeffizienten der Seeley–Entwicklung Gl. (4.140) enthalten reziprok quadratische $\tilde{\eta}$ –Potenzen (mit den Koeffizienten $\mathcal{O}_{n,-2}$), konstante Terme (mit Koeffizienten $\mathcal{O}_{n,0}$) und Korrekturen quadratischer Ordnung in $\tilde{\eta}$. Die Entwicklung des Exponentialintegrals steht in Gleichung (4.254). Aus der Entwicklung der Eigenwerte des freien Operators $\dot{\omega}_0$ bekommt man noch lineare Terme in $\tilde{\eta}$. Die restlichen Korrekturen, wie die höheren Ordnungen aus dem negativen Eigenwert oder aus der Seeley–Entwicklung, sind mindestens quadratisch in $\tilde{\eta}$. Als Entwicklung nach $\tilde{\eta}$ findet man also:

$$\begin{aligned}
I'_< &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left(-\frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_{n,-2}}{n-3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} \right) + \\
&\quad + \left(-\frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_{n,0}}{n-3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} + 4\gamma + \log \Lambda + 4 \log(4\Lambda) + 4\Gamma(0, 4\Lambda) \right) + \\
&\quad + \tilde{\eta} \left(4(e^{-4\Lambda} - 1) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2).
\end{aligned} \tag{4.187}$$

4.4.4 Berechnung der Dimension der Determinante

Im Abschnitt 4.1 wurde eine noch nicht berechnete Größe u eingeführt, welche den Unterschied in den Dimensionen der Operatoren angibt und beim Herausziehen eines Faktors λ als Exponent auftritt (vgl. Gl. (4.10)):

$$\frac{\det \lambda M}{\det \lambda \overset{\circ}{M}} = \lambda^u \frac{\det M}{\det \overset{\circ}{M}}. \quad (4.188)$$

Logarithmieren dieser Beziehung führt auf

$$\log \frac{\det \lambda M}{\det \lambda \overset{\circ}{M}} - \log \frac{\det M}{\det \overset{\circ}{M}} = u \log \lambda. \quad (4.189)$$

Die linke Seite läßt sich wie gehabt als Ableitung der zugehörigen Zetafunktion berechnen:

$$\begin{aligned} \log \frac{\det \lambda M}{\det \lambda \overset{\circ}{M}} - \log \frac{\det M}{\det \overset{\circ}{M}} &= -\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} (\operatorname{Tr} e^{-\lambda t M} - \operatorname{Tr} e^{-\lambda t \overset{\circ}{M}}) \right]_{z=0} + \\ &+ \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} (\operatorname{Tr} e^{-t M} - \operatorname{Tr} e^{-t \overset{\circ}{M}}) \right]_{z=0}. \end{aligned} \quad (4.190)$$

Nach der Substitution $\tilde{t} = \lambda t$ lassen sich beide Terme zusammenfassen:

$$\begin{aligned} &-\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\Gamma(z)} \left(\int_0^\infty d\tilde{t} \tilde{t}^{z-1} \frac{1}{\lambda^z} (\operatorname{Tr} e^{-\tilde{t} M} - \operatorname{Tr} e^{-\tilde{t} \overset{\circ}{M}}) - \int_0^\infty dt t^{z-1} (\operatorname{Tr} e^{-t M} - \operatorname{Tr} e^{-t \overset{\circ}{M}}) \right) \right]_{z=0} \\ &= -\frac{d}{dz} \left[(\lambda^{-z} - 1) \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} (\operatorname{Tr} e^{-t M} - \operatorname{Tr} e^{-t \overset{\circ}{M}}) \right]_{z=0} \\ &= -\frac{d}{dz} [(\lambda^{-z} - 1) \zeta_M(z)]_{z=0} \\ &= - \left[-\log \lambda \lambda^{-z} \zeta_M(z) + (\lambda^{-z} - 1) \frac{d}{dz} \zeta_M(z) \right]_{z=0} \\ &= \zeta_M(0) \log \lambda \stackrel{!}{=} u \log \lambda. \end{aligned} \quad (4.191)$$

Die dabei auftretende Zetafunktion $\zeta_M(z)$ zur Differenz der Operatoren M und $\overset{\circ}{M}$ läßt sich wie in Abschnitt 4.4.3 analytisch fortsetzen, indem man die Divergenz abspaltet:

$$\begin{aligned} \zeta(z) &= \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} \left[(\operatorname{Tr} e^{-t M} - \operatorname{Tr} e^{-t \overset{\circ}{M}}) - \Theta(\Lambda - t) \frac{\mathcal{O}_1}{(4\pi)^{3/2}} t^{-1/2} \right] \\ &+ \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \frac{1}{\Gamma(z)} \mathcal{O}_1 \frac{\Lambda^{z-1/2}}{z - 1/2}. \end{aligned} \quad (4.192)$$

Da die Ableitung der Zetafunktion an der Stelle $z = 0$ endlich ist, verschwindet der Term proportional zu $(\lambda^{-z} - 1)$ in der vorletzten Zeile von Gleichung (4.191). An der Stelle $z = 0$ nimmt aber die Zetafunktion selber auch den Wert Null an, so daß man zusammen mit der rechten Seite von Gleichung (4.189) die Gleichheit

$$u \log \lambda = 0 \cdot \log \lambda = 0 \quad (4.193)$$

bekommt, also wie in Gleichung (4.11) vorweggenommen

$$u = 0. \quad (4.194)$$

4.5 Die niedrigsten Eigenwerte — Heat kernel für große t

Der Niederfrequenz-Anteil, also der Teil der Determinante für große t , wird von den niedrigsten Eigenwerten dominiert. Um sie zu bestimmen hat man folgende (dimensionslose) Eigenwertgleichungen zu lösen:

$$[-\partial^2 + \hat{V}(\tilde{r})]\Psi_n = \omega_n \Psi_n \quad \text{und} \quad [-\partial^2 + \hat{V}]\hat{\Psi}_n = \hat{\omega}_n \hat{\Psi}_n. \quad (4.195)$$

Die Potentiale \hat{V} und \hat{V} sind dabei in Gleichung (4.14) und Gleichung (4.18) angegeben. Mit Hilfe des Ausdrucks

$$-\Delta = -\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{L^2}{\tilde{r}^2} \quad (4.196)$$

für den Laplace-Operator schreibt man die Eigenwertgleichung nun in Kugelkoordinaten um. Die Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ sind dann die Eigenfunktionen zu dem die Winkelabhängigkeit beinhaltenden Drehimpulsoperatorquadrat L^2 mit den Eigenwerten $l(l+1)$. Für den Radialteil $v_{n,l}$ der Eigenfunktion findet man für den Operator M die Eigenwertgleichung

$$\left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} + \beta^2 \hat{V}(\tilde{r}) \right] v_{n,l}(\tilde{r}) = \omega_n v_{n,l}(\tilde{r}), \quad (4.197)$$

analog für \hat{M} . Aus der allgemeinen Theorie (vgl. Abschnitt 2.5) weiß man, daß es für diesen Operator genau eine negative Mode ω_{00} und drei Nullmoden ω_{01} geben muß.

Die Nullmoden gehören zu den Translationen in den drei Raumrichtungen:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{x}} &= \sin \vartheta \cos \varphi \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} = (Y_{11} + Y_{1-1}) \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}, \\ \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{y}} &= \sin \vartheta \sin \varphi \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} = (Y_{11} - Y_{1-1}) \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}, \\ \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{z}} &= \cos \vartheta \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} = Y_{10} \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}. \end{aligned} \quad (4.198)$$

Dabei ist $\tilde{\Phi}$ die exakte, dimensionslose Bounce-Lösung, hier aber als Funktion von \tilde{r} und nicht von ξ . Analog zu Gleichung (2.55) läßt sich obige Behauptung durch explizites Ableiten der Euler-Lagrange Gleichung (Gl. (3.16)) bestätigen:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tilde{r}} \left[-\frac{d^2\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} + U'(\tilde{\Phi}) \right] &= \frac{d}{d\tilde{r}} 0 \\ \Leftrightarrow \left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{2}{\tilde{r}^2} + U'' \right] \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} &= 0. \end{aligned} \quad (4.199)$$

Der Vergleich mit Gleichung (4.197) zeigt, daß die drei Nullmoden ω_{01} zu $l=1$ gehören, was durch den zweiten Index gekennzeichnet wird. Der erste Index gibt den Eigenwert in der ungestörten Theorie an. Diese drei Eigenwerte ω_{01} sind gleichzeitig auch alle Nullmoden.

Man erwartet nun, daß die negative Mode ω_{00} zu $l = 0$ gehört und damit nicht entartet ist. Dies wird durch die Eigenwertgleichung Gl. (4.197) bestätigt, wenn man für kleine l -Werte die Eigenfunktionen in der Thin wall approximation durch $\frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}$ nähert:

$$\begin{aligned} \left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} + U''(\tilde{\Phi}) \right] \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} &\approx \\ \left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{2}{\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{R}^2} + \frac{l(l+1)}{\tilde{R}^2} + U''(\tilde{\Phi}) \right] \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}} &= \\ \left[0 + \frac{l(l+1) - 2}{\tilde{R}^2} \right] \frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}. & \end{aligned} \quad (4.200)$$

In der zweiten Zeile ist \tilde{r} in zwei Termen durch \tilde{R} genähert worden, da $\frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}$ nur für $\tilde{r} \approx \tilde{R}$ wesentlich von Null verschieden ist. Die ersten drei und der letzte Term liefern angewandt auf $\frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}$ gerade den Eigenwert Null (vgl. Gl. (4.199)), und man bekommt einen l -abhängigen Eigenwert. Für $l = 0$ wird der Eigenwert tatsächlich negativ:

$$\omega_{00} = \frac{0(0+1) - 2}{\tilde{R}^2} = -\frac{2}{\tilde{R}^2} = -2\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4), \quad (4.201)$$

für $l = 1$ reproduziert sich die Nullmode ω_{01} .

Wie zu erwarten ist, geht der negative Eigenwert für verschwindendes $\tilde{\eta}$ gegen Null. Dies entspricht dem Sachverhalt, daß es, wenn beide Minima gleich tief sind, keinen metastabilen Zustand und damit auch keinen negativen Eigenwert gibt. Die Tatsache, daß in dem Ausdruck für \tilde{R} (Gl. (3.138)) nur ungerade $\tilde{\eta}$ -Potenzen vorkommen, legt die Vermutung nahe, daß die Korrekturen zum Eigenwert nur von gerader Ordnung in $\tilde{\eta}$ sind. Dies läßt sich durch Symmetrieüberlegungen bestätigen (vgl. Seite 105).

Wie an Gleichung (4.200) auch zu sehen ist, bekommt man für die verschiedenen l -Werte ein ganzes „Band“ um Null herum. So hat $\frac{d\tilde{\Phi}}{d\tilde{r}}$ für $l = 2$ den 5-fach entarteten Eigenwert $\omega_{02} = \frac{4}{\tilde{R}^2}$, für $l = 3$ den 7-fach entarteten Eigenwert $\omega_{03} = \frac{10}{\tilde{R}^2}$ etc., welche für $\tilde{\eta} \rightarrow 0$ alle gegen Null gehen. Sie entsprechen stabilen Verzerrungen der Blase.

Ein weiteres solches Band liegt um den ungestörten Eigenwert 3 herum. Auch diese Eigenwerte spalten in der Ordnung $\tilde{\eta}^2$ mit l auf, wie im nächsten Abschnitt mittels Störungstheorie gezeigt werden wird (Gl. (4.237)). Sie entsprechen Veränderungen im Oberflächenprofil.

Die Eigenwerte des kontinuierlichen Spektrums $\omega_k = k^2 + 4$ (vgl. Gl. (4.211)) gehören zu durch Störungen nahe der Oberfläche bedingten Fluktuationen der freien Energie.

Diese drei Sorten von Eigenwerten sind auch in [32] zu finden, allerdings ist dort der letzte angegebene Term von derselben Ordnung wie der angegebene Fehler.

Für den freien Operator schließlich hat man nach Gleichung (4.19) bis Gleichung (4.22) die Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} [-\partial^2 + \overset{\circ}{V}] \overset{\circ}{\Psi}_k &= \overset{\circ}{\omega}_k \overset{\circ}{\Psi}_k \\ \Leftrightarrow \left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} \right] \overset{\circ}{v}_k(\tilde{r}) &= \left(\overset{\circ}{\omega}_k - 4 + 4\tilde{\eta} + \frac{4}{3}\tilde{\eta}^2 + \frac{10}{9}\tilde{\eta}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \right) \overset{\circ}{v}_k(\tilde{r}) \end{aligned} \quad (4.202)$$

zu betrachten. Diese ist aber äquivalent zur Besselschen Differentialgleichung (vgl. Gl. (4.144))

$$\left[\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} - \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} \right] j_l(k\tilde{r}) = -k^2 j_l(k\tilde{r}) \quad (4.203)$$

mit $k^2 = \tilde{\omega}_k - 4 + 4\tilde{\eta} + \frac{4}{3}\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3)$. $\tilde{\omega}_k$ nimmt also in nullter Ordnung in $\tilde{\eta}$ kontinuierliche, entartete Werte größer als 4 an. Die niedrigsten, aus der Determinante vorgezogenen vier (entarteten) Eigenwerte von \hat{M} sind damit gegeben durch

$$\tilde{\omega}_0 = 4 - 4\tilde{\eta} - \frac{4}{3}\tilde{\eta}^2 - \frac{10}{9}\tilde{\eta}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (4.204)$$

4.5.1 Störungstheorie

Die gesuchten diskreten Eigenwerte, insbesondere das Band um 3, lassen sich mit Hilfe der zeitunabhängigen Störungsrechnung [67] quantitativ berechnen. Dazu macht man in der Eigenwertgleichung Gl. (4.197)

$$\left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} + \hat{V}(\tilde{r}) \right] v_{n,l}(\tilde{r}) = \omega_n v_{n,l}(\tilde{r}) \quad (4.205)$$

für $v_{n,l}(\tilde{r})$ den Ansatz $v_{n,l}(\tilde{r}) = \hat{\psi}_{n,l}(\tilde{r})/\tilde{r}$. Durch diese Transformation verschwindet der zweite Term. Die verbleibende Gleichung läßt sich wieder auf $\xi = \tilde{r} - \tilde{R}$ umschreiben:

$$\left[-\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{l(l+1)}{(\xi + \tilde{R})^2} + V(\xi) \right] \psi_{n,l}(\xi) = \omega_n \psi_{n,l}(\xi), \quad (4.206)$$

und der Term $1/(\xi + \tilde{R})^2$ wird, da die Eigenfunktionen um $\tilde{r} = \tilde{R}$ zentriert sind, analog zu Gleichung (3.41) entwickelt:

$$\frac{1}{(\xi + \tilde{R})^2} = \tilde{\eta}^2 - 2\xi\tilde{\eta}^3 + \left(3\xi^2 - \frac{2-3\pi^2}{18} \right) \tilde{\eta}^4 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^5). \quad (4.207)$$

Dabei wurde für das in \tilde{R} auftauchende a_1 bereits der in Gleichung (3.139) gefundene Wert $a_1 = \frac{2-3\pi^2}{36}$ eingesetzt (vgl. auch den Ausdruck für \tilde{R} , Gl. (3.138)). Bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ erhält man also die Eigenwertgleichung:

$$\left[-\frac{d^2}{d\xi^2} + V_0 + \tilde{\eta}V_1 + \tilde{\eta}^2(V_2 + l(l+1)) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \right] \psi_{n,l}(\xi) = \omega_n \psi_{n,l}(\xi). \quad (4.208)$$

Der Hamiltonoperator $\mathcal{H}_0 = -\frac{d^2}{d\xi^2} + V_0$ erfährt eine Störung proportional zu $\tilde{\eta}$, nämlich $\mathcal{H}_1 = V_1$, eine Störung proportional zu $\tilde{\eta}^2$, $\mathcal{H}_2 = V_2 + l(l+1)$ und weitere Störungen in höheren Ordnungen.

Im ungestörten Fall ist das Potential das Pöschl–Teller–Potential $V_0 = -6 \operatorname{sech}^2 \xi + 4$, dessen Eigenwerte bekannt sind [68]: Es existieren zwei gebundene Zustände mit den Eigenwerten

$$\omega_0^0 = 0 \quad (\psi_0^0(\xi) = \sqrt{3/4} \operatorname{sech}^2 \xi) \quad \text{und} \quad (4.209)$$

$$\omega_3^0 = 3 \quad (\psi_3^0(\xi) = \sqrt{3/2} \sinh \xi \operatorname{sech}^2 \xi) \quad (4.210)$$

und ein kontinuierliches Spektrum mit Eigenwerten

$$\omega_k^0 = k^2 + 4, \quad k \in \mathbb{R} \quad (4.211)$$

und den zugehörigen Eigenfunktionen

$$\psi_k^0(\xi) = N e^{i k \xi} (3 \tanh^2 \xi - 1 - k^2 - 3 i k \tanh \xi) \quad (4.212)$$

mit $N = [2\pi(k^2+1)(k^2+4)]^{-1/2}$. Der Index am Eigenwert bezieht sich dabei auf den Wert der nullten Ordnung, die kontinuierlichen Eigenwerte werden mit k gekennzeichnet. Wenn noch ein zweiter Index mitgeschrieben wird, kennzeichnet er den Wert l des Drehimpulses. Der hochgestellte Index gibt die Störungsordnung an.

Diese Eigenfunktionen gehören eigentlich zu einer auf der ganzen Achse definierten Eigenwertgleichung, während das hier vorliegende Problem nur auf der Halbachse für $\xi \geq -\tilde{R}$ definiert ist. Dadurch läßt sich die Randbedingung, die man an die Eigenfunktionen stellt, nämlich daß sie im Ursprung ($\tilde{r} = 0$) wie \tilde{r}^{l+1} gegen Null gehen, wieder nur asymptotisch mit einem exponentiellen Fehler erfüllen. Einen weiteren exponentiellen Fehler nimmt man in Kauf, wenn man bei der folgenden Berechnung von Erwartungswerten von minus Unendlich statt von $-\tilde{R}$ ab integriert.

Für die zeitunabhängige Störungstheorie entwickelt man nun die Eigenfunktionen und Eigenwerte in Potenzreihen in $\tilde{\eta}$ und setzt diese in die Eigenwertgleichung ein. Man bekommt dann durch Koeffizientenvergleich:

$$\mathcal{H}_0 \psi_n^0 = \omega_n^0 \psi_n^0, \quad (4.213)$$

$$\mathcal{H}_0 \psi_n^1 + \mathcal{H}_1 \psi_n^0 = \omega_n^0 \psi_n^1 + \omega_n^1 \psi_n^0, \quad (4.214)$$

$$\mathcal{H}_0 \psi_n^2 + \mathcal{H}_1 \psi_n^1 + \mathcal{H}_2 \psi_n^0 = \omega_n^0 \psi_n^2 + \omega_n^1 \psi_n^1 + \omega_n^2 \psi_n^0. \quad (4.215)$$

⋮

Nun multipliziert man die Gleichungen (4.214) und Gleichung (4.215) von links mit ψ_n^0 und findet, da die höheren Terme in der Entwicklung der Zustände orthonormal sind ($\langle \psi_n^0 | \psi_n^i \rangle = \delta_{i0}$), Ausdrücke für die Korrekturen der Eigenwerte:

$$\omega_n^1 = \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_n^0 \rangle \quad \text{und} \quad (4.216)$$

$$\omega_n^2 = \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_2 | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_n^1 \rangle. \quad (4.217)$$

Die Störung in der ersten Ordnung lautet (vgl. z.B. Gl. (4.16)):

$$\mathcal{H}_1 = V_1 = -4 \tanh \xi. \quad (4.218)$$

Damit berechnet man die Korrektur zum Eigenwert 0:

$$\omega_0^1 = \langle \psi_0^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_0^0 \rangle = \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 V_1 \frac{\psi_0^{02}}{\tilde{r}^2} = -3 \int_{-\infty}^\infty \text{sech}^5 \xi \sinh \xi d\xi = 0. \quad (4.219)$$

Bei der Berechnung der Korrekturen zum Eigenwert 3 integriert man ebenfalls über eine antisymmetrische Funktion:

$$\omega_3^1 = \langle \psi_3^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_3^0 \rangle = -\frac{3}{2} 4 \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sech}^5 \xi \sinh^3 \xi d\xi = 0. \quad (4.220)$$

Um die Korrekturen zweiter Ordnung zu berechnen, müßte man die erste Korrektur zur Eigenfunktion kennen, welche als Summe über alle Eigenzustände

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_n^0 \rangle}{\omega_n^0 - \omega_m^0} \psi_m^0 \quad (4.221)$$

sehr schwierig zu berechnen ist. Es gibt aber einen Trick, sich dieser Summe zu entledigen. Dieser soll im nächsten Abschnitt beschrieben werden.

4.5.2 Korrekturen zweiter Ordnung

Um die Korrekturen zweiter Ordnung zum Eigenwert zu berechnen, ohne die Eigenfunktionen zu kennen, sucht man einen Operator Ω_n , für den, angewandt auf den n -ten Eigenzustand, folgende Kommutatorrelation gilt (vgl. [69, S. 471]):

$$[\Omega_n, \mathcal{H}_0] \psi_n^0 = \mathcal{H}_1 \psi_n^0. \quad (4.222)$$

Diese Gleichung muß nicht als Operatoridentität erfüllt sein, es reicht, für jede Eigenfunktion ψ_n^0 einen solchen Operator Ω_n zu finden. Unter Ausnutzung dieser Beziehung findet man für den zweiten Term der Korrektur zweiter Ordnung in Gleichung (4.217), wenn man für die Eigenfunktionen der ersten Ordnung die Entwicklung Gl. (4.221) einsetzt:

$$\begin{aligned} \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_n^1 \rangle &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_m^0 \rangle \langle \psi_m^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_n^0 \rangle}{\omega_n^0 - \omega_m^0} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_m^0 \rangle}{\omega_n^0 - \omega_m^0} \left(\langle \psi_m^0 | \Omega_n \mathcal{H}_0 | \psi_n^0 \rangle - \langle \psi_m^0 | \mathcal{H}_0 \Omega_n | \psi_n^0 \rangle \right) \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_m^0 \rangle}{\omega_n^0 - \omega_m^0} \langle \psi_m^0 | \Omega_n | \psi_n^0 \rangle (\omega_n^0 - \omega_m^0) \\ &= \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 \Omega_n | \psi_n^0 \rangle - \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 | \psi_n^0 \rangle \langle \psi_n^0 | \Omega_n | \psi_n^0 \rangle \\ &= \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 \Omega_n | \psi_n^0 \rangle - \omega_n^1 \langle \psi_n^0 | \Omega_n | \psi_n^0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.223)$$

Der letzte Term verschwindet, wenn, wie hier gegeben, die Eigenwert-Korrektur in erster Ordnung Null ist und die Anwendung des Operators Ω_n nicht aus dem zugehörigen Hilbertraum hinausführt. Damit findet man mit $\mathcal{H}_2 = V_2 + l(l+1)$ für die hier zu berechnenden Korrekturen in zweiter Ordnung den Ausdruck:

$$\begin{aligned} \omega_n^2 &= \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 \Omega_n | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_2 | \psi_n^0 \rangle \\ &= \langle \psi_n^0 | \mathcal{H}_1 \Omega_n | \psi_n^0 \rangle + \langle \psi_n^0 | V_2 | \psi_n^0 \rangle + l(l+1) \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.224)$$

Das letzte Skalarprodukt ist aufgrund der Normierung gleich Eins.

Der Operator Ω_n ist nur bis auf additive Operatoren $\tilde{\Omega}_n$, für die $[\tilde{\Omega}_n, \mathcal{H}_0] \psi_n^0 = 0$ gilt, festgelegt. Diese Freiheit kann man dazu nutzen, einen Operator zu finden, der, angewandt auf ψ_n^0 , nicht aus dem Hilbertraum herausführt. Bei dem Eigenwert 3 wird man hiervon Gebrauch machen müssen. Der Erwartungswert Gl. (4.224) ist trotz dieser Freiheit eindeutig.

Damit lassen sich nun die Korrekturen zweiter Ordnung berechnen:

Für die Eigenwerte um Null führt die Kommutatorrelation Gl. (4.222) für Ω_0 auf die Differentialgleichung

$$4 \tanh \xi \operatorname{sech}^2 \xi = -\Omega_0'' \operatorname{sech}^2 \xi + 4\Omega_0' \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi, \quad (4.225)$$

welche zum Beispiel durch $\Omega_0 = \xi$ erfüllt ist. Dieser Operator führt nicht aus dem Hilbertraum hinaus. Der erste Term in der Korrektur (Gl. (4.224)) lautet damit:

$$\langle \psi_0^0 | \mathcal{H}_1 \Omega_0 | \psi_0^0 \rangle = -\frac{3}{4} 4 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi \operatorname{sech}^5 \xi \sinh \xi = -3 \cdot 2J_5 = -1. \quad (4.226)$$

Das Integral J_5 ist wieder in Anhang C angegeben.

Den zweiten Term der Korrektur bekommt man durch partielle Integration:

$$\langle \psi_0^0 | V_2 | \psi_0^0 \rangle = -1. \quad (4.227)$$

Dabei ist zu beachten, daß in den Integralen über Terme proportional zu $\log(\cosh \xi)$ die Randterme nicht verschwinden, sondern u.a. die Divergenzen aus den Integralen kompensieren.

Man findet also für die zweite Ordnung von ω_0^2 in Übereinstimmung mit der qualitativen Überlegung in Gleichung (4.200):

$$\omega_0^2 = l(l+1) - 2. \quad (4.228)$$

Auch hier muß die andere Darstellungsart, in welcher der Parameter C_1 explizit in der ersten Ordnung des Potentials V_1 auftaucht (s. S. 61), dasselbe Ergebnis liefern, welches wie oben nicht von C_1 abhängen darf, da eine solche Abhängigkeit mit einer Verschiebung zusammenhängt, welche die Eigenwerte unverändert lassen muß. Der C_1 -abhängige Term in \mathcal{H}_1 ist eine ungerade Funktion, so daß die Integrale in den Korrekturen erster Ordnung verschwinden. In zweiter Ordnung sorgt der Term allerdings für eine C_1 -Abhängigkeit in den Operatoren Ω_n , also z.B. für Ω_0 :

$$\Omega_0 = \xi + 2C_1 \tanh \xi. \quad (4.229)$$

Beim Integrieren heben sich in der Korrektur Gl. (4.224) die C_1 -Terme aus dem Erwartungswert von $\mathcal{H}_1 \Omega_0$ aber gerade gegen die aus dem Erwartungswert von \mathcal{H}_2 weg, so daß man dasselbe Ergebnis (Gl. (4.228)) erhält.

Nun soll die Korrektur zum Eigenwert 3 berechnet werden. Aus der Kommutatorrelation erhält man wieder eine Differentialgleichung 1. Ordnung in Ω_3' :

$$-4 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh^2 \xi = \operatorname{sech}^2 \xi \sinh \xi \Omega_3'' + (4 \operatorname{sech}^3 \xi \sinh^2 \xi - 2 \operatorname{sech} \xi) \Omega_3'. \quad (4.230)$$

Variation der Konstanten führt auf die Lösung

$$\Omega_3 = \frac{1}{2} \left(\xi - \sinh \xi \cosh \xi \right) + \frac{c}{2} \left(3 \xi - 3 \frac{\cosh \xi}{\sinh \xi} + \frac{\cosh^3 \xi}{\sinh \xi} \right). \quad (4.231)$$

Hier braucht man die homogene Lösung proportional zu c , um insgesamt einen Operator zu finden, der nicht aus dem Hilbertraum herausführt. Dies wird durch die Wahl $c = 1$ erreicht. Der gesuchte Operator bekommt damit die Form

$$\Omega_3 = 2\xi - \frac{\cosh \xi}{\sinh \xi}. \quad (4.232)$$

Für die Korrektur ω_3^2 benötigt man nach Gleichung (4.224) die Erwartungswerte

$$\begin{aligned} \langle \psi_3^0 | \mathcal{H}_1 \Omega_3 | \psi_3^0 \rangle &= -\frac{3}{2} 4 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \operatorname{sech}^5 \xi \sinh^3 \xi \left(2\xi - \frac{\cosh \xi}{\sinh \xi} \right) \\ &= -12 \cdot 2H_{5,3} + 6B(3/2, 1) = -4 \end{aligned} \quad (4.233)$$

und

$$\langle \psi_3^0 | V_2 | \psi_3^0 \rangle = 7 - \pi^2. \quad (4.234)$$

Das Integral $H_{5,3}$ steht ebenfalls im Anhang C, $B(x, y)$ ist die Betafunktion. Den zweiten Erwartungswert bekommt man auch hier durch partielles Integrieren, wobei die Randterme wieder mitzunehmen sind. Es ergibt sich schließlich:

$$\omega_3^2 = l(l+1) + 3 - \pi^2. \quad (4.235)$$

Mit Hilfe von Symmetrieüberlegungen läßt sich noch zeigen, daß alle Korrekturen ungerader Ordnung, insbesondere also auch die Korrektur der Ordnung $\tilde{\eta}^3$, verschwinden müssen: Dazu substituiert man im ursprünglichen Potential der Thin wall approximation Gl. (3.3) η durch $-\eta$, wodurch das stabile und das metastabile Minimum vertauscht werden. Man bekommt ein im Vergleich zu Abbildung 3.1 an der U -Achse gespiegeltes und entlang der U -Achse nach oben verschobenes Potential. Die Bounce-Lösung $\bar{\Phi}$ bestimmt sich aus der Euler-Lagrange-Gleichung (Gl. (3.16)), welche wiederum nur die Ableitung des Potentials enthält, so daß die Verschiebung hier nicht zum Tragen kommt. Die Gleichung bleibt also erfüllt, wenn außer der obigen Substitution die Bounce-Lösung (Gl. (3.43)) in ihr Negatives übergeht, indem zusätzlich \tilde{r} durch $-\tilde{r}$ ersetzt wird.

Durch diese beiden Substitutionen $\eta \rightarrow -\eta$ und $\bar{\Phi} \rightarrow -\bar{\Phi}$ bleiben das Potential V (Gl. (4.14)) und die Eigenwertgleichung (Gl. (4.13)) unverändert, da die Bounce-Lösung im Potential in den geraden Ordnungen in $\tilde{\eta}$ nur in geraden Potenzen und umgekehrt vorkommt. Also sind auch die Eigenwerte invariant unter der Substitution $\eta \rightarrow -\eta$ bzw. $\tilde{\eta} \rightarrow -\tilde{\eta}$ und können nur gradzahlige $\tilde{\eta}$ -Potenzen enthalten.

Man hat also insgesamt folgende Eigenwerte gefunden: ein Band um Null mit den $(2l+1)$ -fach entarteten Eigenwerten (vgl. Gl. (4.228))

$$\omega_{0l} = 0 + \tilde{\eta}^2 \left(l(l+1) - 2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4), \quad (4.236)$$

ein Band um Drei mit den ebenfalls $(2l+1)$ -fach entarteten Eigenwerten (Gl. (4.235))

$$\omega_{3l} = 3 + \tilde{\eta}^2 \left(l(l+1) + 3 - \pi^2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \quad (4.237)$$

und kontinuierliche Eigenwerte (Gl. (4.211))

$$\omega_k = k^2 + 4, \quad k \in \mathbf{R}. \quad (4.238)$$

Die Eigenwerte des freien Operators lauten (vgl. S. 101)

$$\tilde{\omega}_k = k^2 + 4 - 4\tilde{\eta} - \frac{4}{3}\tilde{\eta}^2 - \frac{10}{9}\tilde{\eta}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (4.239)$$

Damit ist das Spektrum bis zur dritten und bei den kontinuierlichen Eigenwerten bis zur führenden Ordnung bestimmt.

4.6 Der niederfrequente Anteil — Berechnung von $I'_>$

In diesem Abschnitt sollen die von den kleinen Eigenwerten kommenden Beiträge zu I'

$$I'_>(\Lambda) = - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t} \sum_i \left(e^{-\omega_i t} - e^{-\tilde{\omega}_i t} \right) \quad (4.240)$$

berechnet werden. Der hochgestellte Strich bedeutet dabei wieder das Herausnehmen der negativen Mode $\omega_{00} = -2\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)$ (Gl. (4.201)), der drei Nullmoden $\omega_{01} = 0$ (Gl. (4.199)) und der vier niedrigsten Eigenwerte des freien Operators $\tilde{\omega}_0$ (Gl. (4.204)). Da die t -Integration hier konvergiert, läßt sich $I'_>$ durch obige Gleichung definieren (vgl. Gl. (4.40)).

Die niedrigsten positiven Eigenwerte ω_{0l} bilden ein Band um Null und sind proportional zu $\tilde{\eta}^2$ (Gl. (4.236)). Ihr Beitrag zur Determinante sei $I^0_{>}$.

Das nächste Band liegt um 3 herum (Gl. (4.237)) und liefert den Beitrag $I^3_{>}$.

Die Eigenfunktionen des freien Operators \tilde{M} sind die Besselfunktionen (Gl. (4.203)) mit einem kontinuierlichen Spektrum $\tilde{\omega}_k = k^2 + 4 + \mathcal{O}(\tilde{\eta})$ (Gl. (4.239)). Ihr Beitrag läßt sich, nachdem man die vier niedrigsten Eigenwerte $\tilde{\omega}_0$ wieder abgezogen hat, mit dem kontinuierlichem Teil von M zu $I^k_{>}$ zusammenfassen.

$I'_>$ setzt sich also aus den drei Teilen

$$I'_> = I^0_{>} + I^3_{>} + I^k_{>} \quad (4.241)$$

zusammen, welche jetzt nacheinander berechnet werden.

4.6.1 Aufsummation des Bands um Null — $I^0_{>}$

Der Operator $M = -\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}}\frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} - \frac{1}{\beta^2}U''(\tilde{\Phi})$ hat also, wie in Gleichung (4.236) angegeben, $(2l+1)$ -fach entartete Eigenwerte um Null:

$$\omega_{0l} = 0 + \tilde{\eta}^2 \left(l(l+1) - 2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (4.242)$$

Für $l = 0$ erhält man genau die negative Mode ω_{00} , für $l = 1$ die (exakten) Nullmoden ω_{01} . Die restlichen Eigenwerte dieses Bands liefern den Beitrag $I_{>}^0$:

$$I_{>}^0(\Lambda) = - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t} \sum_{l=2}^{\infty} (2l+1) \exp\left(-[l(l+1)-2]\tilde{\eta}^2 t(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))\right), \quad (4.243)$$

bzw. nach Indexverschiebung

$$I_{>}^0(\Lambda) = - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+5) \exp\left(- (l^2+5l+4)\tilde{\eta}^2 t(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))\right). \quad (4.244)$$

Die Summation wird in einer ersten Rechnung mit Hilfe der Eulerschen Summenformel [70, S. 506] durch ein Integral genähert:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^n f(l) &= \int_0^n f(x) dx + \frac{f(0) + f(n)}{2} + \\ &+ \sum_{i=1}^p \frac{B_{2i}}{(2i)!} \left[f^{(2i-1)}(x) \right]_0^n + \frac{1}{(2p+1)!} \int_0^n \beta_{2p+1}(x) f^{(2p+1)}(x) dx. \end{aligned} \quad (4.245)$$

Dabei berechnet sich $\beta_i(x)$ aus den Bernoullischen Polynomen $B_i(x)$ gemäß:

$$\beta_i(x) = B_i(x - [x]), \quad (4.246)$$

wobei mit der Gaußklammer $[x]$ die größte, ganze Zahl kleiner gleich x gemeint ist. B_{2i} sind Bernoulli-Zahlen [66, Gl. 23.1.3].

Um die Korrekturen zu dem Integral im ersten Term zu berechnen, läßt man p gegen Unendlich gehen. Dann verschwindet der letzte Term in der Summenformel Gl. (4.245) aufgrund der Fakultät. Ebenso verschwinden der Summand $f(l) = (2l+5)e^{-(l^2+5l+4)\tilde{\eta}^2 t}$ und die im vorletzten Term vorkommenden Ableitungen an der oberen Grenze n , welche hier gleich Unendlich ist, so daß man außer dem Integral folgende Korrektur bekommt:

$$\text{Korrektur} = \frac{f(0)}{2} - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{B_{2i}}{(2i)!} f^{(2i-1)}(0). \quad (4.247)$$

Die Ableitungen des Summanden sind dabei durch die Hermite-Polynome $H_n(x)$ gegeben (vgl. [71, Gl. 8.95]):

$$\frac{d^n}{dt^n} (2l+5) e^{-(l^2+5l+4)\tilde{\eta}^2 t} = e^{-(l^2+5l+4)\tilde{\eta}^2 t} (-)^n (\tilde{\eta}^2 t)^{\frac{n-1}{2}} H_{n+1}\left((l+5/2)\sqrt{t}\tilde{\eta}\right), \quad (4.248)$$

womit sich die Korrektur also schreiben läßt als

$$\text{Korrektur} = \frac{5}{2} e^{-4\tilde{\eta}^2 t} + e^{-4\tilde{\eta}^2 t} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{B_{2i}}{(2i)!} (\tilde{\eta}^2 t)^{i-1} H_{2i}(5/2\sqrt{t}\tilde{\eta}). \quad (4.249)$$

In den geradzahigen Hermite-Polynomen tauchen nur gerade Potenzen des Arguments auf, so daß sich hier eine Potenzreihe in $\tilde{\eta}^2$ ergibt, beginnend mit einem konstanten Term. Sie kann mit passenden Koeffizienten b_m geschrieben werden als:

$$\text{Korrektur} = \left(\frac{5}{2} + b_0\right) e^{-4\tilde{\eta}^2 t} + \sum_{m=1}^{\infty} b_m (\tilde{\eta}^2 t)^m e^{-4\tilde{\eta}^2 t}. \quad (4.250)$$

Der einzige Beitrag b_0 proportional zur nullten Potenz von $\tilde{\eta}$ kommt aus dem konstanten Term des zweiten Hermiteschen Polynoms ($i = 1$),

$$H_2(x) = 4x^2 - 2, \quad (4.251)$$

alle anderen Polynome werden mit $\tilde{\eta}^2 t$ -Potenzen multipliziert. Damit findet man für b_0

$$b_0 = \frac{B_2}{2!} \cdot (-2) = -B_2 = -\frac{1}{6}. \quad (4.252)$$

Obwohl die höheren Koeffizienten b_m nicht explizit gebraucht werden, da ihre Beiträge von der Ordnung des Fehlers sind, sind sie am Ende von Anhang E angegeben.

Mit der Ersetzung nach der Summenformel kann man in Gleichung (4.244) die konvergente t -Integration ausführen, und man erhält mit der Substitution $y = x^2 + 5x + 4$ für $I_{>}^0$:

$$\begin{aligned} I_{>}^0(\Lambda) &= -\int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t} \left(\int_4^{\infty} dy e^{-y\tilde{\eta}^2 t} + \left(\frac{5}{2} + b_0\right) e^{-4\tilde{\eta}^2 t} + \sum_{m=1}^{\infty} b_m (\tilde{\eta}^2 t)^m e^{-4\tilde{\eta}^2 t} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \\ &= -4\Gamma(-1, 4\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \frac{7}{3} \text{Ei}(-4\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{4^m} \Gamma(m, 4\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \end{aligned} \quad (4.253)$$

Der Fehler in den Eigenwerten ist zwei Ordnungen höher als der führende Term. Sein Koeffizient wird ebenfalls l -abhängig sein, so daß auch hier die Summe über l zum Tragen kommt und der resultierende Fehler in $I_{>}^0$ ebenfalls zwei Ordnungen höher als der führende Term ist, also in der konstanten Ordnung liegt. Dies sieht man z.B. durch die Substitution $\tilde{\eta}^2 \rightarrow \tilde{\eta}^2(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))$ in dem Ausdruck für $I_{>}^0$ (Gl. (4.253)).

Da die beiden Parameter $\tilde{\eta}$ und Λ nur in der Kombination $\tilde{\eta}^2 \Lambda$ auftreten, liefert die Entwicklung von $I_{>}^0$ in Gleichung (4.253) sowohl die Potenz-Reihe in Λ , als auch die in $\tilde{\eta}$. Dazu setzt man für die unvollständige Gammafunktion und das Exponentialintegral die Reihenentwicklungen

$$\begin{aligned} \Gamma(-1, x) &= \frac{1}{x} + \log x + (-1 + \gamma) - \frac{x}{2} + \mathcal{O}(x^2), \\ \text{Ei}(-x) &= \log x + \gamma - x + \mathcal{O}(x^2) \quad \text{und} \\ \Gamma(m, x) &= \Gamma(m) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-)^n x^{m+n}}{n!(m+n)} \quad m \neq 0, -1, -2, \quad [71, \text{Gl. 8.345.2}] \end{aligned} \quad (4.254)$$

ein (γ ist wieder die Eulersche Konstante) und findet:

$$\begin{aligned} I_{>}^0(\Lambda) &= -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \left(\frac{3}{2} - b_0\right) \log(\tilde{\eta}^2 \Lambda) - \left(\frac{3}{2} - b_0\right) \gamma - \left(-4 - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{4^m} \Gamma(m)\right) + \\ &\quad + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2 \Lambda) \log \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \\ &= -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \frac{5}{3} \log(\tilde{\eta}^2 \Lambda) - \frac{5}{3} \gamma + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \end{aligned} \quad (4.255)$$

Da der aus den Eigenwerten resultierende Fehler in $I_{>}^0$ schon von konstanter Ordnung ist, müssen auch die Terme mit b_m ($m \geq 1$), welche ebenfalls Beiträge konstanter Ordnung liefern, nicht berücksichtigt werden und sind in der zweiten Zeile weggelassen worden.

Diese Entwicklung gilt für kleine Λ . Da $I_{>}^0$ aber durch Integration über den Bereich für große t berechnet wird, verwendet man beim Zusammensetzen der Determinante lieber den unentwickelten Ausdruck Gl. (4.253), der für den gesamten Λ -Bereich gültig ist. Da die höheren Λ -Potenzen hier mit $\tilde{\eta}^2$ -Potenzen unterdrückt sind, macht dies numerisch für das Band um Null keinen Unterschied, beim Band um drei wird sich das allerdings bemerkbar machen (vgl. Abb. 4.5).

Vertauscht man in dem ursprünglichen Ausdruck für $I_{>}^0$ Integration und Summation und nähert die Summe dann wieder nach der Eulerschen Summenformel durch ein Integral, so erhält man genau dieselbe Abschätzung wie oben (Gl. (4.253)).

Eine alternative Art der Berechnung des gesuchten Beitrags, welche auf eine Potenzreihe in Λ führt, benutzt die für den gesamten t -Bereich definierte, zugehörige Zetafunktion. Dazu verschiebt man den Index so, daß die Summe in Gleichung (4.243) jetzt bei Eins anfängt und definiert:

$$\zeta^0(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} \sum_{l=1}^\infty (2l+3) e^{-l(l+3)t\tilde{\eta}^2(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))}. \quad (4.256)$$

Diesen Ausdruck kann man für Argumente größer als Eins berechnen, indem man die Zetafunktion als Summe über die reziproken Potenzen der Eigenwerte schreibt (vgl. Gl. (4.26)):

$$\zeta^0(z) = \sum_{l=1}^\infty (2l+3) [l(l+3)]^{-z} \tilde{\eta}^{-2z} \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2)\right)^{-z}. \quad (4.257)$$

Für Ausdrücke der allgemeinen Form

$$Z(z) = \sum_{l=1}^\infty (2l+a) [(l+b)(l+c)]^{-z} \quad (4.258)$$

läßt sich nach einer Idee von Münster [72] eine analytische Fortsetzung finden. Mit

$$[(l+b)(l+c)]^{-z} = \frac{1}{2}(l+b)^{-2z} + \frac{1}{2}(l+c)^{-2z} - \frac{1}{2}[(l+b)^{-z} - (l+c)^{-z}]^2 \quad (4.259)$$

findet man für $Z(z)$

$$\begin{aligned} Z(z) &= \sum_{l=1}^\infty (l+b)^{-2z+1} + \left(\frac{a}{2} - b\right) \sum_{l=1}^\infty (l+b)^{-2z} + \sum_{l=1}^\infty (l+c)^{-2z+1} + \\ &+ \left(\frac{a}{2} - c\right) \sum_{l=1}^\infty (l+c)^{-2z} - \frac{1}{2} \sum_{l=1}^\infty (2l+a) [(l+b)^{-z} - (l+c)^{-z}]^2 \\ &= \zeta_R(2z-1) - \sum_{n=1}^b n^{-2z+1} + \left(\frac{a}{2} - b\right) \zeta_R(2z) - \left(\frac{a}{2} - b\right) \sum_{n=1}^b n^{-2z} + \\ &+ \zeta_R(2z-1) - \sum_{n=1}^c n^{-2z+1} + \left(\frac{a}{2} - c\right) \zeta_R(2z) - \left(\frac{a}{2} - c\right) \sum_{n=1}^c n^{-2z} - F(z). \quad (4.260) \end{aligned}$$

Die ersten Terme lassen sich (für $b, c \in \mathbb{N}$) durch die Riemannsche Zetafunktion ζ_R ausdrücken und als solche analytisch fortsetzen. Um den letzten Term $F(z)$ ebenfalls durch

Riemannsche Zetafunktionen auszudrücken, entwickelt man die Ausdrücke $(1+b/l)^{-z}$ und $(1+c/l)^{-z}$ in binomische Reihen und erhält:

$$\begin{aligned}
F(z) &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+a) \left[l^{-z} (1+b/l)^{-z} - l^{-z} (1+c/l)^{-z} \right]^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+a) \left[z^2 (b-c)^2 l^{-2z-2} + \mathcal{O}(z^3 l^{-2z-3}) \right] \\
&= (b-c)^2 z^2 \zeta_R(2z+1) + \frac{a(b-c)^2}{2} z^2 \zeta_R(2z+2) + \dots \quad (4.261)
\end{aligned}$$

Damit ist $F(z)$ und also auch die gesamte Funktion $Z(z)$ analytisch fortgesetzt.

Den Logarithmus der Determinante bekommt man nach Gleichung (4.28) als negative Ableitung der Zetafunktion an der Stelle $z=0$:

$$-\left. \frac{d\zeta^0(0)}{dz} \right|_{z=0} = \left(-Z'(0)(\tilde{\eta}^2)^0 + Z(0) \log \tilde{\eta}^2 (\tilde{\eta}^2)^0 \right) \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right). \quad (4.262)$$

Es müssen also noch die Werte von $Z(0)$ und $Z'(0)$ an der Stelle Null bestimmt werden.

Als erstes berechnet man nun $Z(0)$: Dazu betrachtet man den Wert von $F(z)$ an der Stelle $z=0$: $\zeta_R(\lambda z+1)$ hat bei $z=0$ einen Pol erster Ordnung,

$$\zeta_R(\lambda z+1) = \frac{1}{\lambda z} + C + \mathcal{O}(z), \quad (4.263)$$

und liefert also, da noch mit z^2 multipliziert wird, keinen Beitrag. Die anderen vorkommenden Zetafunktionen sind bei $z=0$ analytisch, so daß schon die ausgeschriebenen Terme in $F(z)$ nach Multiplikation mit z^2 für $z=0$ verschwinden. Damit bekommt man für den Wert von $Z(z)$ an der Stelle $z=0$:

$$\begin{aligned}
Z(0) &= 2\zeta_R(-1) + (a-b-c)\zeta_R(0) - \sum_{n=1}^b n - \sum_{n=1}^c n - \left(\frac{a}{2}-b\right) \sum_{n=1}^b 1 - \left(\frac{a}{2}-c\right) \sum_{n=1}^c 1 \\
&= -\frac{1}{6} - \frac{1}{2}a(1+b+c) + \frac{1}{2}(b^2+c^2). \quad (4.264)
\end{aligned}$$

In der letzten Zeile wurden die Werte der Riemannschen Zetafunktion

$$\begin{aligned}
\zeta_R(0) &= -\frac{1}{2} \quad \text{und} \\
\zeta_R(-1) &= -\frac{1}{12} \quad (4.265)
\end{aligned}$$

eingesetzt.

Als nächstes berechnet man die Ableitung der verallgemeinerten Zetafunktion an der Stelle Null: Für den ersten Term aus $F(z)$ findet man mit Gleichung (4.263)

$$[z^2 \zeta_R(\lambda z+1)]' = \frac{1}{\lambda} + 2zC + \mathcal{O}(z^2). \quad (4.266)$$

Dieser Ausdruck geht im Limes $z \rightarrow 0$ gegen $\frac{1}{\lambda}$. Die Ableitungen der weiteren Terme gehen gegen Null, und es ist also $F'(0) = (b - c)^2/2$. Für die Ableitung von $Z(z)$ an der Stelle Null bekommt man damit

$$Z'(0) = 4\zeta'_R(-1) + 2(a - b - c)\zeta'_R(0) + 2 \sum_{n=1}^b n \log n + 2 \sum_{n=1}^c n \log n + (a - 2b) \sum_{n=1}^b \log n + (a - 2c) \sum_{n=1}^c \log n - \frac{(b - c)^2}{2}. \quad (4.267)$$

Die Ableitung der Riemannschen Zetafunktion beträgt an der Stelle Null [66, Gl. 23.2.12]

$$\zeta'_R(0) = -\frac{1}{2} \log 2\pi. \quad (4.268)$$

Der Wert an der Stelle -1 läßt sich aus der Beziehung [73]

$$\begin{aligned} -\frac{\zeta'_R(1-z)}{\zeta_R(1-z)} \Big|_{z=2} &= \left[-\log 2\pi - \frac{1}{2}\pi \tan \frac{z\pi}{2} + \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)} + \frac{\zeta'_R(z)}{\zeta_R(z)} \right]_{z=2} \\ &= -\log 2\pi + \psi(2) - \psi(2) + \frac{1}{\Gamma(2)\zeta(2)} \int_0^\infty \frac{\log x e^{-x} x}{1 - e^{-x}} dx \end{aligned} \quad (4.269)$$

herleiten zu

$$\zeta'_R(-1) = -0.165421149. \quad (4.270)$$

Damit ist die Ableitung der Zetafunktion an der Stelle Null berechnet.

Auch für nichtnatürliche Werte für b und c , wie sie im nächsten Abschnitt vorkommen werden, läßt sich die verallgemeinerte Zetafunktion Gl. (4.258) definieren und analytisch fortsetzen, indem man die modifizierte Riemannsche- oder auch Hurwitz-Zetafunktion ζ_H einführt [71, Gl. 9.521.1]:

$$\zeta_H(z, x) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+x)^z} \quad \text{Re } z > 1. \quad (4.271)$$

Für $x = 1$ ist das die gewöhnliche Riemannsche Zetafunktion. Mit dieser Definition findet man für $Z(z)$ für beliebiges b und c den Ausdruck:

$$Z(z) = \zeta_H(2z - 1, b + 1) + \left(\frac{a}{2} - b\right) \zeta_H(2z, b + 1) + \zeta_H(2z - 1, c + 1) + \left(\frac{a}{2} - c\right) \zeta_H(2z, c + 1) - F(z) \quad (4.272)$$

mit unverändertem $F(z)$.

Für den Wert an der Stelle $z = 0$ ergibt sich daraus derselbe Ausdruck wie im Fall mit natürlichen Parametern (Gl. (4.264)). Dabei ist für die Werte der Hurwitz-Zetafunktion für nichtpositives, natürliches erstes Argument die folgende Formel verwendet worden [71, Gl. 9.531]:

$$\zeta_H(-n, x) = -\frac{B_{n+1}(x)}{n+1} \quad (n \in \mathbb{N}_0) \quad (4.273)$$

mit dem Bernoulli-Polynom $B_n(x)$.

Für die Ableitung am Nullpunkt findet man mit der Beziehung [71, Gl. 9.533.3]:

$$\left. \frac{d}{dz} \zeta_H(z, x) \right|_{z=0} = \log \Gamma(x) - \frac{1}{2} \log 2\pi \quad (4.274)$$

den Ausdruck:

$$\begin{aligned} Z'(0) &= 2\zeta'_H(-1, b+1) + 2\zeta'_H(-1, c+1) - (a-b-c) \log 2\pi + \\ &+ (a-2b) \log \Gamma(b+1) + (a-2c) \log \Gamma(c+1) - \frac{(b-c)^2}{2}. \end{aligned} \quad (4.275)$$

Einzelne Werte der Ableitung der Hurwitzschen Zetafunktion lassen sich dabei durch Ableiten aus folgender Integraldarstellung gewinnen [74]:

$$\zeta_H(z, x) = \frac{1}{2} x^{-z} + \frac{x^{1-z}}{z-1} + 2 \int_0^\infty (x^2 + y^2)^{-\frac{1}{2}z} \left\{ \sin \left(z \arctan \frac{y}{x} \right) \right\} \frac{dy}{e^{2\pi y} - 1}. \quad (4.276)$$

Damit läßt sich auch der Wert für $\zeta'_R(-1)$ aus Gleichung (4.270) bestätigen. Die Funktion $Z(z)$ (Gl. (4.258)) ist dadurch auf nichtnatürliche Parameter verallgemeinert.

Mit dieser Funktion $Z(z)$ läßt sich mit obigen Ergebnissen (Gl. (4.264)) und (Gl. (4.267)) für $a = b = 3$ und $c = 0$ der Beitrag I^0 als negative Ableitung der Zetafunktion an der Stelle Null berechnen:

$$- \left. \frac{d\zeta^0(0)}{dz} \right|_{z=0} = - Z'(0) (\tilde{\eta}^2)^0 + Z(0) \log \tilde{\eta}^2 (\tilde{\eta}^2)^0 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \quad (4.277)$$

$$= - \left(4\zeta'_R(-1) + 2 \sum_{n=1}^3 n \log n - 3 \sum_{n=1}^3 \log n - 9/2 \right) + \quad (4.278)$$

$$+ \log \tilde{\eta}^2 \left(-\frac{1}{6} - 6 + \frac{9}{2} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \quad (4.279)$$

$$= 1.1727005 - 5/3 \log \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \quad (4.280)$$

$$= I^0. \quad (4.281)$$

Da hier aber nicht der Beitrag der Eigenwerte für den gesamten t -Bereich, sondern nur der für große t -Werte aufsummiert werden soll, wird der Anteil $I^0_{<}$ für kleine t wieder abgezogen. Dazu definiert man eine neue Zetafunktion

$$\zeta^0_{<}(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} \sum_{l=1}^\infty (2l+3) e^{-l(l+3)t\tilde{\eta}^2(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))} \quad (4.282)$$

und entwickelt die Summe im Integranden in eine Seeley-Reihe mit Koeffizienten $\tilde{\mathcal{P}}_i$:

$$\sum_{l=1}^\infty (2l+3) e^{-l(l+3)t\tilde{\eta}^2} = \sum \tilde{\mathcal{P}}_i t^i. \quad (4.283)$$

Der Hauptteil der Seeley–Reihe läßt sich wie folgt an der Zetafunktion ablesen:

Die negativen Exponenten des Hauptteils sind durch die Polstellen der zugehörigen Zetafunktion gegeben, die Residuen an den Polen entsprechen den Koeffizienten der Seeley–Entwicklung dividiert durch den Wert der Gammafunktion an dieser Stelle. Ein Pol der Form $\frac{a}{(z-n)}$ der Zetafunktion $\zeta(z)$ liefert für positives n also einen Term $\Gamma(n)a t^{-n}$ in der Seeley–Entwicklung. Den Nebenteil kann man so nicht ablesen, da die Gammafunktion für negatives ganzzahliges Argument oder Null Pole hat, so daß die Zetafunktion für die Potenzen des Nebenteils keine Divergenzen aufweist.

Die Divergenzen der hier relevanten Zetafunktion sind durch diejenigen von $\zeta^0(z)$ (Gl. (4.256)) und damit durch die Divergenzen der Riemannschen Zetafunktion, nämlich einem einfachen Pol bei $z = 1$ mit Residuum Eins [66, Gl. 32.2] bestimmt (vgl. Gl. (4.263)). Insbesondere ist die führende Potenz der Seeley–Entwicklung also durch den Pol bei $z = 1$ gegeben. Um das zugehörige Residuum zu berechnen, muß man die innere Funktion berücksichtigen und findet für den Koeffizienten:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\mathcal{P}}_{-1}}{\Gamma(1)} = \tilde{\mathcal{P}}_{-1} &= \operatorname{Res}_{z \rightarrow 1} \left[2\zeta_R(2z-1) + (\text{bei } z=1 \text{ analytische Terme}) \right] \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \\ &= 2 \cdot 1 \cdot \frac{1}{2} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} = \frac{1}{\tilde{\eta}^2}. \end{aligned} \quad (4.284)$$

In dem Ausdruck für $Z(z)$ Gl. (4.260) liefert der Term proportional zu $\zeta_R(2z)$ noch einen Pol bei $z = 1/2$. Er taucht hier aber, da $a = b + c$ ist, nicht auf. Die Seeley–Entwicklung ist also gegeben durch

$$\sum_{l=1}^{\infty} (2l+3) e^{-l(l+3)t\tilde{\eta}^2} = \frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} + \text{Terme höherer Ordnung in } t. \quad (4.285)$$

Alternativ kann man die Summe $\sum_l (2l+3) e^{-l(l+3)t\tilde{\eta}^2}$ auch direkt, wie in Anhang C in [75] geschehen, in eine Reihe entwickeln, indem man das Gaußsche Integral

$$\int_{-\infty-i\epsilon}^{\infty-i\epsilon} dy e^{-i(2l+s+1)y} e^{-y^2/t} = \sqrt{\pi t} e^{-t(l+[s+1]/2)^2} \quad (\operatorname{Im} y < 0) \quad (4.286)$$

nach l ableitet:

$$-2i \int_{-\infty-i\epsilon}^{\infty-i\epsilon} dy y e^{-i(2l+s+1)y} e^{-y^2/t} = -\sqrt{\pi t} t e^{-(t/4)(s^2+1)} (2l+s+1) e^{-t(l^2+(s+1)l+s/2)} \quad (4.287)$$

und über l von 0 bis ∞ summiert:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+s+1) e^{-t(l^2+(s+1)l+s/2)} = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} t^{-1} \exp\left(\frac{t}{4}(s^2+1)\right) \int_{-\infty-i\epsilon}^{\infty-i\epsilon} dy \frac{y}{\sin y} e^{-isy} e^{-y^2/t}. \quad (4.288)$$

Um eine asymptotische Entwicklung für kleine t zu bekommen, reicht es, das Integral

$$\int_{-1}^{+1} dy \frac{y}{\sin y} \cos(sy) e^{-y^2/t} \quad (4.289)$$

zu betrachten und hier die Taylorentwicklung für $\cos(sy)$ und $\frac{y}{\sin y}$, nämlich

$$\frac{y}{\sin y} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} (4^n - 2) \frac{B_{2n}}{(2n)!} y^{2n}, \quad (4.290)$$

einzusetzen. Die B_n sind wieder die Bernoulli-Zahlen. Nach Ausführung der y -Integration findet man die Reihe

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l + s + 1) e^{-t(l^2 + (s+1)l + s/2)} = \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{\infty} u_n t^n \quad (4.291)$$

mit den Koeffizienten

$$u_n = \frac{1}{n!} 4^{-n} \sum_{\rho=0}^n s^{2\rho} w(n, \rho) \quad \text{mit}$$

$$w(n, \rho) = \sum_{m=\rho}^{n-\rho} (-1)^{m+\rho+1} 4^\rho (4^m - 2) \binom{n}{\rho+m} \binom{\rho+m}{2\rho} B_{2m}. \quad (4.292)$$

Insbesondere ist $w(n, \rho) = 0$ für $n < 2\rho$.

Für $s = 4$ ergibt sich durch Multiplikation von Gleichung (4.291) mit der Entwicklung von e^{-2t} die Reihe:

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l + 5) e^{-t(l^2 + 5l + 4)} = \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{\infty} u_n t^n (1 - 2t + \frac{4t^2}{2} + \dots) = \sum_{n=-1}^{\infty} \mathcal{P}_n t^n. \quad (4.293)$$

Ausmultiplikation liefert für die ersten beiden Koeffizienten

$$\mathcal{P}_{-1} = u_0 = 1$$

$$\text{und } \mathcal{P}_0 = -2u_0 + u_1 = -2 + \frac{1}{3} = -\frac{5}{3}. \quad (4.294)$$

Substituiert man nun t durch $t\tilde{\eta}^2$, so erhält man nach Indexverschiebung die gewünschte Seeley-Reihe mit den $\tilde{\eta}$ -abhängigen Koeffizienten $\tilde{\mathcal{P}}_n$ (Gl. (4.283)):

$$\text{Tr}_{<}^0 = \sum_{l=1}^{\infty} (2l + 3) e^{-t\tilde{\eta}^2 l(l+3)} = \frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} - \frac{5}{3} + \mathcal{O}(t\tilde{\eta}^2). \quad (4.295)$$

Der führende Term ist in Übereinstimmung mit Gleichung (4.285). Sein Koeffizient hängt weder von der Wahl der Parameter a , b und c in Gleichung (4.258), noch von der Wahl von s in Gleichung (4.291) ab.

Die hier nicht angegebenen Koeffizienten $\tilde{\mathcal{P}}_n$ mit $n \geq 1$ sind mindestens von der Ordnung des Fehlers und können vernachlässigt werden. Sie sind der Vollständigkeit halber aber in Anhang E angegeben.

Dieselbe Reihe hat man als Korrektur in der Eulerschen Summenformel ausgerechnet: Für $m \geq 1$ entspricht die Summe über die b_m der mit der Entwicklung von e^{-4t} multiplizierten Summe über die \mathcal{P}_m .

Mit der Seeley–Entwicklung Gl. (4.295) läßt sich die Integration in der Zetafunktion $\zeta_{<}^0$ (Gl. (4.282)) ausführen:

$$\begin{aligned}\zeta_{<}^0(z) &= \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} \sum_{l=1}^{\infty} (2l+3) e^{-t \tilde{\eta}^2 l(l+3)(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))} \\ &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-2} - \frac{5}{3} \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\Lambda dt t^{z-1} + \int_0^\Lambda dt \mathcal{O}(t^z) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \\ &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{\Lambda^{z-1}}{z-1} - \frac{5}{3} \frac{\Lambda^z}{\Gamma(z+1)} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2 \Lambda^{z+1}) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0).\end{aligned}\quad (4.296)$$

Die Korrekturen der Ordnung $\tilde{\eta}^4$ im Eigenwert resultieren in der Zetafunktion wieder in einem Fehler in der konstanten Ordnung.

Die negative Ableitung an der Stelle $z = 0$ ist dann gegeben durch

$$I_{<}^0(\Lambda) = - \left. \frac{d}{dz} \zeta_{<}^0 \right|_{z=0} = \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{1}{\Lambda} + \frac{5}{3} \log \Lambda + \frac{5}{3} \gamma + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.297)$$

Dieser Anteil wird von I^0 (Gl. (4.281)) abgezogen, und man findet folgendes Verhalten für $I_{>}^0$:

$$I_{>}^0(\Lambda) = - \frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 \Lambda - \frac{5}{3} \gamma + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.298)$$

Das stimmt mit dem Ergebnis der Summation Gl. (4.255) überein.

4.6.2 Aufsummation des Bands um Drei — $I_{>}^3$

In Abschnitt 4.5 hat man für die $(2l+1)$ -fach entarteten Eigenwerte um drei den folgenden Ausdruck gefunden (Gl. (4.237)):

$$\omega_{3l} = 3 + \tilde{\eta}^2 (l(l+1) + 3 - \pi^2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4). \quad (4.299)$$

Damit lautet der zu berechnende Beitrag für $I_{>}^3$

$$I_{>}^3(\Lambda) = - \int_\Lambda^\infty \frac{dt}{t} e^{-3t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-\tilde{\eta}^2 t(l(l+1)+3-\pi^2)(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))}. \quad (4.300)$$

Auch hier lassen sich wieder beide Rechenverfahren, nämlich das Ersetzen der Summation durch Integration mittels der Eulerschen Summationsformel und die Berechnung mit Hilfe der Zetafunktion anwenden.

In der Eulerschen Summationsformel tauchte in der Korrektur der in dieser Ordnung relevante Koeffizient b_0 auf. Er ist unabhängig von der speziellen Funktion, über die summiert wird (vgl. Gl. (4.252)), so daß man hier nach Anwenden der Summationsformel und der Substitution $y = l(l+1) + 3 - \pi^2$ den Ausdruck

$$\begin{aligned}I_{>}^3(\Lambda) &= - \int_\Lambda^\infty \frac{dt}{t} e^{-3t} \left(\int_{3-\pi^2}^\infty dy e^{-y \tilde{\eta}^2 t} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{6} \right) e^{-\tilde{\eta}^2 t(3-\pi^2)} + \mathcal{O}(t) \right) \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \\ &= - \frac{3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2)}{\tilde{\eta}^2} \Gamma\left(-1, (3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2))\Lambda\right) + \frac{1}{3} \text{Ei}\left(- (3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2))\Lambda\right) + \\ &\quad + \mathcal{O}(\Lambda^0) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0)\end{aligned}\quad (4.301)$$

erhält.

Entwickelt man wieder nach Potenzen von Λ , so findet man:

$$I_{>}^3(\Lambda) = -\frac{1}{\tilde{\eta}^2\Lambda} + \left(-\frac{3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{8}{3} + \pi^2\right) \log \Lambda + \left(-\frac{3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{8}{3} + \pi^2\right) \gamma + \mathcal{O}(\Lambda^0) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.302)$$

Die Korrektur zum Eigenwert liefert in $I_{>}^3$ wieder eine Korrektur der Ordnung $\tilde{\eta}^0$.

Im Gegensatz zur Entwicklung von $I_{>}^0$ (Gl. (4.255)) zeigt diese Reihe aufgrund der mit $\mathcal{O}(1/\tilde{\eta}^2)$ gehenden Koeffizienten eine sehr schlechte Konvergenz. Dies sieht man, wenn man Gleichung (4.300) numerisch z.B. bis $l = 100$ aufsummiert und mit der Entwicklung nach Λ (Gl. (4.302)) vergleicht, wie in Abbildung 4.5 geschehen.

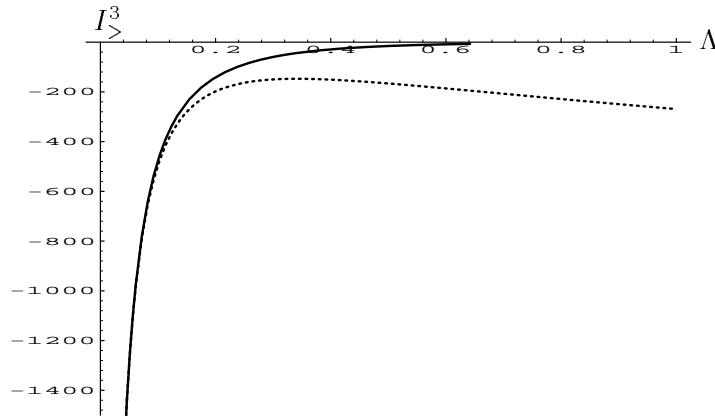


Abbildung 4.5: Vergleich des numerisch bis $l = 100$ aufsummierten Ausdrucks Gl. (4.300) (—) und der Entwicklung Gl. (4.302) (·····) für $I_{>}^3$ für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Dagegen zeigen die Entwicklung nach $\tilde{\eta}$

$$I_{>}^3 = -\frac{3}{\tilde{\eta}^2} \Gamma(-1, 3\Lambda) + \left(\frac{3 - \pi^2}{3\Lambda} e^{-3\Lambda} + \frac{\text{Ei}(-3\Lambda)}{3} - (3 - \pi^2) \Gamma(-1, 3\Lambda) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0), \quad (4.303)$$

die Abschätzung aus der Summenformel Gl. (4.301) und die numerische Aufsummation von Gleichung (4.300) Abweichungen von weniger als einem Prozent voneinander.

Die Entwicklung nach Λ läßt sich aber noch durch den zweiten Rechenweg verifizieren. Dazu berechnet man die zugehörige Zetafunktion

$$\begin{aligned} \zeta^3(z) &= \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} \sum_{l=1}^\infty (2l-1) e^{-\left(3+\tilde{\eta}^2[l(l-1)+3-\pi^2]t(1+\mathcal{O}(\tilde{\eta}^2))\right)} \\ &= \sum_{l=1}^\infty (2l+a) \left[(l+b)(l+c) \right]^{-z} \tilde{\eta}^{-2z} \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \\ &= Z(z) \tilde{\eta}^{-2z} \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \end{aligned} \quad (4.304)$$

mit

$$\begin{aligned} a &= -1 \quad \text{und} \\ b, c &= -\frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4(3 - \pi^2 + 3/\tilde{\eta}^2)} \right). \end{aligned} \quad (4.305)$$

Diese Werte für b und c sind keine natürlichen Zahlen, so daß man die Ableitung von $Z(z)$ durch die Hurwitzsche Zetafunktion ausdrücken muß (Gl. (4.275)):

$$\begin{aligned} Z'(0) &= 2\zeta'_H(-1, b+1) + 2\zeta'_H(-1, c+1) - (a-b-c) \log 2\pi + \\ &+ (a-2b) \log \Gamma(b+1) + (a-2c) \log \Gamma(c+1) - \frac{(b-c)^2}{2}. \end{aligned} \quad (4.306)$$

Für kleine $\tilde{\eta}$ werden b und c betragsmäßig sehr groß, und man kann den darin vorkommenden $\log \Gamma(x)$ nach der Stirling-Formel nähern [66, Gl. 6.1.40]:

$$\log \Gamma(x) = \left(x - \frac{1}{2} \right) \log x - x + \frac{1}{2} \log(2\pi) + \mathcal{O}(1/x). \quad (4.307)$$

Die höheren Terme liefern Beiträge der Ordnung $\tilde{\eta}$. Zusammen mit dem Vorfaktor werden dies Terme von konstanter Ordnung, welche vernachlässigt werden können, da der aus der Unkenntnis der Eigenwerte kommende Fehler von derselben Ordnung ist.

Außerdem benutzt man noch die folgende Entwicklung für die Hurwitzsche Zetafunktion :

$$\zeta_H(z, x) = \sum_{n=0}^N (n+x)^{-z} + \frac{1}{\Gamma(z)} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{B_\nu}{\nu!} \Gamma(z+\nu-1) (N+x)^{1-z-\nu}, \quad (4.308)$$

aus welcher man einen Ausdruck für die Ableitung an der Stelle $z = -1$ bekommen kann:

$$\begin{aligned} \zeta'_H(-1, x) &= - \sum_{n=0}^N (n+x) \log(n+x) - \frac{1}{4}(N+x)^2 + \frac{1}{2}(N+x)^2 \log(N+x) + \\ &+ \frac{1}{2}(N+x) \log(N+x) + \frac{1}{12} + \frac{1}{12} \log(N+x) + \mathcal{O}((N+x)^{-2}). \end{aligned} \quad (4.309)$$

Für große x erhält man schon für $N = 0$ einen konvergenten Ausdruck:

$$\zeta'_H(-1, x) = \frac{1}{2} \left(x^2 - x + \frac{1}{6} \right) \log x - \frac{x^2}{4} + \frac{1}{12} + \mathcal{O}(1/x^2). \quad (4.310)$$

Hier sind die höheren Terme von der Ordnung $\tilde{\eta}^2$ und werden wieder vernachlässigt.

Setzt man diese beiden Ausdrücke Gl. (4.307) und Gl. (4.310) in die Ableitung Gleichung (4.306) ein, so findet man für große b und c an der Stelle Null:

$$\begin{aligned} Z'(0) &= -\frac{2}{3} - a(2+b+c) + (b+c)^2 + (b+c) - bc + \left(\frac{1}{6} + \frac{a}{2} + ab - b^2 \right) \log(1+b) + \\ &+ \left(\frac{1}{6} + \frac{a}{2} + ac - c^2 \right) \log(1+c) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \end{aligned} \quad (4.311)$$

Zusammen mit dem bereits berechnetem Wert von Z an der Stelle Null (Gl. (4.264)) ergibt sich, wenn wie hier $a = b + c$ gilt, analog zu Gleichung (4.281) für I der Ausdruck

$$I^{abc} = -\left(\frac{1}{6} + \frac{b+c}{2} + bc\right) \log\left((b+1)(c+1)\tilde{\eta}^2\right) + \left(\frac{2}{3} + b + c + bc\right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0), \quad (4.312)$$

bzw. wenn man die konkreten Werte für a , b und c (Gl. (4.305)) einsetzt:

$$I^3 = -\left(\frac{3}{\tilde{\eta}^2} + \frac{8}{3} - \pi^2\right) \log\left(3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2)\right) + \left(\frac{3}{\tilde{\eta}^2} + \frac{8}{3} - \pi^2\right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0), \quad (4.313)$$

oder nach $\tilde{\eta}$ entwickelt:

$$I^3 = \frac{3 - 3 \log 3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{1 + 8 \log 3 - 3\pi^2 \log 3}{3} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.314)$$

Auch hier muß von diesem Beitrag für den gesamten t -Bereich der Beitrag $I_{<}^3$ für kleine t wieder abgezogen werden, um insgesamt $I_{>}^3$ zu erhalten. Analog zur Berechnung auf Seite 114 wird der Integrand der Zetafunktion $\zeta_{>}^3$ dazu in eine Seeley-Reihe entwickelt:

$$e^{-3t} \sum_{l=1}^{\infty} (2l-1) e^{-\tilde{\eta}^2 t[(l-1)+3-\pi^2]} = \sum_{l=1}^{\infty} (2l+a) e^{-\tilde{\eta}^2 t(l+b)(l+c)} = \sum_{n=-1}^{\infty} \mathcal{R}_n t^n. \quad (4.315)$$

Die ersten beiden Koeffizienten lauten dann

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{-1} &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \quad \text{und} \\ \mathcal{R}_0 &= u_1 - u_0 \left(\frac{b+c}{2} + bc + \frac{1}{2} \right) = -\left(\frac{1}{6} + \frac{b+c}{2} + bc \right). \end{aligned} \quad (4.316)$$

Die höheren Koeffizienten sind ebenfalls in Anhang E angegeben.

Damit läßt sich das Integral in der zu Gleichung (4.282) analogen Zetafunktion $\zeta_{>}^{abc}$ ausführen, und die negative Ableitung an der Stelle Null liefert

$$I_{<}^{abc} = \frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \mathcal{R}_0 \log \Lambda - \mathcal{R}_0 \gamma + \mathcal{O}(\Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.317)$$

Der Fehler in konstanter Ordnung in $\tilde{\eta}$ kommt wieder aus der Unsicherheit der Eigenwerte. Für das gesuchte $I_{>}^{abc}$ ergibt sich also durch Subtraktion der für große b und c mit $a = b + c$ allgemein gültige Ausdruck:

$$\begin{aligned} I_{>}^{abc} &= -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \left(\frac{1}{6} + \frac{b+c}{2} + bc \right) \log\left((b+1)(c+1)\tilde{\eta}^2 \Lambda\right) - \left(\frac{1}{6} + \frac{b+c}{2} + bc \right) \gamma + \\ &\quad + \left(\frac{2}{3} + b + c + bc \right) + \mathcal{O}(\Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \end{aligned} \quad (4.318)$$

Mit den speziellen Werten für b und c (Gl. (4.305)) wird dies zu

$$\begin{aligned} I_{>}^3 &= -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \left(\frac{8}{3} - \pi^2 + \frac{3}{\tilde{\eta}^2} \right) \log\left((3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2))\Lambda\right) - \left(\frac{8}{3} - \pi^2 + \frac{3}{\tilde{\eta}^2} \right) \gamma + \\ &\quad + \left(\frac{8}{3} - \pi^2 + \frac{3}{\tilde{\eta}^2} \right) + \mathcal{O}(\Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \end{aligned} \quad (4.319)$$

Entwickelt nach Potenzen von Λ entsprechen die ersten Terme wieder dem aus der Eulerschen Summationsformel gewonnenen Ausdruck Gl. (4.302):

$$I_{>}^3 = -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} + \left(-\frac{3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{8}{3} + \pi^2\right) \log \Lambda + \left(-\frac{3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{8}{3} + \pi^2\right) \gamma + \\ + \left(-\frac{3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{8}{3} + \pi^2\right) \log \left(3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2)\right) + \mathcal{O}(\Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.320)$$

4.6.3 Abschätzung des Beitrags der kontinuierlichen Eigenwerte — $I_{>}^k$

Der Beitrag zur Spur der Heat kernel $\text{Tr}_{>}^k$, der von dem kontinuierlichen Spektrum von M und von dem Spektrum von \mathring{M} ohne die vier niedrigsten Eigenwerte kommt, läßt sich mit Hilfe der zugehörigen Spektraldichten $\varrho_l(k)$ bzw. $\mathring{\varrho}_l(k)$ berechnen. Dazu betrachtet man als Potential die Differenz zwischen V und \mathring{V} , damit man ein Potential hat, welches im Limes großer \tilde{r} gegen Null geht. Der abgezogene konstante Term \mathring{V} wird als Verschiebung der Eigenwerte $\omega_k = k^2 + \mathring{V}$ wieder berücksichtigt:

$$\left[-\frac{d^2}{d\tilde{r}^2} - \frac{2}{\tilde{r}} \frac{d}{d\tilde{r}} + \frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2} + \hat{V}(\tilde{r}) - \mathring{V}\right] v_{kl}(\tilde{r}) = (\omega_k - \mathring{V}) v_{kl}(\tilde{r}) =: k^2 v_{kl}(\tilde{r}). \quad (4.321)$$

Der Radialteil v_{kl} der Eigenfunktion ist asymptotisch durch eine Linearkombination von Neumann- und Besselfunktionen gegeben und kann geschrieben werden als

$$v_{kl}(\tilde{r}) \sim \frac{1}{\tilde{r}} \sin(k\tilde{r} - 1/2 l\pi + \delta_l) \quad (4.322)$$

mit einem Phase shift $\delta_l(k)$. Für die Lösung des freien Operators mit verschwindendem Potential findet man

$$\mathring{v}_{kl}(\tilde{r}) \sim \frac{1}{\tilde{r}} \sin(k\tilde{r} - 1/2 l\pi). \quad (4.323)$$

Setzt man das System in eine endliche Kugel mit dem Radius R_0 , so muß die Wellenfunktion bei $\tilde{r} = R_0$ verschwinden. Dies führt auf die folgenden Bedingungen:

$$kR_0 - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l = n\pi \quad \text{und} \\ kR_0 - \frac{1}{2}l\pi = \mathring{n}\pi. \quad (4.324)$$

Durch Ableiten erhält man die Spektraldichten, nämlich die Zahl n der Zustände pro k -Intervall:

$$\varrho_l(k) = \frac{\partial n}{\partial k} = \frac{R_0}{\pi} + \frac{1}{\pi} \frac{\partial \delta_l}{\partial k} \quad \text{und} \\ \mathring{\varrho}_l(k) = \frac{\partial \mathring{n}}{\partial k} = \frac{R_0}{\pi}. \quad (4.325)$$

In der Differenz hebt sich die Abhängigkeit vom endlichen Volumen wieder heraus:

$$\varrho_l(k) - \mathring{\varrho}_l(k) = \frac{1}{\pi} \frac{\partial \delta_l}{\partial k}. \quad (4.326)$$

Bestimmt man die Spektraldichten $\varrho_l(k)$ und $\hat{\varrho}_l(k)$ aus den Eigenfunktion $v_{kl}(\tilde{r})$ bzw. $\hat{v}_{kl}(\tilde{r})$ zum Eigenwert $\omega_k = k^2 + \hat{V}$, so lassen sich die Beiträge des kontinuierlichen Spektrums von M und des Spektrums von \hat{M} zur Spur ohne die vier niedrigsten Eigenwerte wie folgt aufaddieren:

$$\begin{aligned} \text{Tr}^k &= \left(\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_0^{\infty} dk \left(\varrho_l(k) - \hat{\varrho}_l(k) \right) e^{-k^2 t} e^{-\hat{V} t} \right) + 4 e^{-t\hat{\omega}} \\ &= \left(\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_0^{\infty} dk \frac{1}{\pi} \frac{\partial \delta}{\partial k} e^{-k^2 t} e^{-\hat{V} t} \right) + 4 e^{-t\hat{\omega}} . \end{aligned} \quad (4.327)$$

Die Entartung bezüglich der Winkelanteile ist in der Summe über l berücksichtigt.

Bei einer ersten Möglichkeit den Phase shift abzuschätzen, bedient man sich der Bornschen Näherung [76, S. 122]. Danach ist der Phase shift eines radialsymmetrischen Problems, dessen Potential im Unendlichen verschwindet, gegeben durch

$$\delta_l(k) = -k \int_0^{\infty} [j_l(k\tilde{r})]^2 \left(\hat{V}(\tilde{r}) - \hat{V} \right) \tilde{r}^2 d\tilde{r} . \quad (4.328)$$

Eingesetzt in Gleichung (4.327) liefert das den folgenden Ausdruck für die Spur, in der die niedrigsten Eigenwerte noch nicht abgezogen wurden:

$$\text{Tr}_{\text{Born}}^k = - \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_0^{\infty} dk \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial k} \left(k \int_0^{\infty} [j_l(k\tilde{r})]^2 \left(\hat{V}(\tilde{r}) - \hat{V} \right) \tilde{r}^2 d\tilde{r} \right) e^{-tk^2} e^{-t\hat{V}} . \quad (4.329)$$

Die l -Summation läßt sich mit Hilfe der Beziehung [66, Gl. 10.1.50]

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l^2(z) = 1 \quad (4.330)$$

leicht ausführen, wenn man Summation und Integration vertauscht:

$$\text{Tr}_{\text{Born}}^k = - \int_0^{\infty} dk \frac{1}{\pi} \frac{\partial}{\partial k} \left(k \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left(\hat{V}(\tilde{r}) - \hat{V} \right) \right) e^{-tk^2} e^{-t\hat{V}} . \quad (4.331)$$

Damit ist aber die k -Abhängigkeit aus dem \tilde{r} -Integral verschwunden, und die Ableitung nach k ergibt Eins. Das verbleibende Integral über k ist dann ein Gaußsches Integral:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\text{Born}}^k &= - \int_0^{\infty} dk \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left(\hat{V}(\tilde{r}) - \hat{V} \right) e^{-tk^2} e^{-t\hat{V}} \\ &= - \frac{4\pi t}{(4\pi t)^{3/2}} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left(\hat{V}(\tilde{r}) - \hat{V} \right) e^{-t\hat{V}} . \end{aligned} \quad (4.332)$$

Bei der \tilde{r} -Integration muß man wieder beachten, daß das Potential um \tilde{R} zentriert ist. Analog zur Integration bei der Berechnung der Wirkung (Gl. (3.98)) wird auch hier wieder partiell integriert, $\tilde{r} - \tilde{R} = \xi$ substituiert und mit einem in $\tilde{\eta}$ exponentiell kleinen Fehler der Integrationsbereich auf die ganze Achse ausgedehnt:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left(\hat{V}(\tilde{r}) - \hat{V} \right) &= -\frac{1}{3} \int_0^{\infty} \tilde{r}^3 \hat{V}'(\tilde{r}) d\tilde{r} \\ &= -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^3 V'(\xi) d\xi - \tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 V'(\xi) d\xi - \tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi V'(\xi) d\xi - \frac{\tilde{R}^3}{3} \int_{-\infty}^{\infty} V'(\xi) d\xi . \end{aligned} \quad (4.333)$$

Ebenfalls wie bei der Berechnung der Wirkung gezeigt (Seite 56), sind die Koeffizientenfunktionen der Bounce-Lösung ungerade für geraden Index und umgekehrt. Demzufolge ist die Ableitung des Potentials $V'(\xi) = 12\tilde{\Phi}\tilde{\Phi}'$ ebenfalls in gerader Ordnung ungerade und umgekehrt. Es tragen also aus Gleichung (4.333) jeweils nur zwei Terme bei: In gerader Ordnung sind dies ein Oberflächenterm proportional zu \tilde{R}^2 und ein konstanter Term:

$$\begin{aligned} -\tilde{R}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi V_i'(\xi) d\xi &= O_i \tilde{R}^2 \quad \text{und} \\ -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^3 V_i'(\xi) d\xi &= P_i \quad i \text{ gerade} \end{aligned} \quad (4.334)$$

und in ungerader Ordnung ein Volumen- und ein linearer Term:

$$\begin{aligned} -\frac{\tilde{R}^3}{3} \int_{-\infty}^{\infty} V_j'(\xi) d\xi &= v_j \tilde{R}^3 \quad \text{und} \\ -\tilde{R} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 V_j'(\xi) d\xi &= L_j \tilde{R} \quad j \text{ ungerade.} \end{aligned} \quad (4.335)$$

Da Verwechslungen nicht zu befürchten sind, können die Bezeichnungen aus Abschnitt 3.3 hier für andere Ausdrücke benutzt werden. Damit findet man für das \tilde{r} -Integral:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 (V(\xi) - \mathring{V}(\xi)) &= \\ (P_0 + O_0 \tilde{R}^2) + \tilde{\eta} (L_1 \tilde{R} + v_1 \tilde{R}^3) + \tilde{\eta}^2 (P_2 + O_2 \tilde{R}^2) + \dots \end{aligned} \quad (4.336)$$

Nach Gleichung (3.138) enthält \tilde{R} aber auch noch $\tilde{\eta}$ -Abhängigkeiten

$$\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}} + \frac{2 - 3\pi^2}{36} \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) = \frac{1}{\tilde{\eta}} + a_{-1} \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \quad (4.337)$$

so daß sich für das \tilde{r} -Integral schließlich folgende Entwicklung nach $\tilde{\eta}$ ergibt:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} d\tilde{r} \tilde{r}^2 (V(\xi) - \mathring{V}(\xi)) &= \\ \frac{1}{\tilde{\eta}^2} (O_0 + v_1) + (P_0 + L_1 + O_2 + v_3 + 2a_1 O_0 + 3a_1 v_1) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \end{aligned} \quad (4.338)$$

O_0 und v_1 lassen sich leicht durch Integration über das Potential Gl. (4.15) bzw. Gl. (4.16) berechnen:

$$O_0 = - \int_{-\infty}^{\infty} \xi V_0'(\xi) d\xi = - \int_{-\infty}^{\infty} 12 \xi \operatorname{sech}^3 \xi \sinh \xi d\xi = -12 \quad (4.339)$$

$$\text{und } v_1 = -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} V_1'(\xi) d\xi = -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} -4 \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = \frac{8}{3}. \quad (4.340)$$

Damit ist der führende Term zu $-\frac{28}{3}$ bestimmt.

Der konstante Term in der \tilde{r} -Integration Gl. (4.338) besteht aus folgenden Anteilen:

$$\begin{aligned}
P_0 &= -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^3 V_0'(\xi) d\xi = -\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 6 \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = -\pi^2, \\
L_1 &= -\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 V_1'(\xi) d\xi = 4 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \operatorname{sech}^2 \xi d\xi = \frac{2}{3} \pi^2, \\
O_2 &= -\int_{-\infty}^{\infty} \xi V_2'(\xi) d\xi = -6.57973, \\
v_3 &= -\frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} V_3'(\xi) d\xi = -\frac{1}{3} V_3 \Big|_{-\infty}^{\infty} = -\frac{2}{3} \mathring{V}_3 = \frac{20}{27}.
\end{aligned} \tag{4.341}$$

Er lautet damit in Übereinstimmung mit dem ersten Koeffizienten der Seeley-Entwicklung (vgl. Gl. (D.13)):

$$P_0 + L_1 + O_2 + v_3 + 2 \frac{2 - 3\pi^2}{36} O_0 + 3 \frac{2 - 3\pi^2}{36} v_1 = \pi^2 - \frac{4}{27} - 6.57973. \tag{4.342}$$

Eingesetzt in den Ausdruck für die Spur Gl. (4.332) findet man also

$$\operatorname{Tr}_{\text{Born}}^k = -\frac{4\pi t}{(4\pi t)^{3/2}} \left(-\frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{28}{3} + \left(\pi^2 - \frac{4}{27} - 6.57973 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) e^{-\mathring{V}t}. \tag{4.343}$$

Den Anteil zum Logarithmus der Determinante $I_{>}^k$ bekommt man daraus durch Integration über t . Das Integral konvergiert und führt auf die unvollständige Gammafunktion und, bei den jetzt wieder abgezogenen niedrigsten Eigenwerten, auf das Exponentialintegral:

$$\begin{aligned}
I_{>}^k &= -\int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t} \left(\operatorname{Tr}_{\text{Born}}^k + 4 e^{-t\mathring{\omega}_0} \right) \\
&= \frac{4\pi}{(4\pi)^{3/2}} \left(-\frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{28}{3} + \left(\pi^2 - \frac{4}{27} - 6.57973 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \Gamma(-1/2, \mathring{V}\Lambda) - 4\operatorname{Ei}(-\mathring{\omega}_0\Lambda).
\end{aligned} \tag{4.344}$$

Wie man insbesondere an Gleichung (4.332) sieht, entspricht das erste Integral genau dem ersten Term der Seeley-Entwicklung (vgl. Anhang D). Um die höheren t -Potenzen zu bekommen, müßte man über die Bornsche Näherung hinausgehen und weitere Terme der Bornschen Reihe [76, Seite 112] mitnehmen. Vergleicht man die verschiedenen Anteile der Spuren, so erwartet man auch noch Terme mit halbzahligen t -Potenzen, die in der Summe die Beiträge der diskreten Eigenwerte $\operatorname{Tr}_{<}^0$ und $\operatorname{Tr}_{<}^3$ kompensieren, welche aber in der Bornschen Näherung nicht reproduziert werden.

Die Seeley-Entwicklung ist außerdem eine Entwicklung für kleine t , in diesem Abschnitt soll aber eine Näherung für große t berechnet werden. Alternativ wird deshalb probiert, den Phase shift störungstheoretisch zu berechnen. Dazu geht man wieder von der Eigenwertgleichung Gl. (4.321) aus, in der man nun den l -abhängigen Term aus dem radialen Laplace-Operator $\frac{l(l+1)}{\tilde{r}^2}$ analog zu Gleichung (4.207) nach Potenzen von $\tilde{\eta}$ entwickelt, für $v(\tilde{r})$ wieder den Ansatz $v(\tilde{r}) = \hat{\psi}(\tilde{r})/\tilde{r}$ macht und $\tilde{r} - \tilde{R} = \xi$ substituiert (vgl. Gl. (4.208)):

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{d^2}{d\xi^2} + (V_0 - \mathring{V}_0) + \tilde{\eta}(V_1 - \mathring{V}_1) + \tilde{\eta}^2(V_2 - \mathring{V}_2 + l(l+1)) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \right] \psi_{k,l}(\xi) = \\
k^2 \psi_{k,l}(\xi) = (\omega_n - \mathring{V}) \psi_{k,l}(\xi).
\end{aligned} \tag{4.345}$$

Eine Eigenfunktion zum Operator in nullter Ordnung, in der das Potential gleich dem Pöschl–Teller–Potential $V_0 - \mathring{V}_0 = -6 \operatorname{sech}^2 \xi$ ist, ist, wie bereits erwähnt, bei Rajaraman [68, Gl. 3.16] angegeben (vgl. auch Gl. (4.212)):

$$\psi_0(\xi) = e^{ik\xi} \left(3 \tanh^2 \xi - 1 - k^2 - 3ik \tanh \xi \right) =: e^{ik\xi} f_0(\xi). \quad (4.346)$$

Der Klammerausdruck wird dabei mit $f_0(\xi)$ abgekürzt. Das konjugiert Komplexe hiervon ist eine zweite, linear unabhängige Lösung der Differentialgleichung zweiter Ordnung. Aus diesen beiden Lösungen muß man jetzt, da es sich hier ja um den Radialteil einer Eigenwertgleichung handelt, durch Linearkombination eine im Ursprung bei $\tilde{r} = 0$ ($\xi = -\tilde{R}$) reguläre Lösung konstruieren:

$$\Psi = A\psi_0 + B\psi_0^* \quad \text{mit} \quad \lim_{\tilde{r} \rightarrow 0} v(\tilde{r}) = \lim_{\tilde{r} \rightarrow 0} \frac{\Psi(\xi)}{\tilde{r}} < \infty. \quad (4.347)$$

Dazu wählt man die Konstanten wie folgt ($\tanh \tilde{R} \approx 1$ für hinreichend großes \tilde{R}):

$$\begin{aligned} A &= \psi_0^*(-\tilde{R}) = (2 - k^2 - 3ik) e^{ik\tilde{R}}, \\ B &= -\psi_0(-\tilde{R}) = -(2 - k^2 + 3ik) e^{-ik\tilde{R}}. \end{aligned} \quad (4.348)$$

Im Limes großer Argumente ($\xi \rightarrow \infty$) nimmt die Lösung dann durch Anwenden der Additionstheoreme die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \lim_{\xi \rightarrow \infty} \Psi_0 &= e^{ik\tilde{r}} (2 - k^2 - 3ik)(2 - k^2 - 3ik) - e^{-ik\tilde{r}} (2 - k^2 + 3ik)(2 - k^2 + 3ik) \\ &= \cos(k\tilde{r}) 2 \left(-6ik(2 - k^2) \right) + i \sin(k\tilde{r}) 2 \left((2 - k^2)^2 - 9k^2 \right) \\ &= 2i \left(\cos(k\tilde{r}) \sin \tilde{\delta}_0 + \sin(k\tilde{r}) \cos \tilde{\delta}_0 \right) \\ &= 2i \sin(k\tilde{r} + \tilde{\delta}_0). \end{aligned} \quad (4.349)$$

Der dabei eingeführte Phase shift $\tilde{\delta}_0$ beträgt

$$\tan \tilde{\delta}_0 = \frac{-6k(2 - k^2)}{4 - 13k^2 + k^4}, \quad (4.350)$$

woraus sich die zugehörige Spektraldichte berechnen läßt zu

$$\tilde{\rho}_0 = \frac{1}{\pi} \frac{\partial \tilde{\delta}_0}{\partial k} = -\frac{6}{\pi} \frac{2 + k^2}{(k^2 + 1)(k^2 + 4)}. \quad (4.351)$$

Der Index Null bezeichnet hierbei die Störungsordnung und nicht den Wert des Drehimpulses.

Nun betrachtet man die erste Ordnung in der Störungsrechnung. Mit dem Ansatz für die Lösungsfunktion

$$\psi = \psi_0 + \tilde{\eta}\psi_1 + \tilde{\eta}^2\psi_2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (4.352)$$

hat man, da die Eigenwerte unverändert bleiben und sich die höheren Ordnungen nur in der Spektraldichte bemerkbar machen, in der ersten Ordnung die folgende Differentialgleichung zu lösen:

$$-\frac{d^2}{d\xi^2} \psi_1 - 6 \operatorname{sech}^2 \xi \psi_1 - k^2 \psi_1 = -(V_1 - \mathring{V}_1) \psi_0. \quad (4.353)$$

Die beiden homogenen Lösungen entsprechen den Lösungen nullter Ordnung:

$$\begin{aligned}\psi_{1,H} &= \psi_0 \quad \text{und} \\ \psi_{1,H}^* &= \psi_0^*.\end{aligned}\tag{4.354}$$

Eine spezielle Lösung ergibt sich bei gegebenem ψ_0 durch zweimalige Variation der Konstanten zu

$$\psi_{1,S} = \psi_0 \int d\xi \frac{1}{\psi_0^2} \int d\xi (V_1 - \overset{\circ}{V}_1) \psi_0^2,\tag{4.355}$$

bzw. dem konjugiert Komplexem. Die allgemeine Lösung bis einschließlich erster Ordnung

$$\begin{aligned}\Psi &= A \left((1 + \tilde{\eta} a) \psi_0 + \tilde{\eta} \psi_0 \int d\xi \frac{1}{\psi_0^2} \int d\xi (V_1 - \overset{\circ}{V}_1) \psi_0^2 \right) + \\ &+ B \left((1 + \tilde{\eta} b) \psi_0^* + \tilde{\eta} \psi_0^* \int d\xi \frac{1}{\psi_0^{*2}} \int d\xi (V_1 - \overset{\circ}{V}_1) \psi_0^{*2} \right)\end{aligned}\tag{4.356}$$

enthält also vier Konstanten, von denen sich A und B aufgrund der Regularitätsbedingung bzw. durch die (für den Phase shift uninteressante) Normierung festlegen lassen. In der regularisierten Lösung tauchen die übrigen beiden Parameter a und b nur in der Kombination $a + b$ auf, welche sich in der ersten Ordnung der Entwicklung des Phase shifts weghebt.

Einsetzen des ψ_0 aus Gleichung (4.346) in Gleichung (4.355) führt mit der dort definierten Funktion $f_0(\xi)$ auf die folgende konkrete Gestalt für die spezielle Lösung:

$$\begin{aligned}\psi_{1,S} &= e^{ik\xi} \frac{i\overset{\circ}{V}_1}{2k} \left[(\log \cosh \xi - \xi) f_0(\xi) - e^{-2ik\xi} \int_0^\xi e^{2ik\xi'} \tanh \xi' d\xi' f_0^*(\xi) + \right. \\ &+ \left. \frac{3}{2(k^2 - 2)} \left(-3k^2 \operatorname{sech}^2 \xi - 2(2 + k^2) \tanh \xi + 2ik(2 \operatorname{sech}^2 \xi - 3 \tanh \xi) \right) \right].\end{aligned}\tag{4.357}$$

Aus der anderen Lösung ψ_0^* erhält man das konjugiert Komplexe hiervon.

Nun soll das asymptotische Verhalten dieser speziellen Lösung untersucht werden. Dazu betrachtet man jeden einzelnen Term im Limes für große positive und negative ξ : Das Integral und die zweite Zeile in der Lösung Gl. (4.357) gehen in beiden Grenzfällen gegen eine Konstante. Für das Integral im mittleren Term sieht man das z.B. mit der Regel von de l'Hospital:

$$\lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} \frac{\int_0^\xi e^{2ik\xi'} \tanh \xi' d\xi'}{e^{2ik\xi}} = \lim_{\xi \rightarrow \pm\infty} \frac{e^{2ik\xi} \tanh \xi}{2ik e^{2ik\xi}} = \frac{\pm 1}{2ik},\tag{4.358}$$

oder indem man den $\tanh \xi$ im Integranden für betragsmäßig große Argumente gleich ± 1 setzt; für die letzte Zeile sieht man es durch direktes Einsetzen.

Um nun den Grenzwert des ersten Terms aus Gleichung (4.357) abzuschätzen, schreibt man für große positive ξ den Logarithmus analog zu Gleichung (3.80) als

$$\log \cosh \xi = -\log 2 + \log(e^\xi + e^{-\xi}) = -\log 2 + \xi + \log(1 + e^{-2\xi}). \quad (4.359)$$

Für große ξ verschwindet der letzte Term und der Limes wird zu

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} (\log \cosh \xi - \xi) = -\log 2. \quad (4.360)$$

Entsprechend findet man mit der Darstellung

$$\log \cosh \xi = -\log 2 + \log(e^\xi + e^{-\xi}) = -\log 2 - \xi + \log(e^{2\xi} + 1) \quad (4.361)$$

im Limes $\xi \rightarrow -\tilde{R}$ einen zu \tilde{R} proportionalen Term:

$$\lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} (\log \cosh \xi - \xi) = 2\tilde{R} - \log 2. \quad (4.362)$$

Für die gesamte spezielle Lösung aus Gleichung (4.357) ergibt sich damit für das Verhalten für große ξ

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi_{1,S} = e^{ik\xi} \frac{i\mathring{V}_1}{2k} \left[-\log 2 \cdot f_0(\xi) + \frac{1}{2ik} f_0^*(\xi) - \frac{3}{(k^2 - 2)} \left((2 + k^2) + 3ik \right) \right] \quad (4.363)$$

und für das Verhalten am Ursprung

$$\lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \psi_{1,S} = e^{ik\xi} \frac{i\mathring{V}_1}{2k} \left[(2\tilde{R} - \log 2) f_0(-\tilde{R}) - \frac{1}{2ik} f_0^*(-\tilde{R}) + \frac{3}{(k^2 - 2)} \left((2 + k^2) + 3ik \right) \right]. \quad (4.364)$$

Wenn man daraus durch Linearkombination nun eine im Ursprung ($\tilde{r} = 0$ bzw. $\xi = -\tilde{R}$) reguläre Lösung bildet, so tauchen in den Konstanten Terme proportional zu $\tilde{\eta}\tilde{R}$ auf. Da der führende Term von \tilde{R} aber mit $1/\tilde{\eta}$ geht (vgl. Gl. (3.138)), sind dies effektiv Terme nullter Ordnung in $\tilde{\eta}$, die auch noch zum Phase shift bzw. zur Spektraldichte in nullter Ordnung beitragen. Die Ordnungen der Eigenfunktionen stimmen also nicht mit den Ordnungen des Phase shifts überein.

So gibt es in allen höheren Ordnungen der Eigenfunktion Terme, die zur nullten Ordnung des Phase shifts beitragen. In der zweiten Ordnung gewinnt man z.B. durch Einsetzen des Störungsansatzes für die Eigenfunktion eine Differentialgleichung analog zu Gleichung (4.353), deren zugehörige homogene Differentialgleichung wieder der nullten und der ersten Ordnung entspricht. Für die spezielle Lösung findet man ebenfalls analog

$$\psi_{2,S} = \psi_0 \int d\xi \frac{1}{\psi_0^2} \int d\xi \left((V_2 - \mathring{V}_2) \psi_0 + (V_1 - \mathring{V}_1) \psi_1 + l(l+1) \psi_0 \right) \psi_0, \quad (4.365)$$

bzw. das hierzu konjugiert Komplexe. Betrachtet man die Asymptotik des mittleren Terms für $\xi \rightarrow -\tilde{R}$, so findet man mit Hilfe der partiellen Integration

$$\int \xi^n e^{ik\xi} d\xi = \frac{1}{ik} \xi^n e^{ik\xi} + \mathcal{O}(\xi^{n-1}), \quad (4.366)$$

wenn man nur die führende Ordnung betrachtet, einen Term proportional zu $(\tilde{\eta}\tilde{R})^2$:

$$\begin{aligned}
& \lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \tilde{\eta}^2 \psi_0 \int d\xi \frac{1}{\psi_0^2} \int d\xi (V_1 - \mathring{V}) \psi_1 \psi_0 \sim \\
& \sim \lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \tilde{\eta}^2 e^{ik\xi} f_0(-\tilde{R}) \int d\xi \frac{e^{-2ik\xi}}{f_0^2(-\tilde{R})} \int d\xi (-2\mathring{V}_1) \left(\frac{i\mathring{V}_1}{2k} 2\xi \right) f_0^2(-\tilde{R}) e^{2ik\xi} \sim \\
& \sim \tilde{\eta}^2 e^{ik\xi} f_0(-\tilde{R}) \left(-\frac{i\mathring{V}_1}{k} \tilde{R} \right)^2 \frac{1}{2!} \sim (\tilde{\eta}\tilde{R})^2. \tag{4.367}
\end{aligned}$$

Genauso liefert die Lösungsfunktion in i -ter Ordnung einen Term proportional zu $(\tilde{\eta}\tilde{R})^i$.

Alle diese Terme, die Potenzen von $\tilde{\eta}\tilde{R}$ liefern, kommen aus der speziellen Lösung und sind proportional zu V_1 bzw. \mathring{V}_1 . Die zweite Ordnung des Potentials $V_2 - \mathring{V}_2$ geht nämlich in beiden Richtungen für große positive und negative Argumente gegen Null und das Integral hierüber ist im Limes nicht proportional zu \tilde{R} . Einen Beitrag proportional zu \tilde{R} bekommt man nur in den ungeraden Ordnungen des Potentials, also als nächstes in der dritten Ordnung in $\tilde{\eta}$. Dieser Term ist aber schon proportional zu $\tilde{\eta}^3$ und liefert Potenzen in $\tilde{\eta}^3\tilde{R}$. Die homogenen Differentialgleichungen bleiben in allen höheren Ordnungen immer gleich, und die zugehörigen Lösungen liefern, wie in Gleichung (4.346) gesehen, ebenfalls keinen Beitrag proportional zu \tilde{R} .

Diese Beiträge proportional zu \mathring{V}_1 und $(\tilde{\eta}\tilde{R})^i$ lassen sich zu einer Exponentialfunktion aufaddieren:

$$\sum_j (-i\tilde{\eta} \frac{\mathring{V}_1}{k} \tilde{R})^j \frac{1}{j!} f_0 = \exp(-i\tilde{\eta} \frac{\mathring{V}_1}{k} \tilde{R}) f_0. \tag{4.368}$$

Für die nullte und erste Ordnung lassen sich die berechneten Terme direkt mit den Koeffizienten dieser Reihe vergleichen. Die führenden Terme der höheren Koeffizienten lassen sich dann durch vollständige Induktion ganz analog zu der Abschätzung in der zweiten Ordnung (Gl. (4.367)) berechnen: In $(j+1)$ -ter Ordnung lautet der zu \mathring{V}_1 proportionale Term der speziellen Lösung:

$$\psi_0 \int \frac{1}{\psi_0^2} \int (V_1 - \mathring{V}_1) \psi_j \psi_0, \tag{4.369}$$

wobei die führende Ordnung von ψ_j im Negativen nach Induktionsvoraussetzung wie

$$\lim_{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \psi_j \sim \left(-\frac{i\mathring{V}_1\tilde{R}}{k} \right)^j \frac{1}{j!} f_0(-\tilde{R}) e^{ik\xi} \tag{4.370}$$

geht und $V_1 - \mathring{V}_1$ für große negative Argumente den Wert $-2\mathring{V}_1$ annimmt. Die erste Integration in der speziellen Lösung liefert nun in der führenden Ordnung einen Faktor $-\frac{i}{2k}$ (s. Gl. (4.366)), die zweite Integration liefert $\frac{1}{j+1}$ und erhöht die Potenz von ξ bzw. im betrachteten Limes von $-\tilde{R}$ um Eins. Damit ist Gleichung (4.368) gezeigt.

Die mit der Exponentialfunktion gefundene Asymptotik läßt sich auch bestätigen, indem man die nach Potenzen von $\tilde{\eta}$ entwickelte Eigenwertgleichung Gl. (4.345) unter

Hinzunahme des Terms $\tilde{\eta}(V_1 - \mathring{V}_1)$ asymptotisch löst. Für große positive Argumente verschwindet das Potential, die Eigenwertgleichung wird zur freien Gleichung und zwei linear unabhängige Lösungen in der ersten Ordnung sind z.B. die ebenen Wellen:

$$\psi_{1,1} \rightarrow e^{ik\xi} \quad \text{und} \quad \psi_{1,2} \rightarrow e^{-ik\xi} \quad (\xi \rightarrow +\infty). \quad (4.371)$$

Dies entspricht dem asymptotischen Verhalten der gefundenen Lösung Gl. (4.346) und Gl. (4.363).

Für negative ξ nimmt das Potential den Wert $-2\tilde{\eta}\mathring{V}_1$ an, die Eigenwertgleichung Gl. (4.345) wird dann zu

$$\left[-\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\tilde{\eta}\mathring{V}_1 \right] \psi = k^2 \psi \quad (4.372)$$

mit den Lösungen

$$\psi_{1,3} \rightarrow e^{i\sqrt{k^2+2\tilde{\eta}\mathring{V}_1}\xi} \quad \text{und} \quad \psi_{1,4} \rightarrow e^{-i\sqrt{k^2+2\tilde{\eta}\mathring{V}_1}\xi} \quad (\xi \rightarrow -\infty), \quad (4.373)$$

oder Linearkombinationen aus diesen. Die Taylorentwicklung von $\psi_{1,3}$ nach $\tilde{\eta}$

$$e^{i\sqrt{k^2+2\tilde{\eta}\mathring{V}_1}\xi} = e^{ik\xi} - \frac{i\mathring{V}_1\tilde{\eta}\xi}{k} e^{ik\xi} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \quad (4.374)$$

reproduziert in der ersten Ordnung die Asymptotik aus Gleichung (4.364).

Mit der aufsummierten Exponentialfunktion (Gl. (4.368)) erhält man also für die Lösung der Eigenwertgleichung bis zur ersten Ordnung eine Funktion, die sich für $\xi \rightarrow -\tilde{R}$ verhält wie eine Linearkombination aus

$$\psi(\xi \rightarrow -\tilde{R}) = e^{-ik\tilde{R}} e^{-i\tilde{\eta}\frac{\mathring{V}_1}{k}\tilde{R}} \left(f_0(-\tilde{R}) + \tilde{\eta}f_1(-\tilde{R}) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) =: e^{-ik\tilde{R}} e^{-i\tilde{\eta}\frac{\mathring{V}_1}{k}\tilde{R}} f(-\tilde{R}) \quad (4.375)$$

mit seinem konjugiert Komplexen. Dabei ist $f(\xi) = f_0(\xi) + \tilde{\eta}f_1(\xi) + \dots$ der Teil der Lösungsfunktion, der sich nicht als Exponentialfunktion schreiben läßt. Seine nullte Ordnung f_0 ist bereits in Gleichung (4.346) angegeben. Die Koeffizienten der Linearkombination müssen wieder so bestimmt werden, daß die Lösung im Ursprung regulär ist:

$$\begin{aligned} A &= e^{ik\tilde{R}} e^{i\tilde{\eta}\frac{\mathring{V}_1}{k}\tilde{R}} f^*(-\tilde{R}) \quad \text{und} \\ B &= -e^{-ik\tilde{R}} e^{-i\tilde{\eta}\frac{\mathring{V}_1}{k}\tilde{R}} f(-\tilde{R}). \end{aligned} \quad (4.376)$$

Die reguläre Eigenfunktion nimmt dann für große, positive Argumente folgende asymptotische Gestalt an:

$$\begin{aligned} \Psi(\xi \rightarrow \infty) &= e^{ik\tilde{r}} e^{i\tilde{\eta}\frac{\mathring{V}_1}{k}\tilde{R}} f^*(-\tilde{R})f(\infty) - e^{-ik\tilde{r}} e^{-i\tilde{\eta}\frac{\mathring{V}_1}{k}\tilde{R}} f(-\tilde{R})f^*(\infty) \\ &= 2i \sin(k\tilde{r} + \tilde{\eta}\tilde{R}\frac{\mathring{V}_1}{k} + \tilde{\delta}) \end{aligned} \quad (4.377)$$

mit

$$\tan \tilde{\delta} = \frac{\operatorname{Im} f^*(-\tilde{R})f(\infty)}{\operatorname{Re} f^*(-\tilde{R})f(\infty)}. \quad (4.378)$$

$f(\xi)$ geht für große Argumente asymptotisch gegen eine Konstante und liefert den Phase shift $\tilde{\delta}$, dessen nullte Ordnung bereits in Gleichung (4.350) berechnet wurde:

$$\tilde{\delta} = -\arctan \frac{6k(2-k^2)}{4-13k^2+k^4} + \tilde{\eta}\tilde{\delta}_1 + \tilde{\eta}^2\tilde{\delta}_2 + \dots. \quad (4.379)$$

Aus der Exponentialfunktion bekommt man aber noch einen weiteren Beitrag zum Phase shift

$$\hat{\delta} = \tilde{\eta}\tilde{R}\frac{\overset{\circ}{V}_1}{k}, \quad (4.380)$$

welcher proportional zu $\tilde{\eta}\tilde{R}$ ist und also, wenn man den Ausdruck Gl. (3.138) für \tilde{R} einsetzt, ebenfalls zur nullten Ordnung des Phase shifts beiträgt:

$$\delta = \tilde{\delta} + \hat{\delta} = \arctan \frac{-6k(2-k^2)}{4-13k^2+k^4} + \tilde{\eta}\tilde{R}\frac{\overset{\circ}{V}_1}{k} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}). \quad (4.381)$$

Er liefert die Spektraldichte

$$\hat{\varrho} = -\tilde{\eta}\tilde{R}\frac{1}{\pi}\frac{\overset{\circ}{V}_1}{k^2}. \quad (4.382)$$

Dies sind aber immer noch nicht alle Beiträge zur nullten Ordnung des Phase shifts: Mit dem Störungsansatz für die Eigenfunktionen Gl. (4.352) hat man nämlich nur die höheren Ordnungen der kontinuierlichen, zweifach entarteten Eigenwerte berechnet. Durch die erste Ordnung des Potentials wird aber das gesamte Potential für große negative Argumente um $2\tilde{\eta}\overset{\circ}{V}_1$ nach unten verschoben, während das Verhalten für große, positive Argumente unverändert bleibt. Es entsteht also ein Bereich $-2\tilde{\eta}\overset{\circ}{V}_1 < \omega - \overset{\circ}{V} < 0$, in dem gebundene, einfach entartete Zustände existieren können. Die zugehörigen Eigenfunktionen zeigen folgendes asymptotisches Verhalten: Im Negativen oszillieren sie, genauso wie die bereits in nullter Ordnung gefundenen, zweifach entarteten Kontinuumslösungen. Im Positiven verhalten sie sich dagegen wie gebundene Zustände: sie gehen exponentiell gegen Null. Betrachtet man die Gleichung jetzt nicht mehr als eindimensionales Problem, sondern wieder als Radialteil einer dreidimensionalen Gleichung, so werden diese Zustände zu unendlich vielen, dicht liegenden, einfach entarteten, gebundenen Zuständen. Diese Zustände lassen sich nicht störungstheoretisch aus den Kontinuumslösungen berechnen. Sie liefern aber noch einen weiteren Beitrag zum Phase shift und zur Spektraldichte, welcher ebenfalls proportional zu $\overset{\circ}{V}_1$ ist und mit δ_v bzw. ϱ_v bezeichnet werden soll.

Mit der Kenntnis der Spektraldichte

$$\begin{aligned} \varrho &= \tilde{\varrho} + \hat{\varrho} + \varrho_v \\ &= -\frac{6}{\pi} \frac{2+k^2}{(k^2+1)(k^2+4)} - \tilde{\eta}\tilde{R}\frac{1}{\pi}\frac{\overset{\circ}{V}_1}{k^2} + \varrho_v + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \end{aligned} \quad (4.383)$$

läßt sich nun die führende Ordnung des kontinuierlichen Teils der Spur nach Gleichung (4.327) berechnen: Durch die Entwicklung des Laplace–Operators in der Eigenwertgleichung Gl. (4.345) hat das Potential noch zusätzliche konstante Terme proportional zu $\tilde{\eta}^2 l(l+1)$ bekommen, welche ebenfalls eine Verschiebung der Eigenwerte bewirken, und deswegen, wie die einzelnen Ordnungen des freien Potentials, in dem Ausdruck für die Spur im Exponenten auftauchen. Eingesetzt in Gleichung (4.327) ergibt sich:

$$\text{Tr}_{>}^k = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int_0^{\infty} dk \left\{ -\frac{6}{\pi} \frac{k^2+2}{(k^2+1)(k^2+4)} - \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\overset{\circ}{V}_1}{\pi k^2} + \varrho_v + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \right\} \cdot e^{-(k^2+\overset{\circ}{V})t - \tilde{\eta}^2 l(l+1)t + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)} + 4 e^{-\overset{\circ}{\omega}_0 \Lambda} . \quad (4.384)$$

Die l –Summation läßt sich mit Hilfe der Eulerschen Summationsformel (Gl. (4.245)) ausführen:

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-\tilde{\eta}^2 l(l+1)t} &= \int_0^{\infty} dy e^{-\tilde{\eta}^2 y t} + \frac{e^{0t} + 0}{2} + b_0 e^{0t} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \\ &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} + \frac{1}{3} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) . \end{aligned} \quad (4.385)$$

Dies entspricht auch der bei der Aufsummation des Bands um Null (Abschnitt 4.6.1) benutzten Entwicklung Gl. (4.291) mit verschwindendem Parameter s .

Die weiteren Terme werden zu höheren Ordnungen in der Spur: So kommen im Exponenten noch die anderen Ordnungen in der Entwicklung von $\overset{\circ}{V}$ nach $\tilde{\eta}$ vor. Sie liefern in der Spur Korrekturen in linearer Ordnung in $\tilde{\eta}$ und können deshalb vernachlässigt werden, wohingegen der Term mit $\tilde{\eta}^2 l(l+1)$, obwohl er von höherer Ordnung ist, aufgrund der l –Abhängigkeit nach der Summation zur führenden Ordnung wird. Die im Exponenten noch vorkommenden Terme proportional zu $l(l+1)$ sind von vierter Ordnung in $\tilde{\eta}$ (vgl. die Entwicklung Gl. (4.207)) und liefern Korrekturen in der konstanten Ordnung in $\tilde{\eta}$.

Außerdem gibt es in den speziellen Lösungen für die Eigenfunktionen noch Terme proportional zu $l(l+1)$, welche aber nach Einsetzen von \tilde{R} ebenfalls Korrekturen in höheren Ordnungen in $\tilde{\eta}$ liefern. So geht in der zweiten Ordnung der letzte Term aus Gleichung (4.365) wie $\tilde{\eta}^2 \tilde{R}$:

$$\tilde{\eta}^2 \psi_0 \int \frac{1}{\psi_0^2} \int l(l+1) \psi_0^2 \xrightarrow{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \tilde{\eta}^2 \tilde{R} , \quad (4.386)$$

der entsprechende Term der dritten Ordnung geht wie $\tilde{\eta}^3 \tilde{R}^2$:

$$\tilde{\eta}^3 \psi_0 \int \frac{1}{\psi_0^2} \int l(l+1) \xi \psi_0^2 \xrightarrow{\xi \rightarrow -\tilde{R}} \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^2 , \quad (4.387)$$

und so fort. Nach Einsetzen von \tilde{R} hat man also nur lineare Terme in $\tilde{\eta}$.

Auch die abgezogenen niedrigsten Eigenwerte von $\overset{\circ}{M}$ liefern erst Beiträge in der konstanten Ordnung.

Damit sind die Beiträge zur führenden Ordnung der Spur identifiziert, sie lauten:

$$\mathrm{Tr}_>^k = \frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} \int_0^\infty dk \left\{ -\frac{6}{\pi} \frac{k^2 + 2}{(k^2 + 1)(k^2 + 4)} - \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\mathring{V}_1}{\pi k^2} + \varrho_v \right\} e^{-(k^2 + \mathring{V}_0)t} \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \right). \quad (4.388)$$

Um die k -Integration ausführen zu können, macht man in der Spektraldichte nun die folgende Partialbruchzerlegung:

$$\frac{k^2 + 2}{(k^2 + 1)(k^2 + 4)} - \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\mathring{V}_1}{\pi k^2} + \varrho_v = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{k^2 + 1} + \frac{2}{k^2 + 4} \right) - \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\mathring{V}_1}{\pi k^2} + \varrho_v. \quad (4.389)$$

Die Integration über die ersten beiden Terme führt auf das Fehlerintegral Φ [71, Gl. 3.466.1]:

$$\int_0^\infty \frac{1}{k^2 + a} e^{-k^2 t} dk = \frac{e^{at}}{\sqrt{a}} \frac{\pi}{2} \left(1 - \Phi(\sqrt{at}) \right). \quad (4.390)$$

Die Integration über den dritten Term divergiert an der unteren Grenze. Sie läßt sich aber mittels Zetafunktion analytisch fortsetzen. Man findet:

$$-\tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\mathring{V}_1}{\pi} \int_0^\infty \frac{1}{k^2} e^{-k^2 t} dk = -\tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\mathring{V}_1}{\pi} \sqrt{\pi t} = -\tilde{\eta} \tilde{R} \frac{2\mathring{V}_1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{t}. \quad (4.391)$$

Damit wird die Spur aus Gleichung (4.388) (vgl. auch Gl. (4.384)) zu

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}_>^k &= \left(\frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} + \frac{1}{3} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \left(- \left[e^t \left(1 - \Phi(\sqrt{t}) \right) + e^{4t} \left(1 - \Phi(\sqrt{4t}) \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{2\mathring{V}_1 t}{\sqrt{4\pi t}} + \int_0^\infty \varrho_v e^{-k^2 t} dk + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \right) e^{-\mathring{V}t} \\ &= -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} \left[e^{-3t} + 1 - \left(e^{-3t} \Phi(\sqrt{t}) + \Phi(\sqrt{4t}) \right) - \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{2\mathring{V}_1}{\sqrt{4\pi}} \sqrt{t} e^{-4t} + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\infty \varrho_v e^{-(k^2+4)t} dk \right] \cdot \left(1 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \right). \end{aligned} \quad (4.392)$$

Das Ergebnis läßt sich noch wie folgt kontrollieren: Die Summe der Spuren der beiden Bänder um Null und um Drei und des Beitrages der kontinuierlichen Eigenwerte sollte die Seeley-Entwicklung ergeben, $\mathrm{Tr}'_< \stackrel{!}{=} \mathrm{Tr}_>^0 + \mathrm{Tr}_>^3 + \mathrm{Tr}_>^k$. Um das zu überprüfen, entwickelt man die führende Ordnung in $\tilde{\eta}$ des gerade berechneten Ausdrucks Gl. (4.392) in eine Potenzreihe in t . Dabei macht es erst in der konstanten Ordnung einen Unterschied, ob man die niedrigsten Eigenwerte aus der Seeley-Entwicklung herausnimmt oder nicht. Man

bekommt:

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_>^k &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left\{ -\frac{2}{t} + 3 - \frac{9}{2}t + \dots \right. \\
&+ \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{4\pi}{(4\pi t)^{3/2}} \left\{ 12t - 24t^2 + \frac{176}{5}t^3 + \dots \right. \\
&+ \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{4\pi}{(4\pi t)^{3/2}} \left\{ -8t + 32t^2 - 64t^3 + \dots \right. \\
&+ \int_0^\infty \varrho_v e^{-k^2 t - 4t} dk + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\tilde{\eta}}\right) \left. \right\}. \tag{4.393}
\end{aligned}$$

Die erste Zeile mit ganzzahligen t -Potenzen kommt dabei aus der Entwicklung von $e^{-3t} + 1$. Diese Terme resultieren aus der k -Integration über $\tilde{\varrho}_0$. Man erkennt in ihnen die (negative) Entwicklung für $\text{Tr}_<^0$ (Gl. (4.295)) und $\text{Tr}_>^3$ (Gl. (4.316)). Die halbzahligen Koeffizienten der zweiten Zeile, welche ebenfalls aus $\tilde{\varrho}_0$ kommen, entsprechen dem Teil der Seeley-Entwicklung, in dem über die nullte Ordnung des Potentials $V_0 - \mathring{V}_0 = -6 \text{sech}^2 \xi$ integriert wird. Die Zwölf im ersten Koeffizienten ist also das negative, in Gleichung (4.339) berechnete O_0 . Wie man an Gleichung (4.338) aber auch sieht (vgl. auch die Berechnung der Koeffizienten im Anhang D), trägt noch ein zweiter, V_1 -abhängiger Term v_1 zu dieser Ordnung in $\tilde{\eta}$ bei, nämlich das Integral über $-4\tilde{\eta}(\tanh \xi - 1)$. Die daraus resultierenden Terme in der Seeley-Entwicklung sollten durch die letzten beiden Zeilen, also durch die Teile $\hat{\varrho}$ und ϱ_v in der Spektraldichte, gegeben sein. Sucht man aus der Seeley-Entwicklung die Terme proportional zu \mathring{V}_1 , so ergibt sich aber

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{4\pi}{(4\pi t)^{3/2}} \left\{ -\frac{8}{3}t + \frac{32}{3}t^2 - \frac{64}{3}t^3 + \frac{256}{9}t^4 - \frac{256}{9}t^5 + \frac{1024}{45}t^6 + \dots \right\} = \\
\frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{4\pi t}{(4\pi t)^{3/2}} \frac{2}{3} \mathring{V}_1 e^{-4t}. \tag{4.394}
\end{aligned}$$

Von der Richtigkeit der Aufsummation in der rechten Seite von Gleichung (4.394) kann man sich anhand der allgemeinen Formeln der Seeley-Entwicklung überzeugen: Beiträge zur führenden Ordnung ($\mathcal{O}(1/\tilde{\eta}^2)$) bekommt man durch Terme, die wie $\tilde{\eta}^0 \tilde{R}^2$ oder wie $\tilde{\eta} \tilde{R}^3$ gehen. Die $\tilde{\eta}^0 \tilde{R}^2$ -Terme sind dabei die aus der zweiten Zeile der Entwicklung in Gleichung (4.393), so daß man noch $\tilde{\eta} \tilde{R}^3$ -Terme suchen muß.

In dem in der j -ten Ordnung der Seeley-Entwicklung vorkommendem Term ($V^j/j! - \mathring{V}^j/j!$) ist nur der Term ($j\tilde{\eta}V_1V_0^j/j! - j\tilde{\eta}\mathring{V}_1\mathring{V}_0^{j-1}/j!$) von erster Ordnung in $\tilde{\eta}$. Der Faktor j begründet sich in der binomischen Formel. Summiert man diese Terme auf, so bekommt man, nachdem man in der Integration analog zu Gleichung (4.333) partiell integriert, substituiert und die Grenzen erweitert hat:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-t)^j}{(j-1)!} \int d^3x \tilde{\eta} (V_1 V_0^{j-1} - \mathring{V}_1 \mathring{V}_0^{j-1}) \\
= \frac{4\pi}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-t)^j}{(j-1)!} \left(-\frac{1}{3} \tilde{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (\xi + \tilde{R})^3 (V_1 V_0^{j-1} - \mathring{V}_1 \mathring{V}_0^{j-1})' \right). \tag{4.395}
\end{aligned}$$

Da man jetzt nur an Termen der Ordnung $\tilde{\eta}\tilde{R}^3$ interessiert ist, betrachtet man im folgenden nur den Anteil proportional zu \tilde{R}^3 und findet die in Gleichung (4.394) vermutete Reihe:

$$\begin{aligned}
& \frac{4\pi}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-t)^j}{(j-1)!} \left(-\frac{1}{3} \tilde{\eta} \tilde{R}^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (V_1 V_0^{j-1} - \overset{\circ}{V}_1 \overset{\circ}{V}_0^{j-1})' \right) \\
&= \frac{4\pi}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-t)^j}{(j-1)!} \left(-\frac{1}{3} \tilde{\eta} \tilde{R}^3 2 \overset{\circ}{V}_1 \overset{\circ}{V}_0^{j-1} \right) \\
&= \frac{4\pi t}{(4\pi t)^{3/2}} \left(\frac{2}{3} \overset{\circ}{V}_1 \tilde{\eta} \tilde{R}^3 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-t)^{j-1}}{(j-1)!} \overset{\circ}{V}_0^{j-1} \right) \\
&= \frac{4\pi t}{(4\pi t)^{3/2}} \tilde{\eta} \tilde{R}^3 \frac{2}{3} \overset{\circ}{V}_1 e^{-t \overset{\circ}{V}_0} . \tag{4.396}
\end{aligned}$$

Die weiteren in der Formel für die Koeffizienten der Seeley–Entwicklung vorkommenden Terme enthalten Ableitungen, welche aber, da die Funktionen asymptotisch konstant sind, im Unendlichen verschwinden, so daß sie in dem Teil des Integrals, welcher proportional zu \tilde{R}^3 ist, nichts beitragen. Damit ist Gleichung (4.394) bewiesen.

Man erkennt in den Termen der Seeley–Entwicklung Gl. (4.394) dieselbe t –Abhängigkeit wie in dem analytisch fortgesetzten Teil des Integrals, aber mit einem Faktor $2/3$ statt 2 . Diese Diskrepanz kommt von den nicht bekannten, störungstheoretisch nicht zugänglichen einfach entarteten Zuständen, für die man dann durch Vergleich mit Gleichung (4.394) den folgenden, bislang fehlenden Beitrag zur Spektraldichte ablesen kann:

$$\varrho_v = \frac{2}{3} \tilde{\eta} \tilde{R} \frac{\overset{\circ}{V}_1}{\pi k^2} . \tag{4.397}$$

Damit ist nun die führende Ordnung der Spur $\text{Tr}_{>}^k$ bestimmt:

$$\text{Tr}_{>}^k = -\frac{1}{\tilde{\eta}^2 t} \left[e^{-3t} + 1 - \left(e^{-3t} \Phi(\sqrt{t}) + \Phi(\sqrt{4t}) \right) - \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{4\pi}} \frac{2}{3} \overset{\circ}{V}_1 e^{-4t} \right] + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) . \tag{4.398}$$

Aufgrund der Symmetrieüberlegungen (vgl. S. 105) weiß man, daß auch hier die ungeraden Ordnungen in $\tilde{\eta}$ verschwinden, so daß der Fehler von konstanter Ordnung ist.

Die führende Ordnung zum Logarithmus der Determinante $I_{>}^k$ berechnet man daraus durch Integration:

$$\begin{aligned}
I_{>}^k &= - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t} \text{Tr}_{>}^k \\
&= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left[3\Gamma(-1, 3\Lambda) + \frac{1}{\Lambda} - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t^2} \Phi(\sqrt{t}) e^{-3t} - \right. \\
&\quad \left. - \left(\frac{4}{\sqrt{\pi}} \Gamma(-1/2, 4\Lambda) + \frac{1}{\Lambda} \Phi(\sqrt{\Lambda}) \right) + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(-1/2, 4\Lambda) \right] \\
&= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left[3\Gamma(-1, 3\Lambda) - \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(-1/2, 4\Lambda) + \frac{1}{\Lambda\sqrt{\pi}} \Gamma(1/2, \Lambda) - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t^2} \Phi(\sqrt{t}) e^{-3t} \right] . \tag{4.399}
\end{aligned}$$

Der dritte Term in der Spur ist nicht analytisch integrierbar und wird numerisch berechnet. $I_{>}^k$ ist zusammen mit $I_{>}^0$ und $I_{>}^3$ und der Summe aller Beiträge $I'_{>}$ in Abbildung 4.6 als Funktion von Λ für $\tilde{\eta} = 0.1$ dargestellt. Die zugehörigen Spuren sind in Abschnitt 5.2 in Abbildung 5.3 gezeichnet.

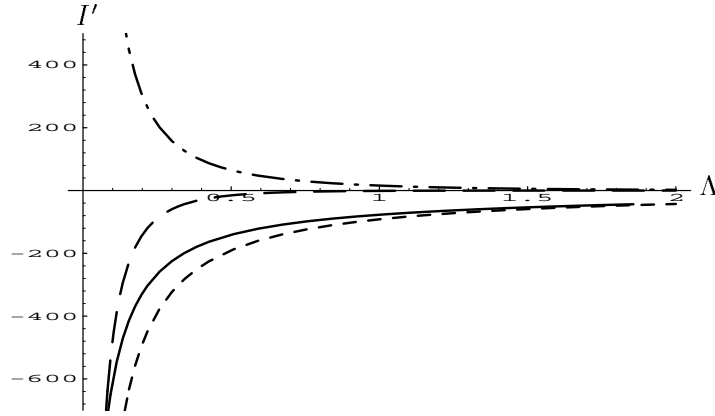


Abbildung 4.6: Alle drei Beiträge ($I_{>}^0$: - - -, $I_{>}^3$: — —, $I_{>}^k$: - · - ·) und die Summe $I'_{>}$ (— —) für $\tilde{\eta} = 0.1$. Man erkennt die Dominanz von $I_{>}^0$ für große Λ .

Ein Vergleich der drei Beiträge (Abb. 4.6) zeigt, daß, wie erwartet, der von den niedrigsten Eigenwerten herkommende Beitrag $I_{>}^0$ für große Λ der dominierende ist. Die Differenz zwischen der Summe aller Beiträge und dem Anteil $I_{>}^0$ ist in Abbildung 4.7 als prozentualer, relativer Fehler für $\tilde{\eta} = 0.1$ aufgetragen. Für große Λ ($\Lambda > 1$) ist dieser Fehler kleiner als 20%.

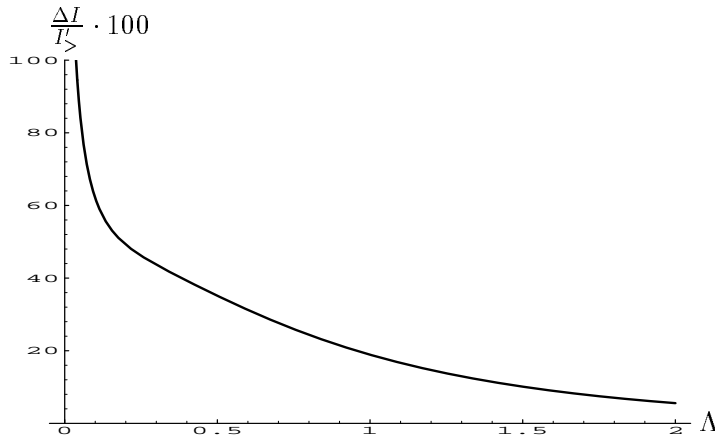


Abbildung 4.7: Die Differenz zwischen der Summe $I'_{>}$ und dem Beitrag $I_{>}^0$ bezogen auf die Summe $I'_{>}$ als prozentualer Fehler für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Mittels analytischer Fortsetzung erhält man, ausgehend von dem Ausdruck für die Spur Gl. (4.398), auch den exakten Beitrag der kontinuierlichen Eigenwerte, also das In-

tegral über den gesamten t -Bereich. Dazu berechnet man die folgende Zetafunktion:

$$\zeta^k(z) = -\frac{1}{\Gamma(z)} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \int_0^\infty dt t^{z-2} \left[e^{-3t} + 1 - \left(e^{-3t} \Phi(\sqrt{t}) + \Phi(\sqrt{4t}) \right) - \frac{\sqrt{t}}{\sqrt{4\pi}} \frac{2}{3} \mathring{V}_1 e^{-4t} \right]. \quad (4.400)$$

Ausführen der t -Integration führt auf:

$$\begin{aligned} \zeta^k(z) = -\frac{1}{\tilde{\eta}^2} & \left[\frac{3}{3^z(z-1)} - \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(z-\frac{1}{2})}{4^z} {}_2F_1\left(1, z-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{4}\right) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{4}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(z-\frac{1}{2})}{4^z(z-1)} + \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \Gamma\left(z-\frac{1}{2}\right) \right] \quad (4.401) \end{aligned}$$

mit der hypergeometrischen Funktion ${}_2F_1$. Der dritte Term ist dabei die Stammfunktion von dem zweiten und vierten Term zusammen. Den gesuchten Wert für I^k bekommt man jetzt als negative Ableitung an der Stelle $z=0$:

$$\begin{aligned} I^k &= - \left. \frac{d\zeta^k(z)}{dz} \right|_{z=0} \\ &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left[-3 + 3 \log 3 - \frac{4}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) \left({}_2F_1\left(1, z-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{4}\right) + 1 \right) + \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \Gamma\left(-\frac{1}{2}\right) \right]_{z=0} \\ &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left[\frac{11}{3} + 3 \log 3 + 6 \operatorname{arcsinh}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \right] \\ &= \frac{10.2583}{\tilde{\eta}^2} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (4.402) \end{aligned}$$

Auch hier ist der Fehler wieder von konstanter Ordnung in $\tilde{\eta}$.

Kapitel 5

Berechnung der Fluktuationsdeterminante

In diesem Kapitel soll der Logarithmus der Determinante nun auf verschiedene Weise aus den beiden Näherungen für den Nieder- und den Hochfrequenzbereich zusammengesetzt werden. Neben einer scharfen Trennung der beiden Bereiche wird auch ein kontinuierliches Abschneiden mittels eines Massencutoffs besprochen. Bei beiden Verfahren hat man außerdem noch die Möglichkeit, die niedrigsten Eigenwerte aus den Näherungen herauszunehmen und durch die exakten Ausdrücke zu beschreiben. Um einen Anhaltspunkt für die Wahl des Wertes des Abschneideparameters zu bekommen, werden in dem nächsten Abschnitt zuerst die in den jeweiligen Näherungen gemachten Fehler abgeschätzt.

5.1 Fehlerbetrachtungen

Es werden in diesem Abschnitt die Fehler der Größen $I'_<$ und $I'_>$ abgeschätzt. Der Logarithmus der Determinante I' berechnete sich im vorigen Kapitel durch Integration über die Spur der Heat kernel. Den Fehler ΔI erhält man demnach durch eine entsprechende Integration über den Fehler der Spur. Diese Integration muß dabei natürlich den jeweiligen noch zu besprechenden Verfahren angepaßt sein.

Zuerst soll jedoch die Ordnung in $\tilde{\eta}$, bis zu der I' bekannt ist, bestimmt werden: Die Koeffizienten der Seeley–Entwicklung (Gl. (4.139)) sind bis zur Ordnung $\tilde{\eta}$ bekannt, die Unsicherheiten sind von der Ordnung $\tilde{\eta}^2$. Aufgrund der Symmetrieüberlegungen (siehe Seite 105) sind die aus der Spur Tr' herausgenommenen Eigenwerte bis einschließlich Ordnung $\tilde{\eta}^3$ bekannt. Damit sind $I'_<$ und also auch $\Delta I_<$ insgesamt mit einem Fehler der Ordnung $\tilde{\eta}^2$ behaftet.

Die Näherungen $I'_>$ für große Λ kennt man nicht so weit: Der Fehler vierter Ordnung in den Eigenwerten führt beim Aufsummieren auf einen Fehler nullter Ordnung in $I'_>$ und $\Delta I_>$. Da der numerisch dominierende Beitrag aber von $I'_<$ kommt, wird der konstante

Term von I' trotzdem berechnet. Der exakte Ausdruck des Bands um Null beginnt erst mit der konstanten Ordnung, so daß der Fehler hier wieder von quadratischer Ordnung ist.

Entwickelt man den relativen Fehler von $I'_<$ nach $\tilde{\eta}$, so ist erst die vierte Ordnung unsicher. Der Cutoff Λ läßt sich dadurch bis einschließlich der quadratischen Ordnung bestimmen, was für die obige Genauigkeit von I' ausreichend ist.

Schließlich bekommt die Größe I' noch einen weiteren Fehler beim Zusammensetzen aus $I'_<$ und $I'_>$, bedingt durch die Wahl des Cutoff-Verfahrens und des Wertes für den Abschneideparameter Λ bzw. μ . Um diesen Fehler abzuschätzen werden in Abschnitt 5.7 die verschiedenen Cutoff-Verfahren miteinander verglichen.

5.1.1 Fehler von $I'_<$

Für kleine t -Werte wird die Spur der Heat kernel durch die in Abschnitt 4.3.3 berechnete Seeley-Entwicklung angenähert. Dies ist eine asymptotische Reihe in Λ , welche nach dem sechsten Term abgebrochen wird. Der dadurch bedingte Fehler in der zugehörigen Reihe für I wird durch den letzten Koeffizienten \mathcal{O}_6 abgeschätzt:

$$\Delta I_{<} \sim \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \frac{\mathcal{O}_6}{9/2} \Lambda^{9/2}. \quad (5.1)$$

Da die Seeley-Reihe aber alterniert, kann es auch sinnvoll sein, den Fehler durch die letzten beiden Koeffizienten abzuschätzen:

$$\Delta I_{<} \sim \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \left(\frac{\mathcal{O}_5}{7/2} \Lambda^{7/2} + \frac{\mathcal{O}_6}{9/2} \Lambda^{9/2} \right). \quad (5.2)$$

In dem relevanten Bereich für Λ macht dies numerisch keinen großen Unterschied (vgl. Abb. 5.1), so daß hier der durch Gleichung (5.1) gegebene Fehler benutzt wird.

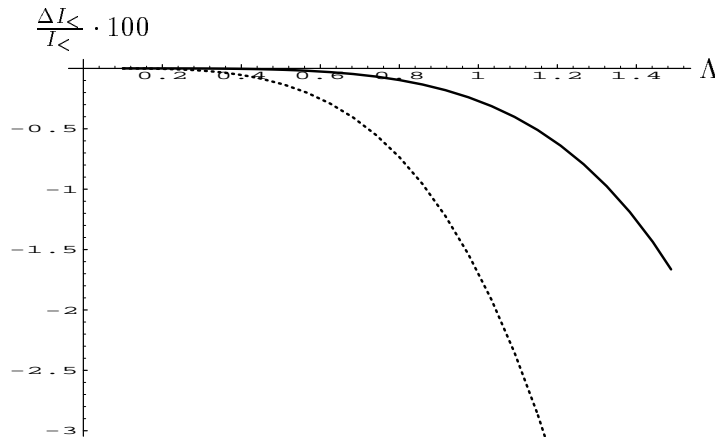


Abbildung 5.1: Der prozentuale, relative Fehler $\Delta I_{<}/I_{<}$ mit $\Delta I_{<}$ nach Gleichung (5.1) (—) und Gleichung (5.2) (⋯) für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Der Fehler läßt sich noch genauer abschätzen, wenn man mit der bei Shanks [77] vorgeschlagenen e_k -Transformation den Grenzwert der Seeley-Entwicklung berechnet: Viele Reihen sind Überlagerungen exponentieller Verläufe, deren Basis der Grenzwert (oder bei divergenten Reihen der Antilimes) der Reihe ist. Eine lokale Basis läßt sich aus drei benachbarten Folgeelementen der ursprünglichen Reihe durch wiederholtes Anwenden einer e_k -Transformation berechnen. Dadurch bekommt man eine neue, besser konvergierende Reihe mit zwei Elementen weniger. Diese Transformation läßt sich nun so lange anwenden, bis nur noch ein oder zwei Elemente übrigbleiben, welche dem Grenzwert der ursprünglichen Reihe sehr nahe kommen.

Dieses etwas aufwendige Verfahren soll hier aber nicht durchgeführt werden.

5.1.2 Fehler von $I'_>$

Der Fehler von $I'_>$ setzt sich aus den Fehlern der Beiträge der einzelnen Bänder zusammen. Die Aufsummation der Bänder um Null und um Drei geschah dabei z.B. unter Verwendung der Eulerschen Summenformel Gl. (4.245) unter Vernachlässigung der Summe über die b_m für $m \geq 1$:

$$\Delta I'_>^0 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{b_m}{4^m} \Gamma(m, 4\tilde{\eta}^2 \Lambda), \quad (5.3)$$

entsprechend für $\Delta I'_>^3$. Die einzelnen Summanden sind aber von konstanter Ordnung, also von einer Ordnung, welche sowieso schon unsicher ist. Um trotzdem einen Eindruck von der Größenordnung des Fehlers zu bekommen, ist $\Delta I'_>^0$ für $\tilde{\eta} = 0.1$ als prozentualer Fehler in Abbildung 5.2 gezeigt. Im interessierenden Bereich ist für $\tilde{\eta} = 0.1$ der Fehler immer kleiner als 0.01% und fällt also nicht ins Gewicht.

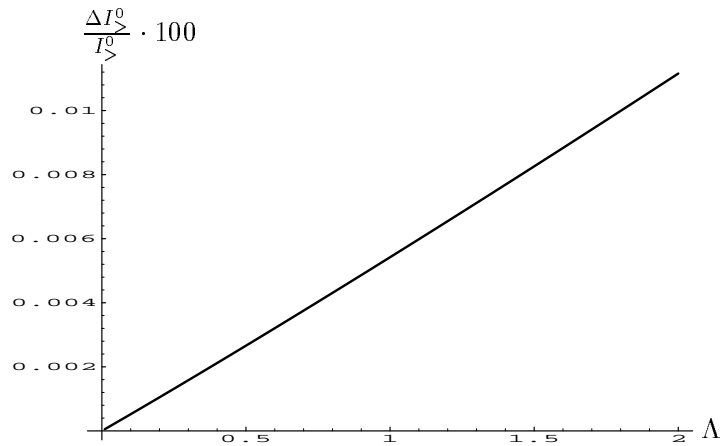


Abbildung 5.2: Der durch Vernachlässigung von $\Delta I'_>^0 = \sum_{m=1}^{\infty} b_m/4^m \Gamma(m, 4\tilde{\eta}^2 \Lambda)$ gemachte prozentuale Fehler in $I'_>^0$ für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Für den Beitrag der kontinuierlichen Eigenwerte ist mit Gleichung (4.399) die dort berechnete führende Ordnung in $\tilde{\eta}$ exakt.

Wenn man $I'_>$ nur durch $I^0_>$ annähert, so können die Beiträge der anderen Bänder $I^3_>$ und $I^k_>$ als Fehler von $I'_>$ angesehen werden.

5.2 Methode des scharfen Cutoffs

Das Abschneiden mittels scharfem Cutoff ist ein erstes Verfahren, um den Logarithmus der Determinante I' aus den einzelnen Teilen zusammzusetzen. Die dahinterstehende Idee ist die folgende: Für kleine t ist die Spur der Heat kernel durch die Seeley–Entwicklung genähert worden. Dies ist ungefähr bis zu einem Wert $t = \Lambda$ gültig. $I'_<$ wird also wie in Gleichung (4.158) durch Integration über die Spur bis zu einem Wert Λ berechnet, das Integral wird scharf abgeschnitten:

$$I'_<(\Lambda) = - \int_0^\Lambda \frac{dt}{t} \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_n \mathcal{O}_n t^n. \quad (5.4)$$

Dieser Ausdruck ist wieder nur symbolisch zu verstehen und muß, wie in Abschnitt 4.4 geschehen, regularisiert werden. In dem restlichen t -Bereich ($t > \Lambda$) wird die Spur der Heat kernel durch die niedrigsten Eigenwerte approximiert, und man berechnet gemäß Gleichung (4.240):

$$I'_>(\Lambda) = - \int_\Lambda^\infty \frac{dt}{t} \sum_i \left(e^{-\omega_i t} - e^{-\tilde{\omega}_i t} \right). \quad (5.5)$$

Den Logarithmus der Determinante mit herausgenommenen niedrigsten Eigenwerten I' (vgl. Gl. (4.23)) bekommt man durch Integration über die gesamte t -Achse, also als Summe von $I'_<$ und $I'_>$:

$$I'(\Lambda) = I'_<(\Lambda) + I'_>(\Lambda). \quad (5.6)$$

Dabei ist I' natürlich eine Funktion des Abschneideparameters Λ . Man wählt jetzt Λ so, daß sich I' mit Λ möglichst wenig ändert, der Einfluß des künstlichen Cutoffs also möglichst gering ist:

$$\left| \frac{dI'(\Lambda)}{d\Lambda} \right| = \text{minimal}. \quad (5.7)$$

Eine andere Möglichkeit Λ zu bestimmen besteht darin, Λ so zu wählen, daß der relative Fehler minimal wird:

$$\frac{\sqrt{(\Delta I'_<(\Lambda))^2 + (\Delta I'_>(\Lambda))^2}}{I'(\Lambda)} = \text{minimal}. \quad (5.8)$$

Der Fehler wird dabei nach dem Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetz berechnet.

Die einzelnen, für dieses Verfahren benötigten Bausteine sind im vorigen Kapitel berechnet worden und können hier direkt übernommen werden.

Der Beitrag für kleine t steht in Abschnitt 4.4.3 (Gl. (4.187)):

$$I'_{<} = -\frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_n}{n - 3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} + 4\gamma + \log \Lambda + 4 \log(4\Lambda) + 4\Gamma(0, 4\Lambda) + \\ + \tilde{\eta} \left(4(e^{-4\Lambda} - 1) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \quad (5.9)$$

Für $I'_{>}$ wurden in Abschnitt 4.6 die von den einzelnen Bändern herkommenden Beiträge berechnet: Das aufsummierte Band um Null liefert in Gleichung (4.253) den Beitrag

$$I'_{>}{}^0 = -4\Gamma(-1, 4\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \frac{7}{3} \text{Ei}(-4\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0), \quad (5.10)$$

und für das Band um Drei findet man (Gl. (4.301))

$$I'_{>}{}^3 = -\frac{3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2)}{\tilde{\eta}^2} \Gamma\left(-1, (3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2))\Lambda\right) + \\ + \frac{1}{3} \text{Ei}\left(- (3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2))\Lambda\right) + \mathcal{O}(\Lambda^0) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (5.11)$$

Die kontinuierlichen Eigenwerte ergeben schließlich (Gl. (4.399)):

$$I'_{>}{}^k = \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left[3\Gamma(-1, 3\Lambda) - \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \Gamma(-1/2, 4\Lambda) + \frac{1}{\Lambda\sqrt{\pi}} \Gamma(1/2, \Lambda) - \int_{\Lambda}^{\infty} \frac{dt}{t^2} \Phi(\sqrt{t}) e^{-3t} \right] + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (5.12)$$

Um zu sehen, wie sich die Spur der Heat kernel aus den einzelnen Beiträgen zusammensetzt, sind in Abbildung 5.3 die den einzelnen Beiträgen entsprechenden Spuren für $\tilde{\eta} = 0.1$ dargestellt.

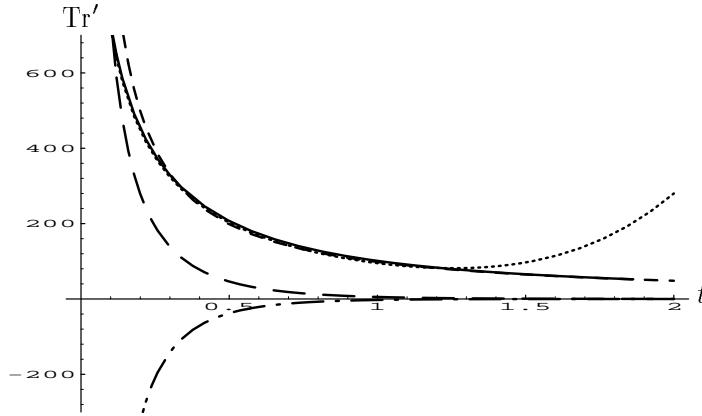


Abbildung 5.3: Die durch die einzelnen Beiträge gegebenen Spuren für $\tilde{\eta} = 0.1$. Dargestellt sind im einzelnen: $\text{Tr}'_{<}$ (\cdots), $\text{Tr}'_{>}{}^0$ ($---$), $\text{Tr}'_{>}{}^3$ ($---$), $\text{Tr}'_{>}{}^k$ ($-\cdots-$). Die durchgezogene Kurve ist die Summe $\text{Tr}'_{>} = \text{Tr}'_{>}{}^0 + \text{Tr}'_{>}{}^3 + \text{Tr}'_{>}{}^k$.

$\text{Tr}'_{<}$ ist durch die Seeley-Entwicklung Gl. (4.140) gegeben, gezeichnet wird allerdings die Spur $\text{Tr}'_{<}$, bei der die niedrigsten Eigenwerte abgezogen wurden. Für die Spuren $\text{Tr}'_{>}{}^0$

und $\text{Tr}_>^3$ sind die Summen, wie eine z.B. im Integral in Gleichung (4.243) vorkommt, numerisch bis $l = 100$ aufsummiert worden. $\text{Tr}_>^k$ ist die führende Ordnung aus Gleichung (4.398).

$\text{Tr}'_>$ ist die Summe der drei Beiträge für großes t , $\text{Tr}'_> = \text{Tr}_>^0 + \text{Tr}_>^3 + \text{Tr}_>^k$. Sie wird für große t bereits sehr gut durch $\text{Tr}_>^0$ wiedergegeben, die Eigenwerte um Null dominieren also das groß- t -Verhalten. Für kleine t stimmen $\text{Tr}'_<$ und die obige Summe gut überein, wie in Abbildung 5.4 noch einmal vergrößert dargestellt ist.

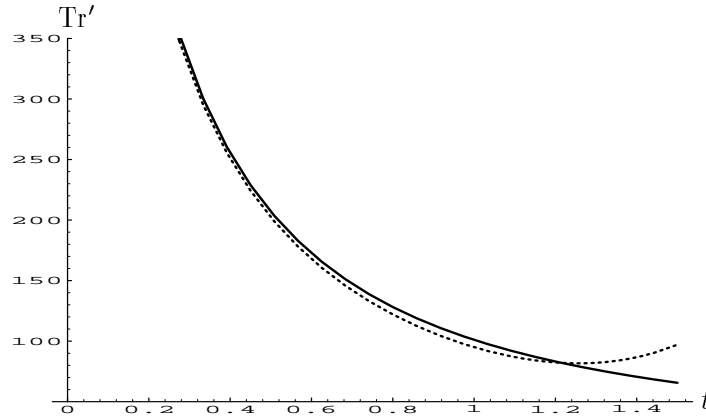


Abbildung 5.4: Die beiden Näherungen für die Spur $\text{Tr}'_<$ (·····) und $\text{Tr}'_>$ (—) für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Die Stelle Λ , bei welcher man von der Klein- t -Näherung zur Groß- t -Näherung übergeht, wird man ungefähr dort wählen, wo $\text{Tr}'_<$ und $\text{Tr}'_>$ sich schneiden. Für $\tilde{\eta} = 0.1$ ist dies bei $\Lambda \approx 1.2$. Dies ist auch ungefähr dort, bis wohin $\text{Tr}'_>$ durch den Beitrag des Bandes um Null gegeben ist.

Um zu sehen, wie sich I' mit Λ ändert, sind in Abbildung 5.5 die verschiedenen Anteile der Größe $I'(\Lambda)$ als Funktion von Λ , sowie die Summe aller vier Beiträge $I' = I'_< + I'_>^0 + I'_>^3 + I'_>^k$ aufgetragen. Diese letzte Kurve zeigt ein Plateau, also einen Bereich, indem sich I' mit Λ kaum ändert und aus dem man Λ also wählen wird. Für $\tilde{\eta} = 0.1$ geht dieser Bereich ungefähr von $\Lambda = 0.3$ bis $\Lambda = 2$, abhängig vom gewählten Maßstab. Er umschließt den aus der Spur ermittelten Λ -Wert.

Um den Λ -Wert nun genau festzulegen, minimiert man als erstes den Betrag der Ableitung von I' (vgl. Gl. (5.7)). $I'_>$ ist dabei durch die Summe aller drei Beiträge gegeben, $I'_> = I'_>^0 + I'_>^3 + I'_>^k$. Für $\tilde{\eta} = 0.1$ findet man ein Minimum bei $\Lambda = 1.22$ und damit den Wert 1008 ± 7 für I' . Diese Werte sind mit den entsprechenden Werten für $\tilde{\eta} = 0.05$ und den Fehlern von I' in der ersten Zeile der Tabelle 5.1 eingetragen.

Eine andere, schon erwähnte Bestimmungsmöglichkeit für Λ besteht in der Minimierung des relativen Gaußschen Fehlers, bezogen auf das gesamte I' (vgl. Gl. (5.8)). Die so ermittelten Werte für $\tilde{\eta} = 0.1$ und $\tilde{\eta} = 0.05$ sind zum Vergleich in der dritten Zeile in Tabelle 5.1 eingetragen. Die Werte der zweiten und vierten Zeile werden auf Seite 142 erklärt.

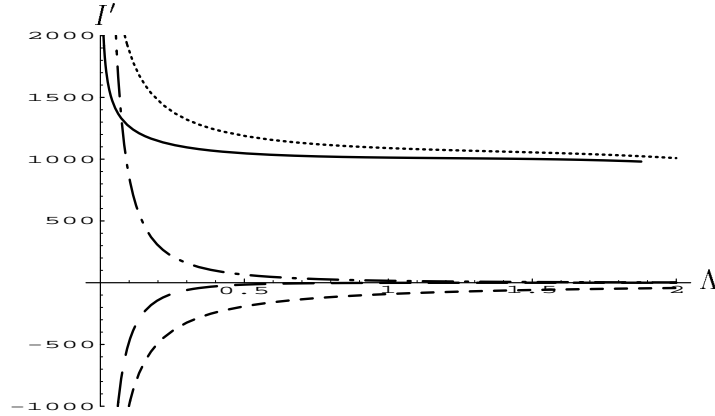


Abbildung 5.5: Die verschiedenen Beiträge zu I' für $\tilde{\eta} = 0.1$: $I'_<$ (\cdots), $I'_>^0$ ($---$), $I'_>^3$ ($---$), $I'_>^k$ ($-\cdot-\cdot-$). Die durchgezogene Kurve ist die Summe aller vier Beiträge I' .

	$\tilde{\eta} = 0.1$			$\tilde{\eta} = 0.05$		
	Λ	I'	ΔI	Λ	I'	ΔI
$\frac{dI}{d\Lambda}$ minimal (Gl. (5.7))	1.22	1008	7.2	1.17	4059	13.7
ebenso, nach $\tilde{\eta}$ entwickelt	1.29	1009	7.1	1.16	4059	13.2
Fehler minimal (Gl. (5.8))	1.21	1008	11.7	1.32	4063	38.0
ebenso, nach $\tilde{\eta}$ entwickelt	1.54	1011	4.0	1.28	4060	39.0

Tabelle 5.1: Verschiedene mit dem Verfahren des scharfen Cutoffs ermittelte Werte für Λ und I' bei $\tilde{\eta} = 0.1$ und $\tilde{\eta} = 0.05$.

Die Fehler in den beiden Verfahren wurden dabei unterschiedlich berechnet. Da bei $I'_<$ die Beiträge aller Eigenwerte mitgenommen wurden und der in der Eulerschen Summenformel vernachlässigte Term von konstanter Ordnung ist, also von einer Ordnung, welche sowieso schon unsicher ist, ist der bei der Ermittlung von Λ aus dem Plateau angegebene Fehler gleich $\Delta I'_<$. Um aber bei der Fehlerminimierung für große Λ wieder einen Anstieg im Fehler zu bekommen, wurde in diesem Verfahren $\Delta I'_> = I'_>^k + I'_>^3$ gesetzt. Dies erklärt die unterschiedliche Größe der Fehler in der Tabelle. Trotzdem unterscheiden sich die Λ -Werte kaum, die Werte für I' stimmen bis auf 0.3% überein. Die Bestimmung von I' scheint also recht unempfindlich zu sein.

Um einen Ausdruck für I' als Funktion von $\tilde{\eta}$ zu bekommen, entwickelt man die Ausdrücke für $I'_<$ und $I'_>$ nach Potenzen von $\tilde{\eta}$. Der numerische Unterschied zu den nichtentwickelten Ausdrücken für die einzelnen I' ist, wie bereits erwähnt, verschwindend gering. Man bekommt so für $I'(\tilde{\eta}) = I'_<(\tilde{\eta}) + I'_>^0(\tilde{\eta}) + I'_>^3(\tilde{\eta}) + I'_>^k(\tilde{\eta})$ eine Reihe in $\tilde{\eta}$ mit Λ -abhängigen Koeffizienten, deren Ableitungen nach Λ man dem Betrag nach minimieren muß. Multiplizieren der Ableitung mit $\tilde{\eta}^2$ liefert einen analytischen Ausdruck. Λ setzt man jetzt als Potenzreihe in $\sqrt{\tilde{\eta}}$ an:

$$\Lambda = a + b\sqrt{\tilde{\eta}} + c\tilde{\eta} + d\sqrt{\tilde{\eta}}^3 + e\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^{5/2}). \quad (5.13)$$

Dies führt für die Ableitung von I' auf eine Potenzreihe in $\sqrt{\tilde{\eta}}$. Da Null der kleinste Wert ist, den der Betrag annehmen kann, setzt man jeden einzelnen Koeffizienten Null und bekommt damit ein System gekoppelter Gleichungen, woraus sich sukzessive die Koeffizienten in der Entwicklung von Λ bestimmen lassen. Man findet

$$\Lambda = 1.11672 + 17.3175 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^{5/2}) \quad (5.14)$$

und damit für I' :

$$I'(\tilde{\eta}) = \frac{10.158}{\tilde{\eta}^2} - \left(13.6283 + \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 \right) - 3.9541 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \quad (5.15)$$

mit dem absoluten Fehler

$$\Delta I(\tilde{\eta}) = \Delta I_{<}(\tilde{\eta}) = \frac{0.052737}{\tilde{\eta}^2} - 6.3703 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (5.16)$$

Die systematische Unsicherheit in konstanter Ordnung kommt aus der Unsicherheit von $I'_{>}$. Wie an Abbildung 5.5 aber zu sehen ist, ist dieser Beitrag numerisch sehr klein. Der Zahlenwert des Fehlers ist stark davon abhängig, wieviele Ordnungen in $\tilde{\eta}$ man mitnimmt, da die Fehlerreihe alterniert.

Für die zweite Möglichkeit, Λ als Funktion von $\tilde{\eta}$ zu bestimmen, minimiert man nach Gleichung (5.8) die Wurzel aus der Summe der Quadrate der Fehler von $I'_{<}$ und $I'_{>}$, wobei der letzte Fehler wieder durch die Beiträge der kontinuierlichen Eigenwerte und des Bands um Drei gegeben ist, obwohl in $I'_{>}$ alle drei Beiträge ($I'_{>}^0, I'_{>}^3, I'_{>}^k$) berücksichtigt werden. Die Entwicklung der Ableitung des relativen Fehlers führt mit einem Ansatz für Λ mit einem $\tilde{\eta}^2 \log \tilde{\eta}$ -Term

$$\Lambda = a + b\tilde{\eta} + c\tilde{\eta}^2 + d\tilde{\eta}^2 \log \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3, \log \tilde{\eta}^2) \quad (5.17)$$

auf eine Potenzreihe in $\tilde{\eta}$ und $\log \tilde{\eta}$, und auch hier lassen sich die Koeffizienten des obigen Ansatzes durch Nullsetzen jedes einzelnen Koeffizienten in der Ableitung des Fehlers bestimmen:

$$\Lambda = 1.19545 - 34.5143 \tilde{\eta}^2 + 0.000204517 \tilde{\eta}^2 \log \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3, \log \tilde{\eta}^2). \quad (5.18)$$

Beim Einsetzen in den Ausdruck für I' ist der $\tilde{\eta}^2 \log \tilde{\eta}$ -Term aufgrund des niedrigen Vorfaktors weggelassen worden, und man erhält:

$$I'(\tilde{\eta}) = \frac{10.162}{\tilde{\eta}^2} - \left(12.4 + \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 \right) - 3.9665 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \quad (5.19)$$

mit dem Fehler

$$\Delta I(\tilde{\eta}) = \frac{0.12112}{\tilde{\eta}^2} - 8.0776 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (5.20)$$

Auch hier tritt wieder das Problem auf, daß die Fehlerreihe alterniert und die Größe des Fehlers davon abhängt, wieviele Ordnungen in $\tilde{\eta}$ man mitnimmt. Die aus diesen Entwicklungen gewonnenen Werte für $\tilde{\eta} = 0.1$ und $\tilde{\eta} = 0.05$ sind für beide Verfahren in der zweiten und vierten Zeile von Tabelle 5.1 eingetragen. Sie unterscheiden sich bis auf den für $\tilde{\eta} = 0.1$ für das zweite Verfahren angegebenen Fehler praktisch nicht von den anderen Werten.

5.3 Scharfer Cutoff mit separiertem Band um Null

Der Beitrag des Bands um Null ist für den gesamten t -Bereich exakt bekannt, vgl. Gl. (4.281):

$$I^0 = 1.1727005 - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \quad (5.21)$$

Diese Kenntnis kann man ausnutzen, indem man dieses Band abtrennt und für den Operator ohne diese niedrigsten Eigenwerte um Null die entsprechende Größe $I^{-0} = I' - I^0$ nach den im vorigen Abschnitt diskutierten Verfahren berechnet.

Dazu braucht man die Seeley-Entwicklung des Operators ohne das Band um Null; man zieht also die in Gleichung (4.293) berechnete Entwicklung des Bands um Null

$$\mathrm{Tr}_<^0 = \sum_{l=1}^{\infty} (2l+3) e^{-\tilde{\eta}^2 t l(l+3)} = \sum_{n=-1}^{\infty} \tilde{\mathcal{P}}_n(\tilde{\eta}) t^n \quad (5.22)$$

von der bisherigen Entwicklung Gl. (4.140) ab. Die Koeffizienten lassen sich, wie auf Seite 114 beschrieben, berechnen. Um die gewünschte Reihe zu bekommen, muß man noch t durch $\tilde{\eta}^2 t$ substituieren, was dazu führt, daß der n -te Koeffizient die n -te Potenz von $\tilde{\eta}^2$ enthält. Im Gegensatz zu Gleichung (4.294) ist diese $\tilde{\eta}$ -Abhängigkeit hier mit in die Koeffizienten genommen worden, was in der Notation durch $\tilde{\mathcal{P}}_n$ gekennzeichnet wird. Da sich I' nur bis einschließlich der linearen Ordnung in $\tilde{\eta}$ bestimmen läßt, benötigt man also nur die ersten beiden, in Gleichung (4.294) angegebenen Koeffizienten:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{P}}_{-1} &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2}, \\ \tilde{\mathcal{P}}_0 &= -\frac{5}{3}, \\ \tilde{\mathcal{P}}_n &\sim \tilde{\eta}^{2n} \quad n \geq 1. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Weitere Koeffizienten sind der Vollständigkeit halber in Anhang E gegeben.

Die zum abgezogenen Band um Null gehörende Zetafunktion ist bereits in Gleichung (4.296) berechnet worden:

$$\zeta_{<}^0 = \frac{1}{\Gamma(z)} \sum_{n=-1}^{\infty} \frac{\tilde{\mathcal{P}}_n}{z+n} \Lambda^{z+n}, \quad (5.24)$$

ebenso das zugehörige $I_{<}^0$ als negative Ableitung der Zetafunktion an der Stelle Null (Gl. (4.297)):

$$I_{<}^0 = \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \frac{1}{\Lambda} + \frac{5}{3} \log \Lambda + \frac{5}{3} \gamma + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2 \Lambda) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}). \quad (5.25)$$

Damit lautet der Teil von I' für kleine t nun:

$$\begin{aligned} I_{<}^{-0} = I'_{<} - I_{<}^0 &= -\frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \left\{ \frac{\mathcal{O}_n}{n-3/2} \Lambda^{n-3/2} \right\} - \frac{1}{\tilde{\eta}^2 \Lambda} - \frac{2}{3} \log \Lambda + \frac{7}{3} \gamma + \\ &+ 4 \log(4\Lambda) + 4\Gamma(0, 4\Lambda) + \tilde{\eta}(4e^{-4\Lambda} - 1) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Schätzt man auch hier den Fehler wieder durch den letzten Koeffizienten ab, so ändert sich gegenüber $\Delta I'_<$ aus dem vorigen Abschnitt nichts, da die höheren $\tilde{\mathcal{P}}_i$ von mindestens quadratischer Ordnung in $\tilde{\eta}$ sind. Damit ist der Anteil für kleine t bestimmt.

Die Näherung $I'_{>^0}$ für große t ist jetzt durch das Band um Drei und die kontinuierlichen Eigenwerte gegeben.

Der Cutoff Λ wird wie im vorigen Kapitel festgelegt: Sucht man nach einem Plateau, so findet man für $\tilde{\eta} = 0.1$ bei $\Lambda = 0.88$ den Wert $I' = 1028 \pm 21.3$. Minimiert man den relativen Fehler, so erhält man auch hier für $\tilde{\eta} = 0.1$ mit $I' = 1022 \pm 21.7$ ($\Lambda = 0.84$) einen zum vorigen Kapitel vergleichbaren Wert. Dabei ist in I' beidemal das separierte Band um Null (Gl. (5.21)) wieder dazugezählt worden. Einen Vergleich der für $\tilde{\eta} = 0.1$ und $\tilde{\eta} = 0.05$ nach den verschiedenen Verfahren als Funktion von $\tilde{\eta}$ gefundenen Werte zeigt Tabelle 5.2 auf Seite 152.

Mit denselben Potenzreihenansätzen für Λ wie vorne und eventueller Multiplikation mit $\tilde{\eta}^2$ bekommt man auch in diesem Verfahren analytische Ausdrücke für I' als Funktion von $\tilde{\eta}$. Aus der Forderung der Konstanz von I' folgt:

$$\Lambda = 1.11672 - 24.124 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (5.27)$$

und, nachdem man für I' den Beitrag des Bands um Null Gl. (5.21) wieder dazugezählt hat:

$$I' = \frac{10.158}{\tilde{\eta}^2} + \left(5.24858 - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 \right) - 3.9541 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \quad (5.28)$$

mit dem Fehler

$$\Delta I = \frac{0.13188}{\tilde{\eta}^2} + 8.1375 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (5.29)$$

Aus der Minimierung des Gaußschen Fehlers folgt

$$\begin{aligned} \Lambda &= 1.20772 - 36.5305 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \\ I' &= \frac{10.1629}{\tilde{\eta}^2} + \left(4.434 - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 \right) - 3.96808 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0), \\ \Delta I &= \frac{0.12455}{\tilde{\eta}^2} + 9.2313 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Diese Ausdrücke sind zusammen mit denen des vorigen Kapitels, multipliziert mit $\tilde{\eta}^2$, in Abbildung 5.6 aufgetragen. Außerdem ist der durch die Fehler gegebene Gültigkeitsbereich eingezeichnet.

Für kleine $\tilde{\eta}$ -Werte stimmen die Ausdrücke gut überein, auch die Fehler sind annähernd gleich groß. Dies ist nicht verwunderlich, denn im Prinzip sind dieselben Terme für $I'_{<^0}$, die im vorigen Kapitel zum Band um Null gezählt wurden, hier bei der Seeley-Entwicklung berücksichtigt worden, so daß sich die beiden Verfahren nur dadurch unterscheiden, in welchem Ausdruck die entsprechenden Terme mitgenommen werden. Der Anstieg in dem

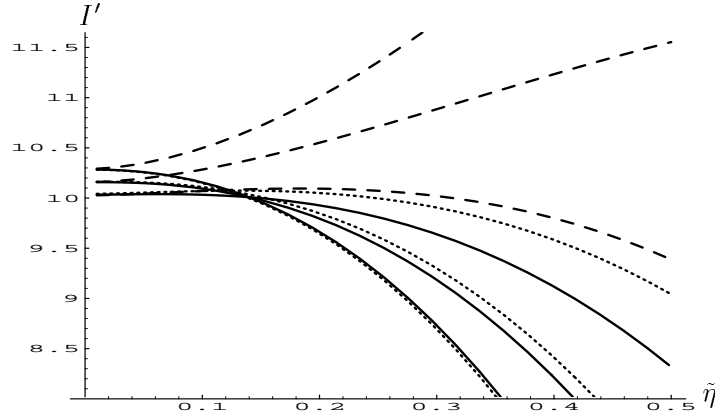


Abbildung 5.6: Die nach den verschiedenen Verfahren erhaltenen Ausdrücke für I' , multipliziert mit $\tilde{\eta}^2$, als Funktion von $\tilde{\eta}$: Minimierung von $|\frac{dI'}{d\Lambda}|$ (—), Minimierung des Fehlers (·····) und separiertes Band um Null (aus Plateau) (- - -). Aufgetragen sind der berechnete Wert und die durch den Fehler gegebenen Grenzen.

Ausdruck mit dem herausgenommenen Band um Null erklärt sich durch das andere Vorzeichen in dem konstanten Term, also durch einen Unterschied in einer mit einer systematischen Unsicherheit behafteten Ordnung. Durch Multiplikation mit $\tilde{\eta}^2$ wird der Effekt so sichtbar. Theoretisch läßt sich auch das im ganzen Bereich bekannte Band um Drei (Gl. (4.313)) noch abspalten, doch ist auch dies nur ein Verschieben der Terme und dürfte keine neuen Ergebnisse liefern.

5.4 Massencutoff

Im Gegensatz zu den Verfahren des vorigen Kapitels, wo die Bereiche für die beiden Näherungen durch einen scharfen Cutoff getrennt waren, soll nun die Seeley-Entwicklung für kleine t kontinuierlich abgeschnitten werden. Dieses Verfahren ist z.B. bei Carson [57] beschrieben. In dem Integral über die Spur wird über die gesamte positive Halbachse integriert, der Bereich großer t wird allerdings durch Einführen einer künstlichen Masse exponentiell unterdrückt:

$$I(\mu) = - \int_0^\infty \frac{dt}{t} e^{-\mu t} \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_n h_n(\mu) t^n. \quad (5.31)$$

Um dies wieder auszugleichen wird der inverse Faktor mit in die Seeley-Entwicklung genommen, die Koeffizienten sind jetzt also massenabhängig:

$$\frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_n h_n(\mu) t^n = \text{Tr} \left(e^{\mu t} (e^{-Mt} - e^{-\mathring{M}t}) \right) = \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_n \mathcal{O}_n t^n e^{\mu t}. \quad (5.32)$$

Durch das Abbrechen der Seeley-Entwicklung nach einer endlichen Zahl von Termen multipliziert man effektiv mit der in Abbildung 5.7 für eine Einheitsmasse dargestellten Abschneidefunktion.

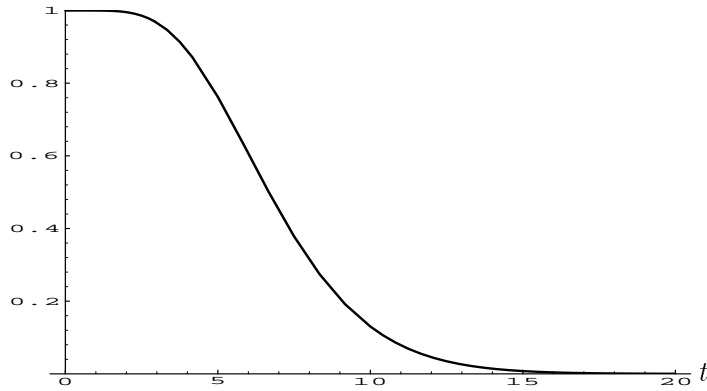


Abbildung 5.7: Die Abschneidefunktion des Massencutoffs mit $\mu = 1$ bei einer Seeley-Entwicklung mit sechs Koeffizienten: $e^{-t} \sum_{n=1}^6 t^n/n!$.

Die neuen, massenabhängigen Koeffizienten bekommt man durch Multiplikation der bisherigen Seeley-Entwicklung mit der Entwicklung von $e^{\mu t}$. Dabei liefern die abgezogenen Eigenwerte (Nullmoden, negativer Eigenwert und die niedrigsten Eigenwerte von \hat{M}) zusätzlich zu den Koeffizienten in Gleichung (5.32) ganzzahlige t -Potenzen mit Koeffizienten g_n . Sie werden soweit entwickelt, wie die halbzahligen t -Potenzen aufgrund der Seeley-Entwicklung bekannt sind, man bekommt also eine halbe t -Potenz mehr oder weniger als in der Seeley-Entwicklung, je nachdem, ob man den fünften Koeffizienten g_5 mitnimmt oder nicht. Die Ergebnisse unterscheiden sich in beiden Fällen nicht wesentlich, die ohne den fünften Koeffizienten gewonnenen Werte sind etwas kleiner als die anderen. Die Koeffizienten der ganzzahligen t -Potenzen g_n sind zusammen mit den massenabhängigen Koeffizienten der halbzahligen t -Potenzen h_n im Anhang E angegeben. Die Entwicklung der Spur lautet also:

$$\mathrm{Tr}_{<}^{\mu} = \mathrm{Tr}' \left(e^{\mu t} (e^{-Mt} - e^{-\hat{M}t}) \right) \approx \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 h_n t^n + \sum_{n=1}^5 g_n t^n. \quad (5.33)$$

Analog zu Abschnitt 4.4.3 läßt sich I' als negative Ableitung der Zetafunktion an der Stelle Null berechnen:

$$I'(\mu) = - \left. \frac{d}{dz} \zeta(z) \right|_{z=0} = - \left\{ \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \frac{h_n}{\mu^{n-3/2}} \Gamma(n-3/2) + \sum_{n=1}^5 \frac{g_n}{\mu^n} \Gamma(n) \right\}. \quad (5.34)$$

Die noch zu bestimmende künstliche Masse μ wird in der Größenordnung des reziproken Wertes t liegen, bis zu dem die Seeley-Entwicklung zuverlässig ist. Sie wird wieder so gewählt werden, daß sich $I'(\mu)$ mit μ möglichst wenig ändert, also so, daß der Betrag der Ableitung minimal wird:

$$\left| \frac{dI'}{d\mu} \right| = \text{minimal}. \quad (5.35)$$

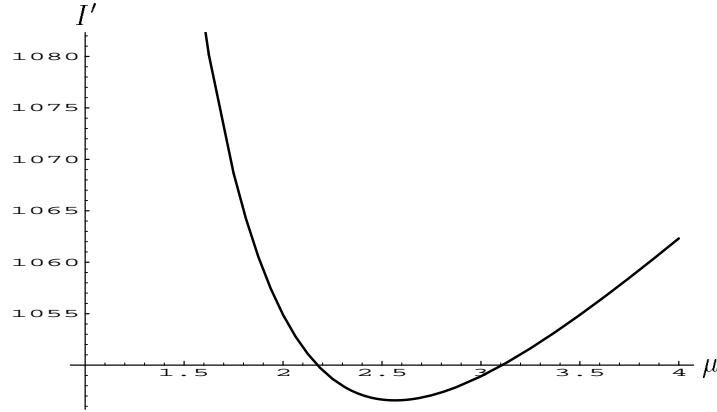


Abbildung 5.8: Das nach dem Verfahren des Massencutoffs berechnete $I'(\mu)$ als Funktion der künstlichen Masse μ für $\tilde{\eta} = 0.1$.

Für $\tilde{\eta} = 0.1$ ist $I'(\mu)$ in Abbildung 5.8 gezeichnet. Man erkennt ein Minimum für $\mu = 2.57$, woraus mit $I' = 1047$ ein mit den anderen Verfahren ziemlich verträglicher Wert folgt. Für $\tilde{\eta} = 0.05$ erhält man die Werte $\mu = 2.55$ und $I' = 4206$.

Um I' als Funktion von $\tilde{\eta}$ zu erhalten, macht man auch hier wieder einen Potenzreihenansatz für die künstliche Masse:

$$\mu = a + b\tilde{\eta} + c\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (5.36)$$

und setzt ihn in die mit $\tilde{\eta}^2$ multiplizierte Entwicklung für I' ein. Durch Nullsetzen jedes Koeffizienten in der Entwicklung der Ableitung von I' nach μ lassen sich die Koeffizienten des Abschneideparameters bestimmen:

$$\mu = 2.53932 + 2.65943 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3). \quad (5.37)$$

Dies führt für I' auf den Ausdruck

$$I'(\tilde{\eta}) = \frac{10.5303}{\tilde{\eta}^2} - 6.0292 - 4.25191 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \quad (5.38)$$

Da hier nur die bis inklusive der linearen Ordnung bekannte Seeley–Entwicklung eingeht, hat die so bestimmte Größe $I'(\tilde{\eta})$ eine Unsicherheit in quadratischer Ordnung.

Die Bestimmung des methodischen Fehlers gestaltet sich hier schwieriger. Den Fehler, der durch das Abbrechen der Seeley–Reihe entsteht, könnte man wieder durch die letzten Koeffizienten abschätzen:

$$\Delta I \sim \left\{ \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \frac{h_6}{\mu^{9/2}} \Gamma(9/2) + \frac{g_5}{\mu^5} \Gamma(5) \right\}. \quad (5.39)$$

Dieser Ausdruck verschwindet allerdings bei der vorne bestimmten Abschneidemasse und kann somit nicht zur Fehlerbestimmung verwendet werden. Eine andere Möglichkeit, den

Fehler zu bestimmen, bedient sich der schon vorne (S. 137) erwähnten Transformationsmethode nach Shanks zur Bestimmung des Grenzwertes einer Folge: Außer dem in Gleichung (5.38) ermittelten Wert für I' bekommt man zwei weitere Elemente der hier zu betrachtenden Folge, wenn man in beiden Summen in Gleichung (5.33) die letzten, bzw. die letzten beiden Koeffizienten wegläßt. Der Fehler bestimmt sich dann aus der Differenz zwischen dem daraus nach Shanks ermitteltem Grenzwert und dem Ausdruck für I' mit allen Koeffizienten (Gl. (5.38)) zu

$$\Delta I(\tilde{\eta}) = \frac{0.067}{\tilde{\eta}^2} + 3.2504 - 11.8043 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \quad (5.40)$$

Durch das negative Vorzeichen in der letzten Ordnung wird der Fehler bei Berücksichtigung aller Ordnungen in $\tilde{\eta}$ wieder etwas kleiner. In Tabelle 5.2 auf Seite 152 ist deshalb der Fehler nur inklusive der konstanten Ordnung eingetragen.

5.5 Massencutoff mit separierten Bändern

Das im vorigen Abschnitt beschriebene Verfahren des Massencutoffs berücksichtigt nur die Näherung für kleine t . Da man aber die niedrigsten Eigenwerte inklusive der konstanten Ordnung exakt kennt, wird man auch diese Information nutzen wollen. Dies kann man z.B. tun, indem man auch hier wieder das Band um Null oder beide Bänder um Null und um Drei abspaltet und das Verfahren des Massencutoffs auf den restlichen Operator anwendet, was jetzt beschrieben werden soll.

Die Seeley–Entwicklung des Operators, bei dem das Band um Null abgezogen wurde, ist bereits in Abschnitt 5.3 berechnet worden (Gl. (5.26)). Durch Multiplikation mit $e^{\mu t}$ erhält man daraus die hier benötigte Seeley–Entwicklung mit massenabhängigen Koeffizienten. Sie enthält wieder halbzahlige t –Potenzen mit Koeffizienten h_n und ganzzahlige t –Potenzen mit Koeffizienten g'_n :

$$\begin{aligned} e^{\mu t} (\text{Tr}_< - \text{Tr}_<^0) &= e^{\mu t} \left\{ \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \mathcal{O}_n t^n - 3 - e^{t2\tilde{\eta}^2} + 4 e^{-\tilde{\omega}_0 t} - \sum_{n=-1}^5 \tilde{\mathcal{P}}_n t^n \right\} \\ &= \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 h_n t^n + \sum_{n=-1}^5 g'_n t^n. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Die neuen Koeffizienten g'_n sind ebenfalls in Anhang E angegeben. Die Koeffizienten h_n bleiben unverändert, da in der Entwicklung des Bands um Null nur ganzzahlige t –Potenzen auftreten.

Nimmt man auch die Entwicklung des Bands um Drei noch heraus, so erhält man für die Entwicklung der Spur dieselbe Form mit wieder anderen Koeffizienten g''_n . Die Entwicklung des Bands um Drei

$$\text{Tr}_<^3 = e^{-3t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-\tilde{\eta}^2 t[l(l+1)+3-\pi^2]} = \sum_{n=-1}^{\infty} \mathcal{R}_n t^n \quad (5.42)$$

berechnet man analog zu Gleichung (4.293). Ihre Koeffizienten sind ebenfalls in Anhang E zu finden. Auch diese Entwicklung hat nur ganzzahlige t -Potenzen, so daß die h_n wieder unverändert bleiben:

$$\begin{aligned}
& e^{\mu t} (\text{Tr}_< - \text{Tr}_<^0 - \text{Tr}_<^3) \\
&= e^{\mu t} \left\{ \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \mathcal{O}_n t^n - 3 - e^{t2\tilde{\eta}^2} + 4 e^{-\tilde{\omega}_0 t} - \sum_{n=-1}^5 (\tilde{\mathcal{P}}_n + \mathcal{R}_n) t^n \right\} \\
&= \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 h_n t^n + \sum_{n=-1}^5 g_n'' t^n. \tag{5.43}
\end{aligned}$$

Aus der Entwicklung der Spur kann man jetzt auf die übliche Weise für beide Fälle die Zetafunktion

$$\begin{aligned}
\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \frac{h_n}{\mu^{z+n-3/2}} \Gamma(z+n-3/2) + \\
+ \frac{\tilde{g}_{-1}}{\mu^{z-1}(z-1)} + \frac{\tilde{g}_0}{\mu^z} + \frac{1}{\Gamma(z)} \sum_{n=1}^5 \frac{\tilde{g}_n}{\mu^{z+n}} \Gamma(z+n) \tag{5.44}
\end{aligned}$$

und $I'(\mu)$ als negative Ableitung an der Stelle Null berechnen:

$$I'(\mu) = - \left\{ \frac{1}{(4\pi)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \frac{h_n}{\mu^{n-3/2}} \Gamma(n-3/2) + \tilde{g}_{-1} (\mu \log \mu - \mu) - \tilde{g}_0 \log \mu + \sum_{n=1}^5 \frac{\tilde{g}_n}{\mu^n} \Gamma(n) \right\}. \tag{5.45}$$

Die \tilde{g}_n stehen dabei je nach Entwicklung für die Koeffizienten g_n' oder g_n'' .

$I'(\mu, \tilde{\eta})$ in Abhängigkeit von $\tilde{\eta}$ bekommt man wieder durch Entwickeln von $\tilde{\eta}^2 I'(\mu, \tilde{\eta})$ nach Potenzen von $\tilde{\eta}$, Einsetzen eines Potenzreihenansatzes für die künstliche Masse

$$\mu = a + b\tilde{\eta} + c\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \tag{5.46}$$

und Minimieren des Betrags der Ableitung $|\frac{dI'}{d\mu}|$.

So findet man für $I'(\tilde{\eta})$, wenn man den Massencutoff auf den Operator ohne das Band um Null anwendet und anschließend für $I^0(\tilde{\eta})$ den Ausdruck aus Gleichung (5.21) addiert:

$$I'(\tilde{\eta}) = \frac{10.037}{\tilde{\eta}^2} - 7.97952 - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 - 4\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \tag{5.47}$$

bei folgendem Ausdruck für μ :

$$\mu = 4.02023 + 24.6059 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3). \tag{5.48}$$

Der Fehler berechnet sich wie bei dem Massencutoff des vorigen Kapitels mit Hilfe der Transformation von Shanks zu

$$\Delta I(\tilde{\eta}) = \frac{0.0015404}{\tilde{\eta}^2} - 0.0835951 - 0.795176 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \tag{5.49}$$

Behandelt man beide Bänder, nämlich das Band um Null und das durch Gleichung (4.313) gegebene Band um Drei gesondert, so ergibt sich bei einem Abschneideparameter

$$\mu = 4.02235 + 24.9904 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (5.50)$$

für die gesamte Größe, bei der beide Bänder $I^0(\tilde{\eta})$ und $I^3(\tilde{\eta})$ wieder hinzuaddiert wurden:

$$I'(\tilde{\eta}) = \frac{10.0371}{\tilde{\eta}^2} - 8.31438 - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 - 4 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \quad (5.51)$$

mit einem Fehler

$$\Delta I(\tilde{\eta}) = \frac{0.139012}{\tilde{\eta}^2} - 0.397784 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0). \quad (5.52)$$

Da der führende Term in dem exakten Ausdruck des Bands um Drei mit $\frac{1}{\tilde{\eta}^2}$ geht und die Unsicherheit in den Eigenwerten in der übernächsten Ordnung liegt, ist hier schon die konstante Ordnung fehlerbehaftet.

Die Werte für $\tilde{\eta} = 0.1$ und $\tilde{\eta} = 0.05$ sind zum Vergleich mit den nach den anderen Verfahren ermittelten Werten für I' in Tabelle 5.2 angegeben. In beiden Fällen alternieren die Koeffizienten in der Fehlerreihe, so daß die in Tabelle 5.2 angegebenen Fehler wieder nur aus der führenden Ordnung bestimmt werden. Der Fehler für das separierte Band um Null scheint dabei im Gegensatz zu den anderen Fehlern zu klein zu sein.

5.6 Exakter Ausdruck für die führende Ordnung

Da sich auch der Beitrag der kontinuierlichen Eigenwerte durch analytische Fortsetzung im gesamten Bereich in führender Ordnung exakt ausrechnen läßt (Gl. (4.402))

$$\begin{aligned} I^k &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left[\frac{11}{3} + 3 \log(3) + 6 \operatorname{arcsinh}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) \right] + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \\ &= \frac{10.2583}{\tilde{\eta}^2} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0), \end{aligned} \quad (5.53)$$

läßt sich mit den Ausdrücken für das Band um Null (Gl. (4.281))

$$I^0 = 1.1727005 - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \quad (5.54)$$

und dem Band um Drei (Gl. (4.314))

$$\begin{aligned} I^3 &= -\left(\frac{3}{\tilde{\eta}^2} + \frac{8}{3} - \pi^2\right) \log\left(3 + \tilde{\eta}^2(3 - \pi^2)\right) + \left(\frac{3}{\tilde{\eta}^2} + \frac{8}{3} - \pi^2\right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \\ &= \frac{3 - 3 \log 3}{\tilde{\eta}^2} - \frac{1 + 8 \log 3 - 3\pi^2 \log 3}{3} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \end{aligned} \quad (5.55)$$

die führende Ordnung auch exakt angeben. Man findet

$$I' = \frac{9.96246}{\tilde{\eta}^2} - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 + 8.7526 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^0) \quad (5.56)$$

in Übereinstimmung mit den vorigen Ergebnissen für die zusammengesetzte Determinante. Die angegebene Unsicherheit nullter Ordnung kommt aus dem Beitrag der kontinuierlichen Eigenwerte und der Eigenwerte um Drei.

5.7 Vergleich der verschiedenen Verfahren

Die in den vorigen Abschnitten erhaltenen Funktionen $I'(\tilde{\eta})$ sind einander ziemlich ähnlich. Dies wird in Abbildung 5.9 verdeutlicht. Hier sind die nach dem scharfen Cutoff, dem scharfen Cutoff mit herausgenommenen Bändern, dem Massencutoff und dem Massencutoff mit herausgenommenen Bändern erhaltenen Ausdrücke und die exakte führende Ordnung für $I'(\tilde{\eta})$ multipliziert mit $\tilde{\eta}^2$ gegen $\tilde{\eta}$ aufgetragen. Bei der Methode des scharfen Cutoffs mit und ohne herausgenommenem Band um Null wurde dabei der aus dem Plateau von I' bestimmte Wert gewählt. Wie schon in Abbildung 5.6 zu sehen ist, steigt das Resultat des scharfen Cutoffs mit separiertem Band um Null mit wachsendem $\tilde{\eta}$ an, da der konstante Term in der Entwicklung für I' ein anderes Vorzeichen hat. Bei der exakten führenden Ordnung in Gleichung (5.56) fehlt die konstante Ordnung ganz, dieser Ausdruck ist daher also nicht mit den anderen vergleichbar.

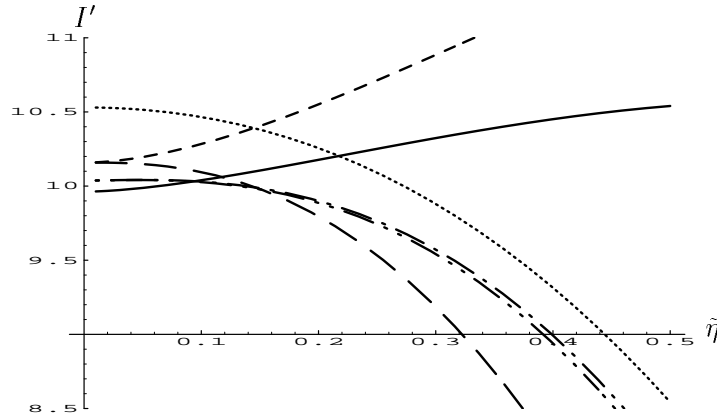


Abbildung 5.9: Vergleich der verschiedenen Ausdrücke für $\tilde{\eta}^2 I(\tilde{\eta})$. Aufgetragen sind die nach dem scharfen Cutoff (—), dem scharfen Cutoff mit separiertem Band um Null (---), dem Massencutoff (·····) und dem Massencutoff mit herausgenommenen Bändern ((0) - · - ·, (0+3) - · - · - ·) erhaltenen, mit $\tilde{\eta}^2$ multiplizierten Ergebnisse gegen $\tilde{\eta}$. Die durchgezogene Kurve ist die exakte führende Ordnung aus Gleichung (5.56) inklusive des Logarithmus-Terms multipliziert mit $\tilde{\eta}^2$.

Für die $\tilde{\eta}$ -Werte 0.1 und 0.05 sind die nach den besprochenen Verfahren gewonnenen Werte für I' mit ihren Fehlern in Tabelle 5.2 zusammengefaßt.

Sowohl in der Abbildung als auch in der Tabelle sieht man, daß die Ergebnisse aus dem reinen Massencutoff deutlich oberhalb der anderen liegen, während die Ergebnisse beim Massencutoff mit herausgenommenen Bändern gut zueinander und für kleine $\tilde{\eta}$ -Werte auch gut zu dem scharfen Cutoff passen.

Um abzuschätzen, welches Verfahren am zuverlässigsten ist, werden nach allen besprochenen Verfahren jetzt zwei Determinanten berechnet, welche exakt bekannt sind. Zum einen ist dies die Determinante der endlichen Matrix $\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix}$. Die Entwicklung der Spur für

	$\tilde{\eta} = 0.1$		$\tilde{\eta} = 0.05$	
	I	ΔI	I	ΔI
führende Ordnung exakt	1012.67	-	4003.72	-
scharfer Cutoff	1008	7.2	4059	13.7
scharfer Cutoff, Band um 0 separat	1028	21.3	4078	60.9
Massencutoff	1047	10.0	4209	30.0
Massencutoff, Band um 0 separat	1003	0.15	4017	0.61
Massencutoff, Bänder um 0 und um 3 separat	1003	13.9	4016	55.6

Tabelle 5.2: Die mit den verschiedenen Verfahren ermittelten Werte für I' bei $\tilde{\eta} = 0.1$ und $\tilde{\eta} = 0.05$.

kleine t lautet

$$\text{Tr}_< (\exp [- (\begin{smallmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 10 \end{smallmatrix}) t]) = e^{-3t} + e^{-10t} \approx 2 - 13t + \frac{109}{2}t^2 - \frac{1027}{6}t^3. \quad (5.57)$$

Für große t wird die Spur durch den kleinsten Eigenwert angenähert:

$$\text{Tr}_> (\exp [- (\begin{smallmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 10 \end{smallmatrix}) t]) = e^{-3t}. \quad (5.58)$$

Als Beispiel einer Determinante eines unendlich dimensionalen Operators wird die Determinante des eindimensionalen harmonischen Oszillators abzüglich der Nullpunktsenergie, welcher als Eigenwerte also die natürlichen Zahlen besitzt, berechnet. Bildet man auch hier wieder die zugehörige Zetafunktion als Integral über die Spur der exponierten Matrix, so bekommt man die Riemannsche Zetafunktion:

$$\zeta(z) = \frac{1}{\Gamma(z)} \int_0^\infty dt t^{z-1} \sum_{n=1}^\infty e^{-nt} = \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{n^z} = \zeta_R(z). \quad (5.59)$$

Für den Logarithmus der Determinante erhält man als negative Ableitung der Riemannschen Zetafunktion an der Stelle Null den Wert $\log \sqrt{2\pi}$ (vgl. Gl. (4.268)):

$$I = - \left. \frac{d\zeta_R}{dz} \right|_{z=0} = \log \sqrt{2\pi}. \quad (5.60)$$

Damit ist auch hier der exakte Wert bekannt.

Die zugehörige Spur läßt sich als geometrische Reihe ebenfalls exakt aufsummieren:

$$\sum_{n=1}^\infty e^{-nt} = \frac{1}{e^t - 1}. \quad (5.61)$$

In ihrer Entwicklung für kleine t tauchen die Bernoullischen Zahlen B_n auf:

$$\frac{1}{e^t - 1} = \sum_{n=-1}^\infty \frac{B_{n+1}}{(n+1)!} t^n. \quad (5.62)$$

In der Näherung der Spur für große t werden nur die vier niedrigsten Eigenwerte mitgenommen:

$$\text{Tr}_> = e^{-t} + e^{-2t} + e^{-3t} + e^{-4t}. \quad (5.63)$$

	$\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix}$		harm. Osz.	
	I	Δ	I	Δ
exakt	3.4012	0	0.9189	0
scharfer Cutoff, $\left \frac{dI}{d\Lambda}\right $ minimal	3.54204	0.0414	0.919049	0.00012
scharfer Cutoff, Fehler minimal	3.56589	0.0484	0.919604	0.00072
Massencutoff	3.45366	0.015	0.92166	0.0025
Massencutoff mit herausgen. Eigenwerten	3.4012	$1.3 \cdot 10^{-16}$	0.918931	$7.9 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 5.3: Für die Logarithmen zweier exakt bekannter Determinanten sind die nach den verschiedenen Verfahren berechneten Werte und deren Abweichungen vom exakten Wert eingetragen.

Die Seeley–Entwicklungen werden bei beiden Determinanten bis einschließlich der dritten Ordnung in t berechnet. In beiden Fällen wird nun in der Methode des scharfen Cutoffs, analog zu Abschnitt 5.2, Λ durch Minimieren des Betrags der Ableitung von I' und durch Minimieren des relativen Fehlers bestimmt. $\Delta I_{<}$ ist dabei durch den nächsten Koeffizienten der Seeley–Entwicklung von I und $\Delta I_{>}$ durch den nächsten fehlenden Eigenwert gegeben. Durch Multiplikation der Seeley–Entwicklungen mit $e^{\mu t}$ erhält man die für die Methode des Massencutoffs benötigten Entwicklungen. Als separierte Eigenwerte werden bei der Determinante der endlichen Matrix der Eigenwert 3 und beim harmonischen Oszillator die ersten vier Eigenwerte, 1, 2, 3 und 4 herausgenommen. Da dies aber jeweils der Beitrag $I_{>}$ im scharfen Cutoff ist, läßt sich hier das Verfahren des scharfen Cutoffs mit herausgenommenen Bändern nicht testen. Die erhaltenen Ergebnisse sind zusammen mit den exakten Ergebnissen in Tabelle 5.3 eingetragen. In einer zweiten Spalte ist die relative Abweichung vom exakten Wert

$$\Delta = \frac{|I_{\text{Näherung}} - I_{\text{exakt}}|}{I_{\text{exakt}}} \quad (5.64)$$

aufgetragen.

Demnach scheint der Massencutoff mit den separat behandelten kleinen Eigenwerten das zuverlässigste Verfahren zu sein. Daß der reine Massencutoff zumindest beim harmonischen Oszillator einen größeren Fehler hat, ist nicht weiter verwunderlich, da hier ja nur die Näherung für kleine t , aber keine Information für große t berücksichtigt wird.

Die an den Beispieldeterminanten gemachten Beobachtungen bzgl. der Güte der Verfahren passen zu den Ergebnissen für die konkrete Determinante, bei der auch der reine Massencutoff zu große Werte liefert, während der Massencutoff mit herausgenommenen Bändern gute Ergebnisse produziert. Ein Vergleich der führenden Ordnung der Resultate (Gl. (5.47) und Gl. (5.51)) in dem Massencutoff mit herausgenommenen Bändern mit dem exakten Ausdruck aus Gleichung (5.56) zeigt gute Übereinstimmung innerhalb des in Gleichung (5.52) angegebenen Fehlers. Bei den Verfahren des Massencutoffs ist auch erst die quadratische Ordnung mit einer systematischen Unsicherheit behaftet.

Für die weiteren Rechnungen soll nun für I' der Mittelwert der aus dem Massencutoff mit herausgenommenen Bändern gewonnenen Ausdrücke Gl. (5.47) und Gl. (5.51) verwendet werden, in dem aber die führende Ordnung durch den exakten Ausdruck aus

Gleichung (5.56) ersetzt wird:

$$I' = \frac{9.96246}{\tilde{\eta}^2} - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 - 8.114695 - 4 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \quad (5.65)$$

5.8 Erfolgreiche Verfahren

Man kann nun probieren, sich noch weitere Verfahren zum Zusammensetzen der Determinante auszudenken, insbesondere um die Informationen für große t zu verwerten. An Hand der endlichen Matrix $\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 10 \end{pmatrix}$ seien hier noch zwei, allerdings nicht praktikable Verfahren aufgeführt.

5.8.1 Zweiseitig kontinuierlicher Cutoff

Die Idee bei diesem Verfahren ist, wie beim scharfen Cutoff sowohl die Näherung für kleine t als auch die Näherung für große t zu benutzen, die Bereiche aber diesmal nicht durch einen scharfen Schnitt, sondern durch Multiplikation mit der Exponentialfunktion $e^{-\mu t}$ bzw. deren Komplement zu 1, nämlich $(1 - e^{-\mu t})$, zu trennen. Der Exponentialfaktor wird bei der Entwicklung der Spur für kleine t nicht mitentwickelt:

$$\text{Tr}_< = e^{-\mu t} (2 - 13t + \frac{109}{2} t^2 + \dots). \quad (5.66)$$

Für große t nimmt man wieder nur den kleinsten Eigenwert 3 mit:

$$\text{Tr}_> = (1 - e^{-\mu t}) e^{-3t}. \quad (5.67)$$

Die Zetafunktion läßt sich in beiden Näherungen wie gewohnt berechnen und durch (negatives) Ableiten an der Stelle Null erhält man die Größen $I_<$ bzw. $I_>$. Sie sind als Funktion des Abschneideparameters in Abbildung 5.10 zusammen mit dem exakt bekannten Wert des Logarithmus der Determinante aufgetragen.

Der Schnittpunkt der Summe $I_< + I_>$ mit dem exakten Wert für den Logarithmus der Determinante ist in keiner Weise ausgezeichnet, es gibt auch sonst keinen ausgezeichneten Punkt, um den Wert des Parameters μ festzulegen. Je nach Anzahl der mitgenommenen Koeffizienten der oszillierenden Reihe für $I_<$ wird der wahre Wert von der Entwicklung eventuell gar nicht angenommen.

Angewandt auf den singulären, eindimensionalen harmonischen Oszillator ohne Nullpunktsenergie mit der Determinante $\sqrt{2\pi}$ (vgl. Abschnitt 5.7) versagt dieses Verfahren völlig, da $I_<$ im führenden Term $\hat{g}_{-1}(\mu - \mu \log \mu)$ eine Divergenz enthält, die sich, da die Koeffizienten nach Konstruktion nicht vom Abschneideparameter μ abhängen, nicht wegheben wird.

Der Grund, warum dieses Verfahren nicht funktioniert, wird deutlich, wenn man die hier benutzte Abschneidekurve mit der des Massencutoffs vergleicht (Abb. 5.11): Während die Kurve im Massencutoff eine ganze Zeit ungefähr den Wert Eins annimmt und in diesem

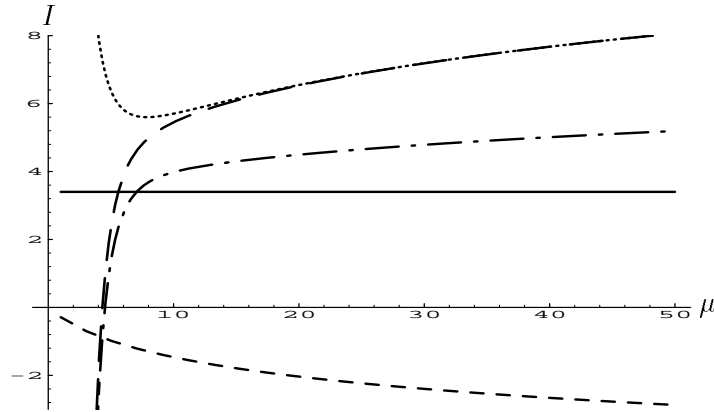


Abbildung 5.10: Die verschiedenen Größen $I_{<}$ mit drei ($\cdots\cdots$) und vier Koeffizienten ($-\cdot-$), $I_{>}$ ($---$), die Summe $I_{<} + I_{>}$ ($-\cdot-$) und der exakte Wert ($---$) im zweiseitig kontinuierlichen Cutoff.

Bereich die Seeley-Entwicklung also komplett mitgenommen wird, fällt der kontinuierliche Cutoff sofort steil ab. Durch Variation des Cutoffparameters verändert man lediglich die Steilheit, schafft aber auch keinen Bereich, indem die Abschneidefunktion ungefähr Eins wäre. Genauso verhält es sich für größere t : Während der Massencutoff irgendwann den Wert Null ziemlich erreicht hat, geht der kontinuierliche Cutoff nur sehr langsam asymptotisch gegen Null.

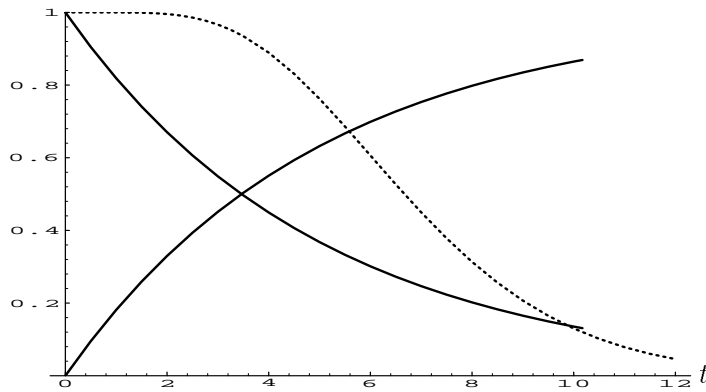


Abbildung 5.11: Vergleich der hier benutzten Abschneidekurven ($---$) mit der des Massencutoffs ($\cdots\cdots$).

5.8.2 Zweiseitiger Massencutoff

Eine andere Idee wäre deshalb, den Bereich für kleine t wie gehabt mit dem Massencutoff abzuschneiden und die Näherung für große t mit dem Komplement des Massencutoffs zu 1

zu multiplizieren. Damit ist die Spur für große t , wenn man wieder nur den Eigenwert 3 berücksichtigt und bis zur dritten Ordnung in t entwickelt, gegeben durch

$$\text{Tr}_> = \left[1 - e^{-\mu t} \left(1 + \mu t + \frac{\mu^2 t^2}{2} + \frac{\mu^3 t^3}{6} \right) \right] e^{-3t} . \quad (5.68)$$

Die auf dem üblichen Weg über die Zetafunktion berechneten Größen I sind zusammen mit dem exakten Wert in Abbildung 5.12 eingetragen.

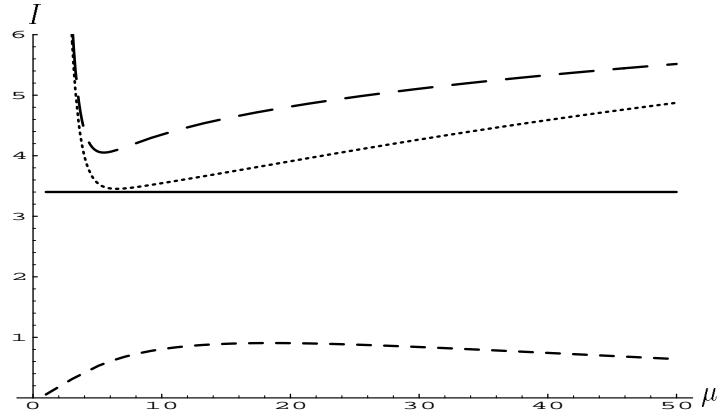


Abbildung 5.12: Die verschiedenen Größen $I_<$ (\cdots), $I_>$ ($---$), die Summe der beiden ($---$) und der exakte Wert ($---$) im zweiseitigen Massencutoff.

Den besten Wert erreicht man immer noch, wenn man $I_>$ ganz wegläßt, also mit dem in Abschnitt 5.4 beschriebenem reinen Massencutoff. Um das Ergebnis zu verbessern müßte $I_>$ ein anderes Vorzeichen haben und deutlich kleiner sein. Da der Massencutoff ja auch den Bereich für große t schon berücksichtigt, wird dieser mit dem hier angegebenen Verfahren vielleicht doppelt gezählt.

Kapitel 6

Berechnung der Nukleationsrate

Man hat jetzt alle Größen zusammen, um nach Gleichung (2.107) die Nukleationsrate in drei Dimensionen

$$\Gamma = \left(\frac{\mathcal{S}_3}{2\pi\hbar} \right)^{3/2} \left| \frac{\lambda_0 \det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]} \right|^{-1/2} e^{-\mathcal{S}_3/\hbar} \quad (6.1)$$

zu berechnen. Im folgenden wird $\hbar = 1$ gesetzt.

In Gleichung (4.10) wurde das Verhältnis der Determinanten auf eine dimensionslose Größe umgerechnet:

$$\frac{\det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]} = \frac{\det' M}{\det \overset{\circ}{M}} \left(\frac{4}{m_0^2} \right)^{u-4}. \quad (6.2)$$

Dabei ist $u = 0$, wie in Gleichung (4.194) berechnet. Von dem Logarithmus der dimensionslosen Determinante wurden in Gleichung (4.23) die negative Mode und die vier niedrigsten Eigenwerte aus $\overset{\circ}{M}$ abgespalten, damit I' ein Verhältnis aus gleich vielen Eigenwerten ist. Wie in Abschnitt 2.6 besprochen ist dabei von dem negativen Eigenwert ω_{00} der Betrag zu nehmen:

$$\log \frac{|\omega_{00}| \det' M}{\det \overset{\circ}{M}} = \log \left(\frac{|\omega_{00}|}{(\overset{\circ}{\omega}_0)^4} \right) + I'. \quad (6.3)$$

Die herausgenommenen dimensionslosen Eigenwerte sind in Gleichung (4.201) und Gleichung (4.204) durch folgende Ausdrücke gegeben:

$$\begin{aligned} \omega_{00} &= -2\tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \\ \overset{\circ}{\omega}_0 &= 4 - 4\tilde{\eta} - \frac{4}{3}\tilde{\eta}^2 - \frac{10}{9}\tilde{\eta}^3 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4), \end{aligned} \quad (6.4)$$

woraus man für das benötigte Verhältnis die Entwicklung

$$\frac{|\omega_{00}|}{\overset{\circ}{\omega}_0^4} = \frac{\tilde{\eta}^2}{128} + \frac{\tilde{\eta}^3}{32} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \quad (6.5)$$

bekommt.

In dem in Gleichung (5.65) gefundenen Ausdruck für I'

$$I' = \frac{9.96246}{\tilde{\eta}^2} - \frac{5}{3} \log \tilde{\eta}^2 - 8.114695 - 4 \tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \quad (6.6)$$

läßt sich der Logarithmus-Term mit der Exponentialfunktion verrechnen und man erhält schließlich für den gesamten Determinantenfaktor in der Gaußschen Integration (Gl. (2.21)) den Ausdruck

$$\left| \frac{\lambda_0 \det'[-\partial^2 + U''(\bar{\Phi})]}{\det[-\partial^2 + U''(\Phi_+)]} \right|^{-1/2} = \left(\frac{|\omega_{00}|}{(\dot{\omega}_0)^4} \right)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}I'} \left(\frac{4}{m_0^2} \right)^{3/2} = \tilde{\eta}^{2/3} \left(\frac{1}{\beta^2} \right)^{3/2} 8\sqrt{2} \left(1 - 2\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \exp \left[-\frac{4.98123}{\tilde{\eta}^2} + 4.05735 + 2\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right]. \quad (6.7)$$

Das hierin vorkommende β läßt sich nach Gleichung (3.34) wieder durch die ursprünglichen Parameter ausdrücken:

$$\beta^2 = \frac{\kappa \alpha^2}{4} = \frac{m_0^2}{4}. \quad (6.8)$$

Die Wirkung wurde in Abschnitt 3.3 berechnet (Gl. (3.140)):

$$\mathcal{S}_3 = 2\pi \frac{\alpha^2}{\beta} \left[\frac{8}{9} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \frac{2(4 - 9\pi^2)}{81} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right]. \quad (6.9)$$

Mit ihr ergibt sich für den nach der Methode der kollektiven Koordinaten aus den Nullmoden kommenden Faktor $(\mathcal{S}_3/(2\pi))^{3/2}$ der Wert

$$\left(\frac{\mathcal{S}_3}{2\pi} \right)^{3/2} = \frac{1}{\tilde{\eta}^3} \left(\frac{\alpha^2}{\beta} \right)^{3/2} \sqrt{2} \frac{16}{27} \left(1 + \frac{(4 - 9\pi^2)}{24} \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \right). \quad (6.10)$$

Für die Übergangsamplitude bekommt man also:

$$\Gamma = \tilde{\eta}^{-7/3} \left(\frac{\alpha^2}{\beta} \right)^{3/2} \frac{1}{\beta^3} \frac{256}{27} \left(1 - 2\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right) \cdot \exp \left[-\left(4.98123 + \frac{2\pi\alpha^2}{\beta} \frac{8}{9} \right) \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(4.05735 - \frac{2\pi\alpha^2}{\beta} \frac{2(4 - 9\pi^2)}{81} \right) + 2\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right]. \quad (6.11)$$

Der Zusammenhang zwischen dem dimensionslosen Parameter $\tilde{\eta}$ und den dimensionsbehafteten Größen ist dabei durch Gleichung (3.36) gegeben:

$$\tilde{\eta} := \frac{3}{8\alpha^2\beta^2}\eta = \frac{3}{2\alpha^4\kappa}\eta = \frac{\hat{g}_0}{2m_0^4}\eta. \quad (6.12)$$

Die Parameter α und κ lassen sich ebenfalls durch die nackten Größen m_0^2 und \hat{g}_0 ausdrücken. In Abschnitt 3.1 hat man dafür folgende Umrechnungsformeln gefunden:

$$m_0^2 = \alpha^2 \kappa \quad (\text{Gl. (3.14)}), \quad (6.13)$$

$$\hat{g}_0 = 3\kappa \quad (\text{Gl. (3.15)}) \quad (6.14)$$

bzw.

$$\alpha^2 = \frac{3m_0^2}{\hat{g}_0}, \quad (6.15)$$

$$\kappa = \frac{\hat{g}_0}{3}. \quad (6.16)$$

In diesen Größen nimmt die Übergangsrate dann folgende Gestalt an:

$$\begin{aligned} \Gamma = & \left(\eta \frac{\hat{g}_0}{m_0^4} \right)^{-7/3} \frac{1}{m_0^3} \left(\frac{\hat{g}_0}{m_0} \right)^{-3/2} \left(\frac{16384}{3} 2^{1/3} \sqrt{6} \right) \left(1 - \frac{\hat{g}_0}{m_0^4} \eta + \mathcal{O}(\eta^2) \right) \cdot \\ & \cdot \exp \left[- \left(19.92492 + \frac{2\pi m_0}{\hat{g}_0} \frac{64}{3} \right) \frac{m_0^8}{\hat{g}_0^2} \frac{1}{\eta^2} + \left(4.05735 - \frac{2\pi m_0}{\hat{g}_0} \frac{4(4 - 9\pi^2)}{27} \right) + \frac{\hat{g}_0}{m_0^4} \eta \right]. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Diese Nukleationsrate muß noch renormiert werden. Dazu wird ein Renormierungsschema in Termen der nackten Vertexfunktionen $\Gamma_0^{(n,l)}(\{p; q\}; m_0, g_0)$ mit $\{p, q\} = \{p_1, \dots, p_n; q_1, \dots, q_l\}$ eingeführt, welche durch Legendre- und Fourier-Transformationen aus den Erwartungswerten des nackten Feldes Φ entstehen:

$$\left\langle \Phi(x_1) \dots \Phi(x_n) \frac{1}{2} \Phi^2(y_1) \dots \frac{1}{2} \Phi^2(y_l) \right\rangle_c. \quad (6.18)$$

Das Verhalten des Propagators für kleine Impulse

$$-\Gamma_0^{(2,0)}(p; m_0, g_0) = \frac{1}{Z} \left(m_R^2 + p^2 + \mathcal{O}(p^4) \right) \quad (6.19)$$

legt folgende Definition für die renormierte Masse nahe:

$$m_R^2 = \frac{\Gamma_0^{(2,0)}(p)}{\left. \frac{\partial^2}{\partial p^2} \Gamma_0^{(2,0)}(p) \right|_{p^2=0}} = -Z \cdot \Gamma_0^{(2,0)}(0; m_0, g_0). \quad (6.20)$$

Die Wellenfunktionsrenormierungskonstante Z mit

$$\Phi_R = Z^{-1/2} \Phi \quad (6.21)$$

ist dabei gegeben durch

$$\frac{1}{Z} = - \left. \frac{\partial \Gamma_0^{(2,0)}(p; m_0, g_0)}{\partial p^2} \right|_{p^2=0}. \quad (6.22)$$

In der hier vorliegenden Phase gebrochener Symmetrie läßt sich die renormierte Kopplung durch den Vakuumerwartungswert v des Feldes

$$v = \alpha + \langle \varphi \rangle \quad \text{mit} \quad \alpha^2 = \frac{3m_0^2}{\hat{g}_0} \quad (6.23)$$

definieren. Daraus bekommt man den renormierten Vakuumerwartungswert

$$v_R = \frac{v}{Z^{1/2}}, \quad (6.24)$$

mit dessen Hilfe man die renormierte Kopplung

$$\hat{g}_R := \frac{3m_R^2}{v_R^2} \quad (6.25)$$

definiert. Die Größe

$$u_R = \frac{\hat{g}_R}{m_R} \quad (6.26)$$

entspricht einer dimensionslosen renormierten Kopplung, welche im hier als Entwicklungsparameter dienen soll.

Das hier benutzte Renormierungsschema läßt sich durch den folgenden Satz von Renormierungsbedingungen zusammenfassen:

$$\begin{aligned} \Gamma_R^{(2,0)}(0; m_R, u_R) &= -m_R^2 \\ \left. \frac{\partial}{\partial p^2} \Gamma_R^{(2,0)}(p; m_R, u_R) \right|_{p^2=0} &= -1 \\ \frac{3m_R^2}{v_R^2} &= \hat{g}_R \\ \Gamma_R^{(2,1)}(\{0; 0\}; m_R, u_R) &= -1 \end{aligned} \quad (6.27)$$

Der Zusammenhang zwischen den renormierten und den nackten Größen ist dann in 1-loop Ordnung durch folgende Gleichungen gegeben [78]:

$$\begin{aligned} m_0^2 &= m_R^2 \left\{ 1 - \frac{3}{64\pi} u_R + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}, \\ \hat{g}_0 &= \hat{g}_R \left\{ 1 + \frac{7}{32\pi} u_R + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}, \\ u_0 &= u_R \left\{ 1 + \frac{31}{128\pi} u_R + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}, \\ Z &= 1 - \frac{1}{64\pi} u_R + \mathcal{O}(u_R^2), \\ \eta &= Z^{-1/2} \eta_R = \eta_R \left\{ 1 + \frac{1}{128\pi} u_R + \mathcal{O}(u_R^2) \right\}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Wie bereits in Abschnitt 4.4.2 gesehen, sind in drei Dimensionen die Korrekturterme trotz vorhandener UV-Divergenzen endlich.

Eingesetzt in Gleichung (6.17) bekommt man die renormierte Übergangsrate bis zur 1-loop Ordnung:

$$\begin{aligned} \Gamma_R &= \left(\eta_R \frac{u_R}{m_R^3} \right)^{-7/3} \frac{u_R^{-3/2}}{m_R^3} \left(\frac{16384}{27} 2^{1/3} \sqrt{6} \right) \left(1 - \left(\frac{799}{768\pi} + \frac{1}{m_R^3} \eta_R \right) u_R + \mathcal{O}(u_R^2) + \mathcal{O}(\eta_R^2) \right) \cdot \\ \exp \left[- \left(\frac{2\pi}{u_R} \frac{64}{3} - 7.40841 + \mathcal{O}(u_R) \right) \frac{m_R^6}{u_R^2} \frac{1}{\eta_R^2} + \left(4.05735 - \frac{2\pi}{u_R} \frac{4(4-9\pi^2)}{27} \right) + \frac{u_R}{m_R^3} \eta_R + \mathcal{O}(\eta_R^2) \right]. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Nukleationsrate für Phasenübergänge erster Ordnung, wie sie z.B. im frühen Universum auftreten, in einer in der führenden Ordnung mit der Thin wall approximation übereinstimmenden Entwicklung berechnet und anhand der darin vorkommenden Fluktuationsdeterminante die Methode zur Berechnung von Determinanten untersucht.

Das hier zugrunde liegende Modell ist ein asymmetrisches Doppelmulden-Potential mit einer Potentialdifferenz $\tilde{\eta}$ zwischen den Minima, nach der alle Größen im Rahmen der oben erwähnten Näherung entwickelt wurden. So wurden die auch Bounce-Lösung genannte Lösung der Feldgleichung, welche das kritische Tröpfchen beschreibt, und ihre Wirkung als Potenzreihe in $\tilde{\eta}$ bestimmt. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt aber in der Berechnung der ebenfalls in der Übergangsrates vorkommenden Fluktuationsdeterminante. Ihr Logarithmus wurde in der Schwingerschen Eigenzeitdarstellung in einen hoch- und einen niederfrequenten Anteil aufgespalten. Für den hochfrequenten Anteil wurden die ersten sechs Koeffizienten der Seeley-Entwicklung berechnet. Der niederfrequente Anteil ist durch die niedrigsten Eigenwerte des Fluktuationsoperators gegeben, welche störungstheoretisch bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$ berechnet werden konnten. Man findet zwei „Bänder“ um die in nullter Ordnung diskreten Eigenwerte Null und Drei und ein kontinuierliches Spektrum, von dem man allerdings nur die führende Ordnung kennt. Die Beiträge der Eigenwerte ließen sich auch in dem gesamten Frequenzbereich aufsummieren, so daß die führende Ordnung der Determinante exakt bekannt ist.

Die Näherungen der Determinante in den beiden Frequenzbereichen wurden nun auf verschiedene Weise zusammengesetzt und dabei die Methodik zur Berechnung einer Determinante untersucht. Die beiden Bereiche können mit einem scharfen Cutoff getrennt oder die Hochfrequenznäherung durch Einführen einer künstlichen Masse kontinuierlich abgeschnitten werden. Bei beiden Verfahren besteht außerdem die Möglichkeit, die niedrigsten Bänder aus den Näherungen auszunehmen und deren exakte aufsummierte Werte nach dem Zusammensetzen der übrigen Determinante wieder hinzuzuaddieren. Ein Vergleich dieser Verfahren bei der zu untersuchenden und bei zwei exakt bekannten Determinanten zeigte, daß die durch den reinen Massencutoff berechneten Werte in allen Fällen etwas

zu groß sind. Am zuverlässigsten erschien das Verfahren des Massencutoffs, in dem die niedrigsten Bänder separat behandelt werden.

Insgesamt zeigen die nach den verschiedenen Verfahren erhaltenen Ergebnisse aber untereinander und mit dem unabhängig davon berechnetem exaktem Ergebnis für die führende Ordnung gute Übereinstimmung. Die ebenfalls unabhängig voneinander berechneten Näherungen für hohe und niedrige Frequenzen für die Spur der Heat kernel schneiden sich und lassen sich glatt zusammenfügen.

Mit den berechneten Größen bekommt man schließlich für die gesuchte Nukleationsrate eine Störungsreihe in $\tilde{\eta}$ von der Form

$$\Gamma(\tilde{\eta}) = \mathcal{A}(\tilde{\eta}) e^{-\mathcal{S}(\tilde{\eta})} .$$

Eine interessante Aufgabe wäre es sicherlich noch, die für dieses Modell gefundene Übergangsrate numerisch durch Computersimulationen zu überprüfen. Die hier entwickelte Methodik zur Berechnung der Determinante läßt sich auch auf realistischere Theorien, wie den elektroschwachen Phasenübergang oder den Confinement–Deconfinement–Übergang anwenden.

Anhang A

Die Existenz genau einer negativen Mode

In diesem Anhang soll für beliebige Dimension D gezeigt werden, daß die zweite Ableitung der Wirkung genau eine Eigenfunktion q_0 mit negativem Eigenwert λ_0 hat. Der Beweis stammt von Coleman [51] und soll hier nur skizziert werden. Die Existenz überhaupt einer negativen Mode ist bereits in Abschnitt 2.5.2 gezeigt worden. Das Vorhandensein zweier negativer Moden führt zum Widerspruch, wie man durch Betrachtung geeigneter Funktionale zeigen kann:

Aus der WKB–Theorie weiß man, daß das System entlang des Weges mit dem geringsten Widerstand durch die Barriere tunnelt. Das zugehörige Wirkungsfunktional

$$\mathcal{S}_{\text{WKB}}[q(t)] = \int dt \sqrt{2U(q(t))} \quad (\text{A.1})$$

hat also ein echtes Minimum für \bar{q} , dem Weg, auf dem das System tunnelt:

$$\delta^2 \mathcal{S}_{\text{WKB}}|_{\bar{q}(t)} \geq 0. \quad (\text{A.2})$$

Aus dem Pfadintegralformalismus weiß man andererseits, daß die Tunnellösung die Bounce–Lösung ist (vgl. Abb. 2.6) und der zugehörige Fluktuationsoperator aber (mindestens) eine negative Mode hat.

Beide Prinzipien sind in einer Art und Weise zueinander äquivalent, wie das Hamiltonsche Prinzip zum Jacobi–Prinzip. Formal äußert sich das wie folgt: Man definiert ein weiteres Funktional

$$\mathcal{S}_{\text{PI}}[q(t)] = \int dt \mathcal{L}(\dot{q}(t), q(t)) \quad (\text{A.3})$$

für Bewegungen, welche im falschen Minimum beginnen und an einer Stelle enden, an der das Potential verschwindet. Im Bereich der Integration ist U also überall positiv. Da der Endpunkt und das Zeitintervall der Bewegung nicht fixiert sind, sind die Randbedingungen schwächer als im Hamiltonschen Prinzip, und der stationäre Punkt von \mathcal{S}_{PI} erfüllt erst

recht die Euler–Lagrange–Gleichung (Gl. (2.14)). Jede Bewegung $q(t)$ läßt sich nun auf einen Weg $q(l)$ abbilden. In Termen von $q(l)$ und dl/dt ausgedrückt läßt sich \mathcal{S}_{PI} schreiben als

$$\mathcal{S}_{\text{PI}} = \int dl \left[\frac{1}{2} \frac{dl}{dt} + U \frac{dt}{dl} \right]. \quad (\text{A.4})$$

Den stationären Punkt bekommt man daraus wegen den nichthamiltonschen Randbedingungen ohne Variationsrechnung. Für ihn gilt:

$$\frac{dl}{dt} = \sqrt{2U}. \quad (\text{A.5})$$

Setzt man dies in Gleichung (A.4) ein, so erhält man

$$\mathcal{S}_{\text{PI}}[q(t)] \geq \mathcal{S}_{\text{WKB}}[q(t)]. \quad (\text{A.6})$$

Die Gleichheit gilt am stationären Punkt $\bar{q}(t)$. Hierin zeigt sich die oben erwähnte Äquivalenz. Mit Gleichung (A.2) und Gleichung (A.6) folgt aber sofort:

$$\delta^2 \mathcal{S}_{\text{PI}}|_{\bar{q}(t)} \geq 0. \quad (\text{A.7})$$

Die Äquivalenz beider Prinzipien, von denen die WKB–Theorie ein echtes Minimum zeigt und alle Abweichungen von dem Tunnelpfad die Wirkung vergrößern, während im Pfadintegralformalismus Eigenfunktionen mit negativen Eigenwerten vorkommen, welche Richtungen beschreiben, in denen die Wirkung kleiner wird, führt offensichtlich zu einem Paradoxon, was aber durch folgende Tatsache aufgelöst wird: Nicht alle kleinen Abweichungen der Bounce–Lösung können auf die möglichen Tunnelwege abgebildet werden, da sie nicht unbedingt auf der Fläche mit $U(q) = 0$ zur Ruhe kommen, sondern über sie hinausschießen bzw. sie eventuell nicht erreichen. Gäbe es jetzt zwei Eigenfunktionen mit negativen Eigenwerten, so könnte man durch Linearkombination eine Abweichung bilden, die auf obiger Fläche zur Ruhe kommt, was aber zum Widerspruch führt.

Etwas formaler findet man diesen Widerspruch wie folgt:

Durch Fortsetzung zu positiven Zeiten läßt sich immer eine gerade Bounce–Lösung $\bar{q}(t)$ konstruieren, welche die gewöhnliche euklidische Wirkung $\mathcal{S} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(\dot{q}(t), q(t)) dt$, beschränkt auf Funktionen, welche im Unendlichen im falschen Vakuum sind, stationär macht. Die Eigenfunktionen zu $\delta^2 \mathcal{S} = -\frac{d^2}{dt^2} + U''(\bar{x})$ können so gewählt werden, daß sie entweder gerade oder ungerade sind. Aus der Theorie der Schrödingergleichung weiß man, daß die Eigenfunktion zum niedrigsten Eigenwert q_0 eine gerade Funktion sein muß. Jetzt macht man die Annahme, daß es eine zweite negative Mode q'_0 gäbe. Dann kann diese entweder gerade oder ungerade sein. Man macht diesbezüglich eine Fallunterscheidung:

Fall 1: q'_0 ist gerade. Dann lassen sich Koeffizienten a und b finden, so daß das Skalarprodukt

$$\left(a q_0(0) + b q'_0(0) \right) \cdot \nabla U(\bar{q}(0)) = 0 \quad (\text{A.8})$$

verschwindet. Damit kann man eine einparametrische Familie von Bewegungen konstruieren

$$q_\lambda(t) = \bar{q}(t) + \lambda(aq_0(t) + bq_0'(t)) + \mathcal{O}(\lambda^2), \quad (\text{A.9})$$

so daß die Bewegung für hinreichend kleines λ an einer Stelle mit verschwindendem Potential $U(q_\lambda(0)) = 0$ endet, was sich durch Taylorentwicklung zeigen läßt. Da q_λ nach Konstruktion eine gerade Funktion ist, verschwindet die erste Ableitung des Potentials am Ursprung. Die zweite Ableitung ist positiv, so daß $q_\lambda(t)$ also ganz in dem Bereich mit positivem Potential liegt und \mathcal{S}_{PI} für diese Funktion definiert ist. Aus der Symmetrie von $q_\lambda(t)$ folgt dann

$$\mathcal{S}[q_\lambda(t)] = 2\mathcal{S}_{\text{PI}}[q_\lambda(t)], \quad (\text{A.10})$$

und man findet weiter

$$\left. \frac{d^2 \mathcal{S}[q_\lambda(t)]}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} = 2 \left. \frac{d^2 \mathcal{S}_{\text{PI}}[q_\lambda(t)]}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0}. \quad (\text{A.11})$$

Dies ist der gesuchte Widerspruch, denn die linke Seite ist negativ, da q_0 und q_0' nach Voraussetzung Eigenfunktionen mit negativen Eigenwerten sind, während die rechte Seite nach Gleichung (A.7) positiv ist.

Fall 2: q_0' ist ungerade. Dann wählt man die Parameter gemäß der Bedingung

$$(a q_0'(0) + b \ddot{q}(0)) \cdot \nabla U(\bar{q}(0)) = 0 \quad (\text{A.12})$$

und konstruiert wieder eine einparametrische Familie von Bewegungen

$$q_\lambda(t) = \bar{q}(t) + \lambda(aq_0'(t) + b\ddot{q}(t)) + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (\text{A.13})$$

\bar{q} steht dabei für die Bounce-Lösung, die Ableitung \ddot{q} ist eine ungerade Funktion mit dem Eigenwert Null. Auch diese Bewegung Gl. (A.13) endet zum Zeitpunkt $t = 0$ an einem Punkt mit verschwindendem Potential, denn zu diesem Zeitpunkt verschwindet die mit λ multiplizierte Klammer, und es gilt $q_\lambda(0) = q_0(0) \quad \forall \lambda$. Mit Hilfe der Beziehung Gleichung (A.12) kann man auch hier wieder zeigen, daß $q_\lambda(t)$ für $t \leq 0$ zu der Klasse der Funktionen gehört, für die \mathcal{S}_{PI} definiert ist. Da der Koeffizient vor λ in Gleichung (A.13) eine ungerade Funktion von t ist, erhält man

$$\mathcal{S}[q_\lambda(t)] = \mathcal{S}_{\text{PI}}[q_\lambda(t)] + \mathcal{S}_{\text{PI}}[q_{-\lambda}(t)]. \quad (\text{A.14})$$

Zweimaliges Ableiten führt wieder auf Gleichung (A.11) und damit zum Widerspruch, denn q_0' hat nach Voraussetzung einen negativen Eigenwert und der Eigenwert von $\ddot{q}(0)$ ist Null, während die rechte Seite wieder nach Gleichung (A.7) positiv ist.

Anhang B

Die Lösung mit der kleinsten Wirkung

Hier soll jetzt der Beweis aus der Arbeit von Coleman, Glaser und Martin [52] skizziert werden. Dort wurde gezeigt, daß die sphärisch symmetrische Lösung, abgesehen von der trivialen Lösung, diejenige mit der kleinsten Wirkung ist. Eine exakte Formulierung findet die Behauptung in folgendem

Theorem: *Im D -dimensionalen euklidischen Raum mit $D > 2$ besitzt die Gleichung*

$$\Delta\Phi = U'(\Phi) \tag{B.1}$$

für jedes zulässige Potential U mindestens eine nichttriviale, monotone sphärische Lösung Φ , welche im Unendlichen verschwindet. Wenn eine andere Lösung entweder nicht sphärisch oder nicht monoton ist, hat sie eine echt größere Wirkung.

Eine Lösung, die im Unendlichen gegen das falsche Minimum geht, bekommt man daraus durch Addition einer Konstanten.

Ein Potential U heißt *zulässig*, wenn

1. U zweimal stetig differenzierbar für alle Φ ist,
2. $U(0) = U'(0) = 0$ ist,
3. es einen Punkt gibt, für den U negativ wird und
4. $U''(0) > 0$ und U außerhalb eines endlichen Intervalls positiv ist.

Die ersten drei Forderungen werden gestellt, damit man überhaupt eine nichttriviale, im Unendlichen verschwindende Lösung findet.

Für jede Lösung von Gleichung (B.1) ist die Wirkung

$$\mathcal{S} = \int d^D x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial_\mu \Phi + U(\Phi) \right] = \mathcal{T} + \mathcal{V} \quad (\text{B.2})$$

stationär, insbesondere muß \mathcal{S} also unter der bereits in Gleichung (2.98) für positives σ angegebenen Skalentransformation

$$\Phi_\sigma(x) = \Phi(x/\sigma), \quad (\text{B.3})$$

$$\mathcal{T}[\Phi_\sigma(x)] = \sigma^{D-2} \mathcal{T}[\Phi(x)], \quad (\text{B.4})$$

$$\mathcal{V}[\Phi_\sigma(x)] = \sigma^D \mathcal{V}[\Phi(x)] \quad (\text{B.5})$$

stationär sein (vgl. Gl. (2.99)):

$$(D-2)\mathcal{T} + D\mathcal{V} = 0, \quad (\text{B.6})$$

woraus mit $\mathcal{S} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$ für jede Lösung von Gleichung (B.1) folgt (vgl. Gl. (2.100))

$$\mathcal{S} = \frac{2}{D} \mathcal{T}. \quad (\text{B.7})$$

Gesucht ist nun das Minimum der Wirkung \mathcal{S} , aber beschränkt auf stationäre Lösungen. Dieses Problem wird jetzt auf ein echtes Minimierungsproblem, das sogenannte *reduzierte Problem* zurückgeführt.

Definition: *Das reduzierte Problem besteht darin, eine Funktion zu finden, welche im Unendlichen verschwindet und \mathcal{T} für ein festes, negatives \mathcal{V} minimiert.*

Wenn man eine Lösung des reduzierten Problems für ein negatives \mathcal{V} finden kann, so kann man daraus durch Skalentransformation eine Lösung für jedes andere negative \mathcal{V} finden.

Der Beweis des obigen Theorems teilt sich auf in den Beweis von zwei Hilfsätzen:

Satz A: *Wenn eine Lösung des reduzierten Problems existiert, dann ist sie die Lösung von Gleichung (B.1) mit einer Wirkung kleiner oder gleich der von jeder anderen nichttrivialen Lösung von Gleichung (B.1).*

Beweis: Als erstes wird gezeigt, daß jede Lösung des reduzierten Problems in eine Lösung von Gleichung (B.1) skalentransformiert werden kann:

Eine Lösung des reduzierten Problems ist eine Funktion, welche $\mathcal{S}_\lambda = \mathcal{T} + \lambda^2 \mathcal{V}$ minimiert, wobei λ^2 ein Lagrange-Multiplikator ist. In Analogie zu Gleichung (B.6) lautet die Stationaritätsbedingung hier

$$(D-2)\mathcal{T}[\Phi_R] + \lambda^2 D \mathcal{V}[\Phi_R] = 0. \quad (\text{B.8})$$

Da \mathcal{V} negativ ist, folgt aus obiger Gleichung, daß λ^2 positiv ist und man eine skalentransformierte Funktion Φ_λ definieren kann, welche eine Lösung von Gleichung (B.1)

ist. Um dies zu sehen betrachtet man die zu minimierende Wirkung $\mathcal{S} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$ für diese skalentransformierte Lösung Φ_λ

$$\mathcal{S}[\Phi_\lambda] = \lambda^{D-2}\mathcal{T} + \lambda^D\mathcal{V}. \quad (\text{B.9})$$

Division durch λ^{D-2} führt auf die Wirkung \mathcal{S}_λ , welche nach Voraussetzung minimal ist. Damit ist für die skalentransformierte Lösung des reduzierten Problems Φ_λ aber auch die ursprüngliche Wirkung $\mathcal{S} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$ minimal.

Als nächstes wird gezeigt, daß die Wirkung dieser Lösung kleiner oder gleich derjenigen einer anderen Lösung ist. Sei Φ dazu eine andere, nichttriviale Lösung von Gleichung (B.1). Für nichttriviale Lösungen ist $\mathcal{T}[\Phi]$ ungleich Null und $\mathcal{V}[\Phi]$ also nach Gleichung (B.6) negativ. Φ_R sei nun die Lösung des reduzierten Problems mit demselben Potential

$$\mathcal{V}[\Phi_R] = \mathcal{V}[\Phi]. \quad (\text{B.10})$$

Nach Definition des reduzierten Problems ist

$$\mathcal{T}[\Phi_R] \leq \mathcal{T}[\Phi]. \quad (\text{B.11})$$

Aus dem Verhältnis der beiden Stationaritätsbedingungen Gleichung (B.8) für die reduzierte Lösung Φ_R und Gleichung (B.6) für die andere nichttriviale Lösung Φ sieht man mit Gleichung (B.11), daß $\lambda \leq 1$ sein muß. Für die skalentransformierte Lösung von Gleichung (B.1) findet man dann

$$\mathcal{T}[\Phi_\lambda] = \lambda^{D-2}\mathcal{T}[\Phi_R] \leq \mathcal{T}[\Phi_R] \leq \mathcal{T}[\Phi] \quad (\text{B.12})$$

und also mit Gleichung (B.7)

$$\mathcal{S}[\Phi_\lambda] \leq \mathcal{S}[\Phi]. \quad (\text{B.13})$$

Damit ist Satz A bewiesen.

Der andere Hilfssatz lautet:

Satz B: *Es existiert mindestens eine Lösung des reduzierten Problems. Alle Lösungen des reduzierten Problems sind sphärisch und monoton.*

Beweis: Die Existenz einer sphärisch monotonen Lösung zeigt man durch Konstruktion:

Da \mathcal{T} ein positives Funktional ist, ist es nach unten beschränkt und man kann eine absteigende Folge von Funktionen Φ_n konstruieren, so daß $\mathcal{V}[\Phi_n]$ eine feste Zahl ist und $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{T}[\Phi_n] = \text{Inf } \mathcal{T}$ gilt. Zu zeigen bleibt, daß man eine Teilfolge auswählen kann, die gegen das Minimum von \mathcal{T} konvergiert. Da die $\Phi_n(x)$ entweder größer gleich oder kleiner gleich Null sind für alle n und alle x , kann man das sphärische Rearrangement Φ_R der Funktion bilden. Der Übergang auf sphärische Koordinaten geschieht durch

$$r = \exp(x). \quad (\text{B.14})$$

Die Funktion $\Phi_R = f \exp(-\frac{1}{2}(D-2)x)$ ist dann die gesuchte Lösung des reduzierten Problems, denn für sie gilt $\mathcal{V}[\Phi_R] \leq \mathcal{V}[\Phi_n]$ und $\mathcal{T}[\Phi_R] \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{T}[\Phi_n]$.

Als letztes muß gezeigt werden, daß es keine nichtsphärische Lösung des reduzierten Problems gibt. Dazu nutzt man aus, daß \mathcal{T} für eine beliebige Funktion nur dann gleich seinem sphärischen Rearrangement ist, wenn die ursprüngliche Funktion sphärisch und monoton ist.

Damit ist Satz B und also auch das Theorem gezeigt.

Anhang C

Integraltafel

In diesem Anhang werden ein paar häufig gebrauchte Integrale berechnet:

1. Integrale des Typs

$$\int_0^{\infty} r \operatorname{sech}^{2n+1} r \sinh r \, dr = J_{2n+1}, \quad n \geq 0. \quad (\text{C.1})$$

Diese Integrale sind in der Formelsammlung von Gradstein und Ryshik [71] unter der Nummer 3.527.11 zu finden:

$$J_{2n+1} = \frac{\sqrt{\pi}}{4n} \frac{\Gamma(n)}{\Gamma(n + 1/2)}. \quad (\text{C.2})$$

2. Integrale des Typs

$$\int_0^{\infty} r \operatorname{sech}^{2n+1} r \sinh^{2m+1} r \, dr = H_{2n+1,2m+1}, \quad n > m \geq 0. \quad (\text{C.3})$$

Für diese Integrale läßt sich mit Hilfe der Beziehung $\sinh^2 r = \cosh^2 r - 1$ eine Rekursionsformel herleiten:

$$H_{2n+1,2m+1} = H_{2n-1,2m-1} - H_{2n+1,2m-1}. \quad (\text{C.4})$$

Den Rekursionsanfang bilden dabei die Integrale des ersten Typs:

$$H_{2n+1,1} = J_{2n+1}. \quad (\text{C.5})$$

3. Integrale des Typs

$$\int_0^{\infty} r^2 \operatorname{sech}^{2n} r \, dr = I_{2n}, \quad n \geq 1. \quad (\text{C.6})$$

Das einfachste Integral ist als Formel 3.527.5 bei Gradstein und Ryshik [71] zu finden:

$$I_2 = \frac{\pi^2}{12}. \quad (\text{C.7})$$

Für Integrale mit höheren sech-Potenzen leitet man durch partielle Integration eine Rekursionsformel her:

$$\begin{aligned}
I_{2n+2} &= \int_0^\infty r^2 \operatorname{sech}^{2n+2} r \, dr = \int_0^\infty dr \, r^2 \operatorname{sech}^{2n} r \frac{d}{dr} \tanh r \\
&= - \int_0^\infty dr \, 2r \operatorname{sech}^{2n+1} r \sinh r + (2n) \int_0^\infty r^2 \operatorname{sech}^{2n+2} r \sinh^2 r \, dr \\
&= -2J_{2n+1} + (2n) \int_0^\infty r^2 \operatorname{sech}^{2n} r \, dr - (2n) \int_0^\infty r^2 \operatorname{sech}^{2n+2} r \, dr \\
&= -2J_{2n+1} + 2n I_{2n} - 2n I_{2n+2}.
\end{aligned} \tag{C.8}$$

Die Randterme verschwinden. Damit findet man also die Relation

$$I_{2n+2} = \frac{2}{2n+1} [n I_{2n} - J_{2n+1}]. \tag{C.9}$$

4. Integrale des Typs

$$\int_0^\infty r^2 \operatorname{sech}^{2n} r \sinh^{2m} r \, dr = M_{2n,2m}, \quad n > m \geq 0. \tag{C.10}$$

Analog wie im zweiten Fall läßt sich für diese Integrale mit der Beziehung $\sinh^2 r = \cosh^2 r - 1$ eine Rekursionsformel herleiten:

$$M_{2n,2m} = M_{2n-2,2m-2} - M_{2n,2m-2}. \tag{C.11}$$

Der Rekursionsanfang ist durch ein Integral des vorigen Typs gegeben:

$$M_{2n,0} = I_{2n}. \tag{C.12}$$

5. Für Integrale ohne r -Potenzen findet man bei Gradstein und Ryshik [71] die Formel 3.512.2:

$$\int_0^\infty \operatorname{sech}^\nu r \sinh^\mu r \, dr = \frac{1}{2} B\left(\frac{\mu+1}{2}, \frac{\nu-\mu}{2}\right), \quad \operatorname{Re} \mu > -1, \operatorname{Re}(-\mu + \nu) > 0. \tag{C.13}$$

$B(x, y)$ ist dabei die Beta-Funktion.

Anhang D

Berechnung der Koeffizienten der Seeley–Entwicklung

In diesem Anhang soll nun die Berechnung der Koeffizienten der Seeley–Entwicklung für die Spur der Heat kernel (Gl. (4.43))

$$\mathrm{Tr} \left(e^{-Mt} - e^{-\overset{\circ}{M}t} \right) = \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^{\infty} t^n \mathcal{O}_n \quad (\text{D.1})$$

nach dem DPY–Verfahren [40] (Entwicklung nach ebenen Wellen) in $D = 3$ Dimensionen erfolgen. In Abschnitt 4.3.3 wurden folgende Formeln für die Koeffizienten gefunden (Gl. (4.114)):

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= - \int d^3x \left(V - \overset{\circ}{V} \right) \quad \text{und für } n \geq 2 \\ \mathcal{O}_n &= (-)^n \int d^3x \left[\left(\sum_{m=0}^{n-2} \frac{2^m}{(m+n)!} \frac{1}{m!} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_m=1}^3 V \left\{ \partial_{\mu_1}^2 \dots \partial_{\mu_m}^2 M^{n-m-2} \right\} V \right) - \frac{\overset{\circ}{V}^n}{n!} \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Dabei sind die Potentiale V und $\overset{\circ}{V}$ in erster Ordnung gegeben durch (Gl. (4.15), Gl. (4.19))

$$V(\xi) = -6 \operatorname{sech}^2(\xi) + 4 \quad \text{und} \quad \overset{\circ}{V}(\xi) = 4. \quad (\text{D.3})$$

Die Korrekturen in höheren Ordnungen in $\tilde{\eta}$ sind in Abschnitt 4.1 in den Gleichungen Gl. (4.16), Gl. (4.17) und Gl. (4.20) bis Gl. (4.22) angegeben.

Der Operator M ist nach Gleichung (4.87) gegeben durch

$$M = -\partial^2 + V. \quad (\text{D.4})$$

Damit lassen sich die Koeffizienten nun berechnen. Bei den ersten beiden Koeffizienten ist die Rechnung bis zur zweiten Ordnung in $\tilde{\eta}$, einschließlich des \tilde{R}^3 –Terms der dritten Ordnung angeführt. Da die Zahl der Terme aber sehr schnell ansteigt und das Prinzip

dasselbe bleibt, ist für die nachfolgenden Koeffizienten hier nur die konstante Ordnung in $\tilde{\eta}$ angegeben. Für die Differenz der beiden Spuren verschwindet, wie bereits vorne erwähnt, der nullte Koeffizient \mathcal{O}_0 .

Im einzelnen findet man also:

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_1 &= - \int d^3x \left[\frac{2^0}{1!0!} \{\partial^0 M^0\} V - \frac{\mathring{V}}{1!} \right] \\
&= - \int d^3x (V - \mathring{V}) \\
&= -4\pi \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left(-6 \operatorname{sech}^2 \xi - 4\tilde{\eta} (\tanh \xi - 1) + \tilde{\eta}^2 (V_2 - \mathring{V}_2) + \tilde{\eta}^3 (V_3 - \mathring{V}_3) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \\
&= -4\pi \left[\int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^2 (-6 \operatorname{sech}^2 \xi) + \frac{4\tilde{\eta}}{3} \int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^3 \operatorname{sech}^2 \xi + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{\eta}^2 \int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^2 (V_2 - \mathring{V}_2) + \tilde{\eta}^3 \int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^2 (V_3 - \mathring{V}_3) \right] + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \\
&= 4\pi \left(\pi^2 + 12\tilde{R}^2 - \frac{\tilde{\eta}\tilde{R}}{3} (8\tilde{R}^2 + 2\pi^2) - \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \frac{20}{27} \right) + \tilde{\eta}^2 (82.6833 \tilde{R}^2 + 336.814) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3),
\end{aligned} \tag{D.5}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_2 &= \int d^3x \left[\frac{1}{2} V \{\partial^0 M^0\} V - \frac{\mathring{V}^2}{2!} \right] \\
&= \int d^3x \left(\frac{V^2}{2} - \frac{\mathring{V}^2}{2} \right) \\
&= 4\pi \int_0^\infty d\tilde{r} \tilde{r}^2 \left[-24 \operatorname{sech}^2 \xi + 18 \operatorname{sech}^4 \xi + \tilde{\eta} (-16 (\tanh \xi - 1) + 24 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh \xi) + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{\eta}^2 \left(-\frac{8}{3} + 4 V_2 - 6 V_2 \operatorname{sech}^2 \xi + 8 \tanh^2 \xi \right) + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{\eta}^3 \left(4V_3 - 6V_3 \operatorname{sech}^2 \xi - 4V_2 \tanh \xi - \frac{8}{9} \right) \right] + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \\
&= 4\pi \int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^2 \left[(-24 \operatorname{sech}^2 \xi + 18 \operatorname{sech}^4 \xi) + 24\tilde{\eta} (\operatorname{sech}^2 \xi \tanh \xi) + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{\eta}^2 \left(-\frac{8}{3} + 4 V_2 - 6 V_2 \operatorname{sech}^2 \xi + 8 \tanh^2 \xi \right) \right] + 4\pi \frac{16}{3} \tilde{\eta} \int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^3 \operatorname{sech}^2 \xi + \\
&\quad + 4\pi \tilde{\eta}^3 \int_{-\infty}^\infty d\xi (\xi + \tilde{R})^3 \frac{d}{d\xi} \left(4V_3 - 6V_3 \operatorname{sech}^2 \xi - 4V_2 \tanh \xi - \frac{8}{9} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4) \\
&= -8\pi \left(6 + \pi^2 + 12 \tilde{R}^2 - \tilde{\eta} \tilde{R} \left(24 + \frac{4\pi^2}{3} + \frac{16}{3} \tilde{R}^2 \right) - \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \frac{64}{27} \right) - \\
&\quad - \tilde{\eta}^2 (1160.97 + 287.022 \tilde{R}^2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3),
\end{aligned} \tag{D.6}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_3 &= - \int d^3x \left[\frac{1}{6} V \{ \partial^0 M^1 \} V + \frac{1}{12} V \{ \partial^2 M^0 \} V - \frac{\dot{V}^3}{3!} \right] \\
&= - \int d^3x \left(\frac{V M V}{6} + \frac{V \Delta V}{12} - \frac{\dot{V}^3}{6} \right) \\
&= - \int d^3x \left(\frac{V^3}{6} - \frac{\dot{V}^3}{6} - \frac{V \Delta V}{12} \right) \\
&= 4\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (\xi + \tilde{R})^2 \left(48 \operatorname{sech}^2 \xi - 68 \operatorname{sech}^4 \xi + 30 \operatorname{sech}^6 \xi + \frac{8 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh \xi}{(\xi + \tilde{R})} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{12 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh \xi}{(\xi + \tilde{R})} - 8 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^2 \xi + 12 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^2 \xi \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \\
&= \frac{16\pi (90 + 11\pi^2 + 132\tilde{R}^2)}{15} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}), \tag{D.7}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_4 &= \int d^3x \left[\frac{1}{24} V \{ \partial^0 M^2 \} V + \frac{1}{60} V \{ \partial^2 M^1 \} V + \frac{1}{360} V \{ \partial^4 M^0 \} V - \frac{\dot{V}^4}{4!} \right] \\
&= \int d^3x \left(\frac{V M^2 V}{24} + \frac{V \Delta(MV) + V \partial_\mu(M \partial_\mu V) + V M \Delta V}{60} + \frac{V \Delta^2 V}{60} - \frac{\dot{V}^4}{24} \right) \\
&= \int d^3x \left(\frac{V^4}{24} - \frac{\dot{V}^4}{24} - \frac{V^2 \Delta V}{24} + \frac{V \Delta^2 V}{120} \right) \\
&= 4\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (\xi + \tilde{R})^2 \left(-64 \operatorname{sech}^2 \xi + 136 \operatorname{sech}^4 \xi - \frac{616 \operatorname{sech}^6 \xi}{5} + \frac{204 \operatorname{sech}^8 \xi}{5} - \right. \\
&\quad - \frac{16 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh \xi}{(\xi + \tilde{R})} + \frac{176 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh \xi}{5(\xi + \tilde{R})} - \frac{84 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh \xi}{5(\xi + \tilde{R})} + \\
&\quad + 16 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^2 \xi - \frac{152 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^2 \xi}{5} + \frac{48 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^2 \xi}{5} + \\
&\quad + \frac{32 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^3 \xi}{5(\xi + \tilde{R})} - \frac{48 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^3 \xi}{5(\xi + \tilde{R})} - \frac{16 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^4 \xi}{5} + \\
&\quad \left. + \frac{24 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^4 \xi}{5} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \\
&= \frac{-32\pi (1974 + 205\pi^2 + 2460\tilde{R}^2)}{525} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}), \tag{D.8}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_5 &= - \int d^3x \left[\frac{1}{120} V \{ \partial^0 M^3 \} V + \frac{1}{360} V \{ \partial^2 M^2 \} V + \frac{1}{2520} V \{ \partial^4 M^1 \} V + \right. \\
&\quad \left. \frac{1}{30240} V \{ \partial^6 M^0 \} V - \frac{\dot{V}^5}{5!} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \int d^3x \left(\frac{V M^3 V}{120} + \left(V \Delta(M^2 V) + V \partial_\mu(M \partial_\mu(MV)) + V \partial_\mu(M^2 \partial_\mu V) + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + V M \Delta(MV) + V M \partial_\mu(M \partial_\mu V) + V M^2 \Delta V \right) / 360 + \left(6 V \Delta^2(MV) + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 6 V \Delta \partial_\mu(M \partial_\mu V) + 2 V \Delta(M \Delta V) + 4 V \partial_\mu \partial_\nu(M \partial_\mu \partial_\nu V) + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 6 V \partial_\mu(M \Delta \partial_\mu V) + 6 V M \Delta^2 V \right) / 2520 + \frac{V \Delta^3 V}{336} - \frac{\mathring{V}^5}{120} \right) \\
&= - \int d^3x \left(\frac{V^5}{120} - \frac{\mathring{V}^5}{120} - \frac{V^3 \Delta V}{72} - \frac{V(\Delta V)(\Delta V)}{1260} + \frac{V^2 \Delta^2 V}{360} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{V \Delta(V \Delta V)}{360} - \frac{V \Delta^2 V^2}{840} - \frac{V \Delta^3 V}{1680} \right) \\
&= 4\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (\xi + \tilde{R})^2 \left(64 \operatorname{sech}^2 \xi - \frac{544 \operatorname{sech}^4 \xi}{3} + \frac{26416 \operatorname{sech}^6 \xi}{105} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{1264 \operatorname{sech}^8 \xi}{7} + \frac{288 \operatorname{sech}^{10} \xi}{5} + \frac{64 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh \xi}{3(\xi + \tilde{R})} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{5216 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh \xi}{105(\xi + \tilde{R})} - \frac{96 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh \xi}{35(\xi + \tilde{R})} + \frac{1536 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh \xi}{35(\xi + \tilde{R})} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{64 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^2 \xi}{3} + \frac{3392 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^2 \xi}{105} + \frac{64 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^2 \xi}{35(\xi + \tilde{R})^2} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{528 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^2 \xi}{5} - \frac{96 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^2 \xi}{35(\xi + \tilde{R})^2} - \frac{5568 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh^2 \xi}{35} - \right. \\
&\quad \left. - \frac{2432 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^3 \xi}{105(\xi + \tilde{R})} + \frac{96 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^3 \xi}{\xi + \tilde{R}} - \frac{3216 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^3 \xi}{35(\xi + \tilde{R})} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1216 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^4 \xi}{105} - \frac{2448 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^4 \xi}{35} + \frac{552 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^4 \xi}{7} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{96 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^5 \xi}{35(\xi + \tilde{R})} - \frac{144 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^5 \xi}{35(\xi + \tilde{R})} - \frac{32 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^6 \xi}{35} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{48 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^6 \xi}{35} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \\
&= \frac{64\pi}{11025} \left(19534 + 1785\pi^2 + 211420\tilde{R}^2 \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}), \tag{D.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_6 = & \int d^3x \left[\frac{1}{720} V \{ \partial^0 M^4 \} V + \frac{1}{2520} V \{ \partial^2 M^3 \} V + \frac{1}{20160} V \{ \partial^4 M^2 \} V + \right. \\
& \left. \frac{1}{272160} V \{ \partial^6 M^1 \} V + \frac{1}{5443200} V \{ \partial^8 M^0 \} V - \frac{\mathring{V}^6}{6!} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3x \left[\frac{VM^4V}{720} + \left(V \Delta(M^3V) + V \partial_\mu(M\partial_\mu(M^2V)) + V \partial_\mu(M^2\partial_\mu(MV)) + \right. \right. \\
&V \partial_\mu(M^3\partial_\mu V) + +VM\Delta(M^2V) + VM\partial_\mu(M\partial_\mu(MV)) + \\
&VM\partial_\mu(M^2\partial_\mu V) + VM^2\Delta(MV) + VM^2\partial_\mu(M\partial_\mu V) + +VM^3\Delta V \left. \right) /2520 + \\
&+ \left(6V\Delta^2(M^2V) + 6V\Delta\partial_\mu(M\partial_\mu(MV)) + 6V\Delta\partial_\mu(M^2\partial_\mu V) + 2V\Delta(M\Delta(MV)) + \right. \\
&+ 2V\Delta(M\partial_\mu(M\partial_\mu V)) + 2V\Delta(M^2\Delta V) + 4V\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\mu\partial_\nu(MV)) + \\
&2V\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\mu(M\partial_\nu V)) + 2V\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\nu(M\partial_\mu V)) + 4V\partial_\mu\partial_\nu(M^2\partial_\mu\partial_\nu V) + \\
&2V\partial_\mu(M\Delta(M\partial_\mu V)) + 6V\partial_\mu(M\Delta\partial_\mu(MV)) + 4V\partial_\mu(M\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\nu V)) + \\
&2V\partial_\mu(M\partial_\mu(M\Delta V)) + 4V\partial_\mu(M\partial_\nu(M\partial_\mu\partial_\nu V)) + 6V\partial_\mu(M^2\Delta\partial_\mu V) + \\
&6VM\Delta^2(MV) + 6VM\Delta\partial_\mu(M\partial_\mu V) + +2VM\Delta(M\Delta V) + \\
&4VM\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\mu\partial_\nu V) + 6VM\partial_\mu(M\partial_\mu\Delta V) + 6VM^2\Delta^2V \left. \right) /20160 + \\
&+ \left(90V\Delta^3(MV) + 90V\Delta^2\partial_\mu(M\partial_\mu V) + 18V\Delta^2(M\Delta V) + 72V\Delta\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\mu\partial_\nu V) + \right. \\
&+ 54V\Delta\partial_\mu(M\Delta\partial_\mu V) + 36V\partial_\mu\partial_\nu\partial_\lambda(M\partial_\mu\partial_\nu\partial_\lambda V) + 18V\Delta(M\Delta^2V) + \\
&+ 72V\partial_\mu\partial_\nu(M\partial_\mu\partial_\nu\Delta V) + 90V\partial_\mu(M\partial_\mu\Delta^2V) + 90VM\Delta^3V \left. \right) /272160 + \\
&+ \frac{V\Delta^4V}{2160} - \frac{\mathring{V}^6}{720} \left. \right] \\
&= \int d^3x \left[\frac{V^6}{720} - \frac{\mathring{V}^6}{720} - \frac{V^4\Delta V}{288} - \frac{V(\Delta V)(\Delta V^2)}{1440} + \frac{V^3\Delta^2V}{2160} - \frac{(\Delta V)(\Delta V)(\Delta V)}{15120} - \right. \\
&- \frac{11V\Delta(V\Delta^2V)}{30240} + \frac{V^2\Delta(V\Delta V)}{1440} + \frac{V\Delta(V^2\Delta V)}{1440} + \frac{V^2\Delta^2V^2}{5760} + \\
&+ \frac{V\Delta(V\Delta V^2)}{1440} - \frac{13V^2\Delta^3V}{20160} + \frac{V\Delta(V\Delta^2V)}{3780} - \\
&- \left. \frac{V\Delta^2(V\Delta V)}{3024} - \frac{V\Delta^3V^2}{6048} + \frac{V\Delta^4V}{30240} \right] \\
&= 4\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\xi (\xi + \tilde{R})^2 \left(\frac{-256 \operatorname{sech}^2 \xi}{5} + \frac{544 \operatorname{sech}^4 \xi}{3} - \frac{15392 \operatorname{sech}^6 \xi}{45} + \right. \\
&+ \frac{1884 \operatorname{sech}^8 \xi}{5} - \frac{64612 \operatorname{sech}^{10} \xi}{315} + \frac{2117 \operatorname{sech}^{12} \xi}{105} - \frac{64 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh \xi}{3(\xi + \tilde{R})} + \\
&+ \frac{1792 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh \xi}{45(\xi + \tilde{R})} + \frac{224 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh \xi}{5(\xi + \tilde{R})} + \frac{16672 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh \xi}{315(\xi + \tilde{R})} - \\
&- \frac{21764 \operatorname{sech}^{10} \xi \tanh \xi}{105(\xi + \tilde{R})} + \frac{64 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^2 \xi}{3} - \frac{304 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^2 \xi}{45} - \\
&- \frac{64 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^2 \xi}{5(\xi + \tilde{R})^2} - \frac{1464 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^2 \xi}{5} + \frac{1088 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^2 \xi}{21(\xi + \tilde{R})^2} + \\
&+ \frac{7604 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh^2 \xi}{45} - \frac{352 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh^2 \xi}{7(\xi + \tilde{R})^2} + \frac{33686 \operatorname{sech}^{10} \xi \tanh^2 \xi}{105} + \\
&+ \frac{1984 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^3 \xi}{45(\xi + \tilde{R})} - \frac{736 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^3 \xi}{5(\xi + \tilde{R})} - \frac{32 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^3 \xi}{35(\xi + \tilde{R})^3} - \left. \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{41984 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^3 \xi}{105 (\xi + \tilde{R})} + \frac{27472 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh^3 \xi}{35 (\xi + \tilde{R})} - \frac{992 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^4 \xi}{45} + \\
& + 112 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^4 \xi - \frac{704 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^4 \xi}{105 (\xi + \tilde{R})^2} + \frac{6632 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^4 \xi}{15} + \\
& + \frac{64 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^4 \xi}{5 (\xi + \tilde{R})^2} - \frac{29476 \operatorname{sech}^8 \xi \tanh^4 \xi}{35} - \frac{96 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^5 \xi}{5 (\xi + \tilde{R})} + \\
& + \frac{23872 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^5 \xi}{105 (\xi + \tilde{R})} - \frac{2104 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^5 \xi}{7 (\xi + \tilde{R})} + \frac{32 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^6 \xi}{5} - \\
& - \frac{41056 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^6 \xi}{315} + \frac{19112 \operatorname{sech}^6 \xi \tanh^6 \xi}{105} + \frac{256 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^7 \xi}{315 (\xi + \tilde{R})} - \\
& - \frac{128 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^7 \xi}{105 (\xi + \tilde{R})} - \frac{64 \operatorname{sech}^2 \xi \tanh^8 \xi}{315} + \frac{32 \operatorname{sech}^4 \xi \tanh^8 \xi}{105} \Big) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}) \\
= & \frac{-128\pi(1155682 + 110225\pi^2 + 1322700 \tilde{R}^2)}{1819125} + \\
& + 0.2322 \frac{\pi}{\tilde{R}^2} + 0.207215 \frac{\pi}{\tilde{R}^4} + 0.290629 \frac{\pi}{\tilde{R}^6} + \mathcal{O}(\tilde{R}^{-8}) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}).
\end{aligned} \tag{D.10}$$

Für die Korrekturen höherer Ordnung in $\tilde{\eta}$ seien hier nur die Ergebnisse angegeben:

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_1 &= 4\pi \left(\pi^2 + 12\tilde{R}^2 - \frac{\tilde{\eta}\tilde{R}}{3} (8\tilde{R}^2 + 2\pi^2) - \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \frac{20}{27} \right) - \tilde{\eta}^2 (82.6833 \tilde{R}^2 + 336.814) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \\
\mathcal{O}_2 &= -8\pi \left(6 + \pi^2 + 12\tilde{R}^2 - \frac{\tilde{\eta}\tilde{R}}{3} (72 + 4\pi^2 + 16\tilde{R}^2) + \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \frac{32}{27} \right) - \\
& - \tilde{\eta}^2 (1160.97 + 287.022 \tilde{R}^2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \\
\mathcal{O}_3 &= \frac{16\pi (90 + 11\pi^2 + 132\tilde{R}^2 - \tilde{\eta}\tilde{R} (520 + 20\pi^2 + 80\tilde{R}^2))}{15} + \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \pi \frac{512}{27} + \\
& + \tilde{\eta}^2 (2943.51 + 1199.32 \tilde{R}^2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \\
\mathcal{O}_4 &= \frac{-32\pi (1974 + 205\pi^2 + 2460\tilde{R}^2)}{525} + \tilde{\eta}\tilde{R} \frac{32\pi (44016 + 1400\pi^2 + 5600\tilde{R}^2)}{1575} + \\
& + \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \pi \frac{10240}{81} - \tilde{\eta}^2 (5462.66 + 2564.51 \tilde{R}^2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \\
\mathcal{O}_5 &= \frac{64\pi (19534 + 1785\pi^2 + 21420\tilde{R}^2 - \tilde{\eta}\tilde{R} (173400 + 4900\pi^2 + 19600\tilde{R}^2))}{11025} - \\
& - \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \pi \frac{34816}{81} + \tilde{\eta}^2 (7417.62 + 3579.95 \tilde{R}^2) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3), \\
\mathcal{O}_6 &= \frac{-128\pi (1155682 + 110225\pi^2 + 1322700\tilde{R}^2)}{1819125} + \frac{0.7295}{\tilde{R}^2} + \frac{0.6510}{\tilde{R}^4} + \\
& + \tilde{\eta}\tilde{R} \frac{512\pi (279544 + 7350\pi^2 + 29400\tilde{R}^2)}{165375} + \tilde{\eta} \left(\frac{1.7510}{\tilde{R}} + \frac{0.9293}{\tilde{R}^3} + \frac{0.9223}{\tilde{R}^5} \right) \\
& + \tilde{\eta}^3 \tilde{R}^3 \pi \frac{57344}{81} - \tilde{\eta}^2 \left(7715.43 + 3717.3 \tilde{R}^2 + \frac{0.680845}{\tilde{R}^2} + \frac{0.403333}{\tilde{R}^4} \right) + \\
& + \mathcal{O}(\tilde{R}^{-6}) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3).
\end{aligned} \tag{D.11}$$

Setzt man für \tilde{R} jetzt den Ausdruck aus Gleichung (3.138)

$$\tilde{R} = \frac{1}{\tilde{\eta}} + \frac{2 - 3\pi^2}{36}\tilde{\eta} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^3) \quad (\text{D.12})$$

ein, so findet man für die Koeffizienten:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= \frac{112\pi}{3} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(82.6833 + 4\pi \left(\frac{4}{27} - \pi^2 \right) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_2 &= -\frac{160\pi}{3} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-287.022 + 8\pi \left(\frac{442}{3} + \pi^2 \right) \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_3 &= \frac{832\pi}{15} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(1199.32 - \frac{16\pi(3698 + 99\pi^2)}{135} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_4 &= -\frac{11392\pi}{315} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-2564.51 + \frac{32\pi(399866 + 5535\pi^2)}{14175} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_5 &= \frac{3328\pi}{315} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(3579.95 - \frac{64\pi(2059174 + 16065\pi^2)}{99225} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ \mathcal{O}_6 &= -\frac{49664\pi}{24255} \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \left(-3717.3 + \frac{128\pi(63822662 + 330675\pi^2)}{5457375} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \end{aligned} \quad (\text{D.13})$$

Um die zweite Ordnung in $\tilde{\eta}$ in den Koeffizienten zu bestimmen, müßte man die dritte Ordnung von \tilde{R} und des Potentials V kennen.

Für die gesamte Spur ergibt sich der Ausdruck aus Gleichung (4.140):

$$\begin{aligned} \text{Tr}_< \left(e^{-Mt} - e^{-\hat{M}t} \right) &= \\ \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \left[\frac{1}{\tilde{\eta}^2} \left(\frac{112\pi}{3} t - \frac{160\pi}{3} t^2 + \frac{832\pi}{15} t^3 - \frac{11392\pi}{315} t^4 + \frac{3328\pi}{315} t^5 - \frac{49664\pi}{24255} t^6 + \dots \right) + \right. \\ &+ \left(-39.4801 t + 372.46 t^2 - 541.384 t^3 + 658.823 t^4 - 913.886 t^5 + 1225.92 t^6 - \dots \right) \\ &\left. + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

Anhang E

Die Koeffizienten der Seeley–Entwicklungen des Massencutoffs und der einzelnen Bänder

Die Koeffizienten der im Verfahren des Massencutoffs verwendeten Seeley–Entwicklung bekommt man durch Multiplikation der bislang verwendeten Seeley–Entwicklung Gl. (4.140) mit $e^{\mu t}$. Dabei ist μ die als Abschneideparameter eingeführte, künstliche Masse. Die aus der Spur herauszunehmenden Eigenwerte (Nullmoden, negative Mode und die niedrigsten Moden von \mathring{M}) führen auf ganzzahlige t -Potenzen mit Koeffizienten g_n . Sie werden soweit entwickelt, wie die halbzahligen t -Potenzen aufgrund der Seeley–Entwicklung aus Abschnitt 4.3.3 bekannt sind. Damit ergibt sich die modifizierte Seeley–Entwicklung:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(e^{\mu t} (e^{-Mt} - e^{-\mathring{M}t}) \right) &= e^{\mu t} \left(\frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 \mathcal{O}_n t^n - 3 - e^{t^2 \tilde{\eta}^2 + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^4)} + 4 e^{-\tilde{\omega}_0 t} \right) \\ &= \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 h_n t^n + \sum_{n=1}^5 g_n t^n =: \text{Tr}^\mu \end{aligned} \quad (\text{E.1})$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} h_1 &= \mathcal{O}_1, \\ h_2 &= \mu \mathcal{O}_1 + \mathcal{O}_2, \\ h_3 &= \frac{\mu^2 \mathcal{O}_1}{2} + \mu \mathcal{O}_2 + \mathcal{O}_3, \\ h_4 &= \frac{\mu^3 \mathcal{O}_1}{6} + \frac{\mu^2 \mathcal{O}_2}{2} + \mu \mathcal{O}_3 + \mathcal{O}_4, \\ h_5 &= \frac{\mu^4 \mathcal{O}_1}{24} + \frac{\mu^3 \mathcal{O}_2}{6} + \frac{\mu^2 \mathcal{O}_3}{2} + \mu \mathcal{O}_4 + \mathcal{O}_5, \\ h_6 &= \frac{\mu^5 \mathcal{O}_1}{120} + \frac{\mu^4 \mathcal{O}_2}{24} + \frac{\mu^3 \mathcal{O}_3}{6} + \frac{\mu^2 \mathcal{O}_4}{2} + \mu \mathcal{O}_5 + \mathcal{O}_6 \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

und

$$\begin{aligned}
g_1 &= -2\tilde{\eta}^2 - 4\tilde{\omega}_0, \\
g_2 &= -\mu(2\tilde{\eta}^2 + 4\tilde{\omega}_0) - 2\tilde{\eta}^4 + 2\tilde{\omega}_0^2, \\
g_3 &= -\mu^2(\tilde{\eta}^2 + 2\tilde{\omega}_0) - 2\mu(\tilde{\eta}^4 - \tilde{\omega}_0^2) - \frac{4\tilde{\eta}^6}{3} - \frac{2\tilde{\omega}_0^3}{3}, \\
g_4 &= -\frac{\mu^3(\tilde{\eta}^2 + 2\tilde{\omega}_0)}{3} - \mu^2(\tilde{\eta}^4 - \tilde{\omega}_0^2) - \frac{2\mu(2\tilde{\eta}^6 + \tilde{\omega}_0^3)}{3} - \frac{2\tilde{\eta}^8}{3} + \frac{\tilde{\omega}_0^4}{6}, \\
g_5 &= -\frac{\mu^4(\tilde{\eta}^2 + 2\tilde{\omega}_0)}{12} - \frac{\mu^3(\tilde{\eta}^4 - \tilde{\omega}_0^2)}{3} - \frac{\mu^2(2\tilde{\eta}^6 + \tilde{\omega}_0^3)}{3} - \frac{\mu(4\tilde{\eta}^8 - \tilde{\omega}_0^4)}{6} - \frac{4\tilde{\eta}^{10}}{15} - \frac{\tilde{\omega}_0^5}{30}.
\end{aligned} \tag{E.3}$$

Nimmt man das Band um Null aus der ursprünglichen Seeley–Entwicklung Gl. (4.140) heraus, so bekommt man nach Multiplikation mit dem inversen Massencutoffterm $e^{\mu t}$ die in Abschnitt 5.5 verwendete Seeley–Entwicklung für die Spur ohne das Band um Null. Sie hat dieselbe Gestalt wie Gleichung (E.1)

$$\text{Tr}^\mu - \text{Tr}^{\mu_0} = \frac{1}{(4\pi t)^{3/2}} \sum_{n=1}^6 h_n t^n + \sum_{n=-1}^5 g'_n t^n \tag{E.4}$$

allerdings mit anderen Koeffizienten g'_n :

$$\begin{aligned}
g'_{-1} &= -\frac{1}{\tilde{\eta}^2}, \\
g'_0 &= -\mu \frac{1}{\tilde{\eta}^2} + \frac{5}{3}, \\
g'_1 &= -\mu^2 \frac{1}{2\tilde{\eta}^2} + \mu \frac{5}{3} - 4\tilde{\omega}_0 - \frac{41}{15}\tilde{\eta}^2, \\
g'_2 &= -\mu^3 \frac{1}{6\tilde{\eta}^2} + \mu^2 \frac{5}{6} - \mu \left(4\tilde{\omega}_0 + \frac{41}{15}\tilde{\eta}^2 \right) + 2\tilde{\omega}_0^2 - \frac{676}{315}\tilde{\eta}^4, \\
g'_3 &= -\mu^4 \frac{1}{24\tilde{\eta}^2} + \mu^3 \frac{5}{18} - \mu^2 \frac{4\tilde{\omega}_0 + \frac{41}{15}\tilde{\eta}^2}{2} + \mu \left(2\tilde{\omega}_0^2 - \frac{676}{315}\tilde{\eta}^4 \right) - \frac{2\tilde{\omega}_0^3}{3} - \frac{401}{315}\tilde{\eta}^6, \\
g'_4 &= -\mu^5 \frac{1}{120\tilde{\eta}^2} + \mu^4 \frac{5}{72} - \mu^3 \frac{4\tilde{\omega}_0 + \frac{41}{15}\tilde{\eta}^2}{6} + \mu^2 \frac{2\tilde{\omega}_0^2 - \frac{676}{315}\tilde{\eta}^4}{2} - \\
&\quad - \mu \left(\frac{2\tilde{\omega}_0^3}{3} + \frac{401}{315}\tilde{\eta}^6 \right) + \frac{\tilde{\omega}_0^4}{6} - \frac{1055}{1728}\tilde{\eta}^8, \\
g'_5 &= -\mu^6 \frac{1}{720\tilde{\eta}^2} + \mu^5 \frac{1}{72} - \mu^4 \frac{4\tilde{\omega}_0 + \frac{41}{15}\tilde{\eta}^2}{24} + \mu^3 \frac{2\tilde{\omega}_0^2 - \frac{676}{315}\tilde{\eta}^4}{6} - \\
&\quad - \mu^2 \frac{2\tilde{\omega}_0^3 + \frac{401}{315}\tilde{\eta}^6}{6} + \mu \left(\frac{\tilde{\omega}_0^4}{6} - \frac{1055}{1728}\tilde{\eta}^8 \right) - \frac{\tilde{\omega}_0^5}{30} - \frac{167822}{675675}\tilde{\eta}^{10}.
\end{aligned} \tag{E.5}$$

Aufgrund der Singularitäten des Bands um Null erhält man jetzt auch eine negative t -Potenz. Die Größe $\tilde{\omega}_0 = 4 - \tilde{\eta}^4 - \tilde{\eta}^2 \frac{4}{3} + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2)$ bezeichnet die niedrigsten Eigenwerte des freien Operators (Gl. (4.204)). Die Koeffizienten der halbzahligen t -Potenzen h_n ändern sich nicht, da die Entwicklung des Bands um Null ja nur ganzzahlige t -Potenzen enthält (vgl. Gl. (4.295)).

Nimmt man zusätzlich das Band um Drei (Gl. (4.316)) auch noch heraus, so erhält man wieder dieselbe Form der Entwicklung für die Spur, diesmal aber mit den Koeffizienten g''_n :

$$\begin{aligned}
g''_{-1} &= -(\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}), \\
g''_0 &= -\mu(\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}) - (\tilde{\mathcal{P}}_0 + \mathcal{R}_0), \\
g''_1 &= -\mu^2 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}}{2} - \mu(\tilde{\mathcal{P}}_0 + \mathcal{R}_0) - 2\tilde{\eta}^2 - 4\tilde{\omega}_0 - (\tilde{\mathcal{P}}_1 + \mathcal{R}_1), \\
g''_2 &= -\mu^3 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}}{6} - \mu^2 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_0 + \mathcal{R}_0}{2} - \mu(2\tilde{\eta}^2 + 4\tilde{\omega}_0 - (\tilde{\mathcal{P}}_1 + \mathcal{R}_1)) - 2\tilde{\eta}^4 + 2\tilde{\omega}_0^2 - (\tilde{\mathcal{P}}_2 + \mathcal{R}_2), \\
g''_3 &= -\mu^4 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}}{24} - \mu^3 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_0 + \mathcal{R}_0}{6} - \mu^2 \frac{2\tilde{\eta}^2 + 4\tilde{\omega}_0 + \tilde{\mathcal{P}}_1 + \mathcal{R}_1}{2} - \mu(2\tilde{\eta}^4 - 2\tilde{\omega}_0^2 + \tilde{\mathcal{P}}_2 + \mathcal{R}_2) - \\
&\quad - \frac{4\tilde{\eta}^6}{3} - \frac{2\tilde{\omega}_0^3}{3} - (\tilde{\mathcal{P}}_3 + \mathcal{R}_3), \\
g''_4 &= -\mu^5 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}}{120} - \mu^4 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_0 + \mathcal{R}_0}{24} - \mu^3 \frac{2\tilde{\eta}^2 + 4\tilde{\omega}_0 + \tilde{\mathcal{P}}_1 + \mathcal{R}_1}{6} - \mu^2 \frac{2\tilde{\eta}^4 - 2\tilde{\omega}_0^2 + \tilde{\mathcal{P}}_2 + \mathcal{R}_2}{2} - \\
&\quad - \mu \frac{4\tilde{\eta}^6 + 2\tilde{\omega}_0^3 - 3(\tilde{\mathcal{P}}_3 + \mathcal{R}_3)}{3} - \frac{2\tilde{\eta}^8}{3} + \frac{\tilde{\omega}_0^4}{6} - (\tilde{\mathcal{P}}_4 + \mathcal{R}_4), \\
g''_5 &= -\mu^6 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_{-1} + \mathcal{R}_{-1}}{720} - \mu^5 \frac{\tilde{\mathcal{P}}_0 + \mathcal{R}_0}{120} - \mu^4 \frac{2\tilde{\eta}^2 + 4\tilde{\omega}_0 + \tilde{\mathcal{P}}_1 + \mathcal{R}_1}{24} - \mu^3 \frac{2\tilde{\eta}^4 - 2\tilde{\omega}_0^2 + \tilde{\mathcal{P}}_2 + \mathcal{R}_2}{6} - \\
&\quad - \mu^2 \frac{4\tilde{\eta}^6 + 2\tilde{\omega}_0^3 + 3(\tilde{\mathcal{P}}_3 + \mathcal{R}_3)}{6} - \mu \left(\frac{2\tilde{\eta}^8}{3} - \frac{\tilde{\omega}_0^4}{6} + (\tilde{\mathcal{P}}_4 + \mathcal{R}_4) \right) - \frac{4\tilde{\eta}^{10}}{15} - \frac{\tilde{\omega}_0^5}{30} - (\tilde{\mathcal{P}}_5 + \mathcal{R}_5).
\end{aligned} \tag{E.6}$$

Dabei sind die $\tilde{\mathcal{P}}_n$ die in Gleichung (4.293) berechneten Koeffizienten in der Entwicklung des Bands um Null:

$$\sum_{l=2}^{\infty} (2l+1) e^{-\tilde{\eta}^2 t[l(l+1)-2]} = \sum_{n=-1}^{\infty} \tilde{\mathcal{P}}_n t^n = \sum_{n=-1}^{\infty} \mathcal{P}_n \tilde{\eta}^{2n} t^n. \tag{E.7}$$

Sie lauten im einzelnen:

$$\begin{aligned}
\tilde{\mathcal{P}}_{-1} &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2}, \\
\tilde{\mathcal{P}}_0 &= -\frac{5}{3}, \\
\tilde{\mathcal{P}}_1 &= \frac{11}{15} \tilde{\eta}^2, \\
\tilde{\mathcal{P}}_2 &= \frac{46}{315} \tilde{\eta}^4, \\
\tilde{\mathcal{P}}_3 &= -\frac{19}{315} \tilde{\eta}^6, \\
\tilde{\mathcal{P}}_4 &= -\frac{194}{3456} \tilde{\eta}^8, \\
\tilde{\mathcal{P}}_5 &= -\frac{12358}{675675} \tilde{\eta}^{10}.
\end{aligned} \tag{E.8}$$

Die Koeffizienten \mathcal{R}_n in der Entwicklung des Bands um Drei berechnet man analog zu Gleichung (4.293) mit verschwindendem Parameter s durch Multiplikation mit $e^{(3/\tilde{\eta}^2)+3-\pi^2}$ und anschließender Substitution von t durch $\tilde{\eta}^2 t$:

$$e^{-3t} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{-\tilde{\eta}^2 t[l(l+1)+3-\pi^2]} = \sum_{n=-1}^{\infty} \mathcal{R}_n t^n. \quad (\text{E.9})$$

Man findet für die ersten Koeffizienten:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{-1} &= \frac{1}{\tilde{\eta}^2}, \\ \mathcal{R}_0 &= -\frac{3}{\tilde{\eta}^2} - \left(\frac{8}{3} - \pi^2\right), \\ \mathcal{R}_1 &= +\frac{9}{2\tilde{\eta}^2} + (8 - 3\pi^2) + \tilde{\eta}^2 \left(\frac{107}{30} - \frac{8\pi^2}{3} + \frac{\pi^4}{2}\right), \\ \mathcal{R}_2 &= -\frac{9}{2\tilde{\eta}^2} - \left(12 - \frac{9\pi^2}{2}\right) - \tilde{\eta}^2 \left(\frac{107}{10} - 8\pi^2 + \frac{3\pi^4}{2}\right) - \tilde{\eta}^4 \left(\frac{1004}{315} - \frac{107\pi^2}{30} + \frac{4\pi^4}{3} - \frac{\pi^6}{6}\right), \\ \mathcal{R}_3 &= +\frac{27}{8\tilde{\eta}^2} + \left(12 - \frac{9\pi^2}{2}\right) + \tilde{\eta}^2 \left(\frac{321}{20} - 12\pi^2 + \frac{9\pi^4}{4}\right) + \tilde{\eta}^4 \left(\frac{1004}{105} - \frac{107\pi^2}{10} + 4\pi^4 - \frac{\pi^6}{2}\right) + \\ &\quad + \tilde{\eta}^6 \left(\frac{5393}{2520} - \frac{1004\pi^2}{315} + \frac{107\pi^4}{60} - \frac{4\pi^6}{9} + \frac{\pi^8}{24}\right), \\ \mathcal{R}_4 &= -\frac{81}{40\tilde{\eta}^2} - \left(9 - \frac{27\pi^2}{8}\right) - \tilde{\eta}^2 \left(\frac{321}{20} - 12\pi^2 + \frac{9\pi^4}{4}\right) - \tilde{\eta}^4 \left(\frac{502}{35} - \frac{321\pi^2}{20} + 6\pi^4 - \frac{3\pi^6}{4}\right) - \\ &\quad - \tilde{\eta}^6 \left(\frac{5393}{840} - \frac{1004\pi^2}{105} + \frac{107\pi^4}{20} - \frac{4\pi^6}{3} + \frac{\pi^8}{8}\right) - \\ &\quad - \tilde{\eta}^8 \left(\frac{3989}{3465} - \frac{5393\pi^2}{2520} + \frac{502\pi^4}{315} - \frac{107\pi^6}{180} + \frac{\pi^8}{9} - \frac{\pi^{10}}{120}\right), \\ \mathcal{R}_5 &= \frac{81}{80\tilde{\eta}^2} + \left(\frac{27}{5} - \frac{81\pi^2}{40}\right) + \tilde{\eta}^2 \left(\frac{963}{80} - 9\pi^2 + \frac{27\pi^4}{16}\right) + \tilde{\eta}^4 \left(\frac{502}{35} - \frac{321\pi^2}{20} + 6\pi^4 - \frac{3\pi^6}{4}\right) + \\ &\quad + \tilde{\eta}^6 \left(\frac{5393}{560} - \frac{502\pi^2}{35} + \frac{321\pi^4}{40} - 2\pi^6 + \frac{3\pi^8}{16}\right) + \\ &\quad + \tilde{\eta}^8 \left(\frac{3989}{1155} - \frac{5393\pi^2}{840} + \frac{502\pi^4}{105} - \frac{107\pi^6}{60} + \frac{\pi^8}{3} - \frac{\pi^{10}}{40}\right) + \\ &\quad + \tilde{\eta}^{10} \left(\frac{72551}{140400} - \frac{3989\pi^2}{3465} + \frac{5393\pi^4}{5040} - \frac{502\pi^6}{945} + \frac{107\pi^8}{720} - \frac{\pi^{10}}{45} + \frac{\pi^{12}}{720}\right). \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Damit lassen sich die Koeffizienten g''_n bis zu der in der Entwicklung von I' benötigten ersten Ordnung in $\tilde{\eta}$ angeben:

$$\begin{aligned} g''_{-1} &= -\frac{2}{\tilde{\eta}^2}, \\ g''_0 &= \frac{3-2\mu}{\tilde{\eta}^2} + \left(\frac{13}{3} - \pi^2\right), \\ g''_1 &= \frac{-\frac{9}{2} + 3\mu - \mu^2}{\tilde{\eta}^2} + \left(-8 + \frac{13\mu}{3} + 3\pi^2 - \mu\pi^2 - 4\tilde{\omega}_0\right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\ g''_2 &= \frac{27 - 27\mu + 9\mu^2 - 2\mu^3}{6\tilde{\eta}^2} + \left(12 - 8\mu + \frac{13\mu^2}{6} - \frac{9\pi^2}{2} + 3\mu\pi^2 - \frac{\mu^2\pi^2}{2} - 4\mu\tilde{\omega}_0 + 2\tilde{\omega}_0^2\right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
g_3'' &= \frac{-81 + 108\mu - 54\mu^2 + 12\mu^3 - 2\mu^4}{24\tilde{\eta}^2} + \\
&+ \left(-12 + \frac{9\pi^2}{2} + \mu^3 \frac{13 - 3\pi^2}{18} + \mu^2 \frac{-8 + 3\pi - 4\dot{\omega}_0}{2} + \mu \frac{24 - 9\pi^2 + 4\dot{\omega}_0^2}{2} - \frac{2\dot{\omega}_0^3}{3} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\
g_4'' &= \frac{243 - 405\mu + 270\mu^2 - 90\mu^3 + 15\mu^4 - 2\mu^5}{120\tilde{\eta}^2} + \\
&+ \left(9 - \frac{27\pi^2}{8} + \mu^4 \frac{13 - 3\pi^2}{72} - \mu^3 \frac{8 - 3\pi^2 + 4\dot{\omega}_0}{6} + \mu^2 \frac{24 - 9\pi^2 + 4\dot{\omega}_0^2}{4} - \right. \\
&\left. - \mu \frac{72 - 27\pi^2 + 4\dot{\omega}_0^3}{6} + \frac{w^4}{6} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2), \\
g_5'' &= \frac{-729 + 1458\mu - 1215\mu^2 + 540\mu^3 - 135\mu^4 + 18\mu^5 - 2\mu^6}{720\tilde{\eta}^2} + \\
&+ \left(-\frac{27}{5} + \frac{81\pi^2}{40} + \mu^5 \frac{13 - 3\pi^2}{360} - \mu^4 \frac{8 - 3\pi^2 + 4\dot{\omega}_0}{24} + \mu^3 \frac{24 - 9\pi^2 + 4\dot{\omega}_0^2}{12} - \right. \\
&\left. - \mu^2 \frac{72 - 27\pi^2 + 4\dot{\omega}_0^3}{12} + \mu \frac{216 - 81\pi^2 + 4\dot{\omega}_0^4}{24} - \frac{\dot{\omega}_0^5}{30} \right) + \mathcal{O}(\tilde{\eta}^2). \tag{E.11}
\end{aligned}$$

Nachzutragen bleiben noch die Koeffizienten des Korrekturterms aus der Eulerschen Summenformel Gl. (4.245) in dem Band um Null:

$$\sum_{m=1}^{\infty} b_m (\tilde{\eta}^2 t)^m e^{-4\tilde{\eta}^2 t} \tag{E.12}$$

mit

$$\begin{aligned}
b_0 &= -\frac{1}{6}, \\
b_1 \tilde{\eta}^2 &= \frac{31}{15} \tilde{\eta}^2, \\
b_2 \tilde{\eta}^4 &= \frac{26}{63} \tilde{\eta}^4, \\
b_3 \tilde{\eta}^6 &= -\frac{227}{315} \tilde{\eta}^6, \\
b_4 \tilde{\eta}^8 &= -\frac{382}{693} \tilde{\eta}^8, \\
b_5 \tilde{\eta}^{10} &= \frac{82282}{675675} \tilde{\eta}^{10}, \\
b_6 \tilde{\eta}^{12} &= \frac{56852}{135135} \tilde{\eta}^{12}, \\
b_7 \tilde{\eta}^{14} &= \frac{2808649}{11486475} \tilde{\eta}^{14}, \\
b_8 \tilde{\eta}^{16} &= -\frac{149062402}{2749862115} \tilde{\eta}^{16}, \\
b_9 \tilde{\eta}^{18} &= -\frac{14224609354}{68746552875} \tilde{\eta}^{18}, \\
b_{10} \tilde{\eta}^{20} &= \frac{17445644459}{93861960192} \tilde{\eta}^{20}. \tag{E.13}
\end{aligned}$$

Literaturverzeichnis

- [1] J. Kripfganz, A. Ringwald, Phys. Blätter **49** (1993) 422
- [2] V. A. Kuzmin, V. A. Rubakov, M. E. Shaposhnikov, Phys. Lett. **155B** (1985) 36
- [3] N. S. Manton, Phys. Rev. **D28** (1983) 2019
F. R. Klinkhammer, N. S. Manton, Phys. Rev. **D30** (1984) 2212
- [4] P. Arnold, L. McLerran, Phys. Rev. **D36** (1987) 581
T. Akiba, H. Kikuchi, T. Yanagida, Phys. Rev. **D40** (1989) 588
M. E. Carrington, J. I. Kapusta, Phys. Rev. **D47** (1993) 5304
- [5] D. Yu. Grigoriev, M. E. Shaposhnikov, Int. Jour. Mod. Phys. **A5** (1990) 4677
A. T. Bochkarev, Ph. de Forcrand, Phys. Rev. **D44** (1991) 519
D. Yu. Grigoriev, M. E. Shaposhnikov, N. Turok, Phys. Lett. **B275** (1992) 395
A. Krasnitz, R. Potting, Phys. Lett. **B318** (1993) 492
- [6] M. E. Shaposhnikov, Nucl. Phys. **B287** (1987) 757
K. Enquist, J. Ignatius, K. Kajantie, K. Rummukainen, Phys. Rev. **D45** (1992) 3415
M. Dine, R. G. Leigh, P. Huet, A. Linde, D. Linde, Phys. Lett. **B283** (1992) 319
M. Gleiser, E. W. Kolb, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 1304
G. W. Anderson, L. J. Hall, Phys. Rev. **D45** (1992) 2685
W. Buchmüller, T. Helbig, D. Walliser, Int. Journ. Mod. Phys. **C3** (1992) 799
W. Buchmüller, T. Helbig, D. Walliser, Nucl. Phys. **B407** (1993) 387
W. Buchmüller, Z. Fodor, T. Helbig, D. Walliser, Ann. Phys. **234** (1994) 260
- [7] K. Kajantie, H. Kurki-Suonio, Phys. Rev. **D34** (1986) 1719
G. Fuller, G. Matheus, C. Alcock, Phys. Rev. **D37** (1987) 1380
J. Ignatius, K. Kajantie, K. Rummukainen, Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 737
- [8] V. Dixit, M. C. Ogilvie, Phys. Lett. **B269** (1991) 353
- [9] Z. Frei, A. Patkoś, Phys. Lett. **B229** (1989) 102
F. Karsch, A. Patkoś, Nucl. Phys. **B350** (1991) 563
R. Brower, S. Huang, J. Potvin, C. Rebbi, J. Ross, Phys. Rev. **D46** (1992) 4736
- [10] D. B. Fahrenheit, Phil. Trans. Roy. Soc. London **33** (1724) 78 in Latein.
Deutsche Übersetzung in *Abhandlungen über Thermometrie von Fahrenheit*,

Réaumur, Celsius, editiert von A. J. von Oettingen, Ostwald's Klassiker der exakten Wissenschaften Nr. 57, (Wilhelm Engelmann, Leipzig 1894), S. 6

- [11] R. Becker, W. Döring, *Ann. Phys.* **24** (1935) 719
- [12] J. W. Cahn, J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.* **31** (1959) 688
- [13] J. S. Langer, *Ann. Phys.* **54** (1969) 258
- [14] J. S. Langer, *Phys. Rev. Lett.* **21** (1968) 973
- [15] J. S. Langer, *Ann. Phys.* **41** (1967) 108
- [16] J. S. Langer, L. A. Turski, *Phys. Rev.* **A8** (1973) 3230
- [17] J. D. Gunton, M. San Miguel, P. S. Sahni in *Phase Transition and Critical Phenomena*, Vol. 8, Hrsg.: C. Domb, J. L. Lebowitz (Academic Press London 1983)
- [18] M. B. Voloshin, I. B. Kolzarev, L. B. Okun, *Sov. J. Nucl. Phys.* **20** (1974) 644, *Yad Fiz* **20** (1974) 1229
- [19] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 388
- [20] S. Coleman, *Phys. Rev.* **D15** (1977) 2929, Erratum: *Phys. Rev.* **D16** (1977) 1248
- [21] C. G. Callan, S. Coleman, *Phys. Rev.* **D16** (1977) 1762
- [22] S. Coleman, *The Use of Instantons* in „Aspects of Symmetry“, Cambridge, University Press, 1977
- [23] M. Alford, H. Feldmann, M. Gleiser, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 1645; *Phys. Rev.* **D47** (1993) 2168
- [24] O. T. Valls, G. F. Mazenko, *Phys. Rev.* **B42** (1990) 6614
- [25] W. C. Swope, H. C. Andersen, *Phys. Rev.* **B41** (1990) 7042
- [26] P. A. Rikvold, B. M. Gorman, Florida State University preprint FSU–SCRI–94–64
- [27] S. Arrhenius, *Z. Phys. Chem. (Leipzig)* **4** (1889) 226
- [28] A. D. Linde, *Phys. Lett.* **70B** (1977) 306
A. D. Linde, *Phys. Lett.* **100B** (1981) 37
A. D. Linde, *Nucl. Phys.* **B216** (1983) 421
- [29] J. I. Kapusta, *Finite-temperature field theory*, Cambridge University Press, 1989, Cambridge, England
- [30] L. P. Csernai, J. I. Kapusta, *Phys. Rev.* **D46** (1992) 1379
- [31] G. C. Marques, R. O. Ramos, *Phys. Rev.* **D45** (1992) 4400
M. Gleiser, G. C. Marques, R. O. Ramos, *Phys. Rev.* **D48** (1993) 1571
W. N. Cottingham, D. Kalafatis, R. Vinh Mau, *Phys. Rev.* **B48** (1993) 6788

- [32] C. Aragão de Carvalho, G. C. Marques, Phys. Lett. **B169** (1986) 398
- [33] F. Schechter, M. G. Schmidt, Z. Phys. **C65** (1995) 697
- [34] J. Baacke, V. Kiselev, Phys. Rev. **48** (1993) 5648
- [35] J. Baacke, S. Junker, Mod. Phys. Lett. **A8** (1993) 2869
 J. Baacke, S. Junker, Phys. Rev. **D49** (1994) 2055, Erratum: Phys. Rev. **D50** (1994) 4227
 J. Baacke, H. So, A. Sürig, Z. Phys. **C63** (1994) 689
- [36] A. I. Bochkarev, G. G. Tsitsishvili, Phys. Rev. **D40** (1989) 1378
 L. Carson, X. Li, L. McLerran, R. Wang, Phys. Rev. **D42** (1990) 2127
 L. Carson, Phys. Rev. **D42** (1990) 2853
 D. I. D'yakonov, M. Polyakov, P. Sieber, J. Schaldack, K. Goeke, Phys. Rev. **D49** (1994) 6864
 D. I. D'yakonov, M. Polyakov, P. Pobylista, P. Sieber, J. Schaldach, K. Goeke, Phys. Lett. **B336** (1994) 457
 M. Hellmund, J. Kripfganz, M. G. Schmidt, Phys. Rev. **D50** (1994) 7650
 J. Kripfganz, A. Laser, M. G. Schmidt, Nucl. Phys. **B433** (1995) 467
 J. Baacke, Phys. Rev. **D52** (1995) 6760
 G. D. Moore, Phys. Rev. **D53** (1996) 5906
- [37] A. I. Bochkarev, M. E. Shaposhnikov, Mod. Phys. Lett. **A2** (1987) 991
- [38] D. Yu. Grigoriev, V. A. Rubakov, M. E. Shaposhnikov, Phys. Lett. **B216** (1989) 172
 D. Yu. Grigoriev, V. A. Rubakov, M. E. Shaposhnikov, Nucl. Phys. **B326** (1989) 737
- [39] N. J. Günther, D. A. Nicole, D. J. Wallace, J. Phys. **A13** (1980) 1755
- [40] D. I. D'yakonov, V. Yu. Petrov, A. V. Yung, Phys. Lett. **B130** (1983) 385
 D. I. D'yakonov, V. Yu. Petrov, A. V. Yung, Sov. J. Nucl. Phys. **39** (1984) 150
- [41] G. Münster, Nucl. Phys. **B324** (1989) 630
- [42] R. G. Leigh, AIP Conference Proceedings **272** (1993) 1619
- [43] E. W. Kolb, M. S. Turner, *The Early Universe*, Addison–Wesley Publishing Company, 1990, New York
- [44] A. D. Linde, Phys. Lett. **B92** (1980) 119
 A. H. Guth, E. J. Weinberg, Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 1131
 R. Flores, M. Sher, Phys. Rev. **D27** (1983) 1679
- [45] Yu. N. Ovchinnikov, I. M. Sigal, Phys. Rev. **B41** (1990) 490
- [46] H. M. Duiker, P. D. Beale, Phys. Rev. **B41** (1990) 490
- [47] L. Néel, Ann. Géophys. **5** (1949) 99
- [48] H. B. Braun, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 3557

- [49] H. Kleinert, *Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik*, Kapitel 17: *Pfadintegrale und Tunnelprozesse*, 1993, BI Wissenschaftsverlag Leipzig
- [50] J. L. Gervais, B. Sakita, Phys. Rev. **D11** (1975) 2943
- [51] S. Coleman, Nucl. Phys. **B298** (1988) 178
- [52] S. Coleman, V. Glaser, A. Martin, Commun. Math. Phys. **58** (1978) 211
- [53] J. Garriga, Phys. Rev. **D49** (1994) 5497
A. Ferrera, Phys. Rev. **D52** (1995) 6717
- [54] W. Gebhardt, U. Krey, *Phasenübergänge und kritische Phänomene*, Vieweg, 1980, Braunschweig, Wiesbaden
- [55] E. W. Schmid, G. Spitz, W. Lösch, *Theoretische Physik mit dem Personal Computer*, Springer-Verlag, 1993, Berlin, Heidelberg
- [56] E. Kamke, *Differentialgleichungen, Lösungsmethoden und Lösungen*, 8. Aufl., Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Partig, K.-G., 1944, Leipzig
- [57] L. Carson, L. McLerran, Phys. Rev. **D41** (1990) 647
L. Carson, Phys. Rev. **D42** (1990) 2853
- [58] A. A. Belkov, D. Ebert, A. V. Lanyov, A. Schaale, Preprint DESY-92-153
- [59] D. Fliegner, M. G. Schmidt, C. Schubert, Z. Phys. **C64** (1994) 111
- [60] S. W. Hawking, Commun. Math. Phys. **55** (1977) 133
A. Actor, Nucl. Phys. **B265** (1986) 689
A. Actor, Fortschr. Phys. **35** (1987) 793
- [61] D. B. Ray, J. M. Singer, Adv. Math. **7** (1971) 145
D. Ebert, H. Reinhard, Nucl. Phys. **271** (1986) 188
- [62] J. Schwinger, Phys. Rev. **82** (1951) 664
- [63] S. Minakahshizundarum, A. Pleyel, Can. J. Math. **1** (1949) 320
R. T. Seeley, Proc. Symp. Pure Math. **10** (1971) 288
- [64] R. I. Nepomechie, Phys. Rev. **D31** (1985) 3291
- [65] *Mathematica: A Practical Approach*, N. Blachman, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey 07632
- [66] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, inc., 1972, New York
- [67] F. Schwabl, *Quantenmechanik*, 3. Aufl., Springer-Verlag, 1992, Berlin, Heidelberg
- [68] R. Rajaraman, Phys. Rep. **21C** (1975) 227

- [69] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Plenum Press, 1980, New York, London
- [70] H. Heuser, *Lehrbuch der Analysis I*, B. G. Teubner, 1975, Stuttgart
- [71] I. S. Gradstein, I. M. Ryshik, *Summen-, Produkt- und Integraltafeln*, Verlag Harri Deutsch, Thun, 1981, Frankfurt/M
- [72] G. Münster, private Mitteilung
- [73] E. C. Titchmarsh, *The Theory of the Riemann Zeta-function*, Sec. Ed., Clarendon Press Oxford, 1986, Oxford
- [74] E. T. Whittaker, G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, Cambridge University Press, 1952, Cambridge
- [75] G. Münster, Nucl. Phys. **B218** (1983) 1
- [76] K. Gottfried: *Quantum Mechanics*, W. A. Benjamin, 1966, New York, Amsterdam
- [77] D. Shanks, J. Math. and Physics **34** (1955) 1
- [78] G. Münster, J. Heitger, Nucl. Phys. **B424** (1994) 582
J. Heitger, Diplomarbeit, Universität Münster, 1993

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Dank sagen, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben:

Ganz herzlich danke ich Herrn Prof. Dr. G. Münster für die interessante Themenstellung und die umsichtige Betreuung in zahlreichen, anregenden Diskussionen.

Ihm und meinen Kollegen sei für die angenehme Arbeitsatmosphäre gedankt. Herr Dipl.–Phys. Peter Hoppe und Herr Dipl.–Phys. Dirk Talkenberger waren ständige Gesprächspartner in physikalischen, programmiertechnischen und sonstigen Fragen.

Zu besonderem Dank bin ich meinem Mann Steffen verpflichtet, der mir mit seiner Geduld und liebevollen Unterstützung in allen Lebenslagen geholfen hat.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meinem Vater, meinem Schwiegervater, Dr. Bernd Kind und Dipl.–Phys. Peter Hoppe für die Durchsicht des Manuskripts bedanken.

