



ANWENDUNG DER LARGE-N-NÄHERUNG:
BEISPIELE AUS DER KLASSISCHEN STATISTIK
SOWIE DER THERMISCHEN QFT

Institut für Theoretische Physik
Goethe-Universität Frankfurt am Main

Bachelorarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

vorgelegt von

Berkan Küpeli

2024

Erstprüfer: Prof. Dr. Marc Wagner

Zweitprüfer: Prof. Dr. Owe Philipsen

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	4
Vorwort	5
1. Einleitung	6
2. Physikalische Grundlagen	7
2.1. Thermodynamik	7
2.1.1. Kanonisches Ensemble	7
2.1.2. Großkanonisches Ensemble	8
2.1.3. Observablen	9
2.2. Approximationsmethoden	10
2.2.1. Störungstheorie	10
2.2.2. Large-N-Näherung	11
3. Kanonische Behandlung N Harmonischer Oszillatoren	12
3.1. Ungekoppelte Oszillatoren	13
3.2. Gekoppelte Oszillatoren	14
3.2.1. Störungstheorie	15
3.2.2. Large-N-Näherung—Sattelpunktnäherung	16
3.2.3. Berechnung der Kanonische Zustandsfunktion für die LNN	18
3.2.4. Berechnung der thermodynamischen Größen für die LNN	19
3.2.5. Berechnung der Kanonische Zustandsfunktion mit ST	19
3.2.6. Berechnung der thermodynamischen Größen mit ST	20
3.2.7. Auswertung	20
4. GN-Modell	22
4.1. GN-Modell 1+1 Dimensionen	22
4.2. Die Wirkung des GN-Modells im Vakuum	22
4.2.1. Übergang zur Euklidischen Beschreibung	23
4.2.2. Bosonisierung - Hubbard-Stratonovich-Transformation	23
4.3. Berechnung der Zustandssumme und effektiver Wirkung in der Large-N-Näherung	24
4.3.1. Berechnung der funktionalen Determinante	24
4.3.2. Lösen der Determinante mittels Matsubara Summation	26
4.3.3. Minimierung der effektiven Wirkung und Renormierung	27
4.4. Auswertung und Thermodynamik des GN-Modells	30
4.4.1. Phasenübergänge und das Effektive Potential	30
4.4.2. Thermodynamik	34
5. Schlusswort	36
Literaturverzeichnis	38
A. Formelsammlung und Nebenrechnung	40
A.1. Gamma Matrizen	40
A.2. Gauß Integral	40
A.3. Wick-Rotation	40
A.4. Volumenintegral in d Dimensionen	40
A.5. Gamma-Funktion	41

A.6. Zwischenergebnisse aus der LNN in Kapitel 3	41
A.7. Fourier-Transformation der fermionischen Felder	42
A.8. Nebenrechnungen: GN Modell	42
B. Beweis der Hubbard-Stratonovich-Identität	43
C. Pfadintegration über Grassmanwertige Zahlen	44

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird ein Einblick in Konzepte der statistischen Physik, eine spezifische Approximationsmethode, die Large-N-Näherung (LNN), sowie deren Anwendung auf dem Gebiet der Quantenfeldtheorie (QFT), gegeben. Ausgehend von der Ensembletheorie der statistischen Physik werden zunächst zentrale Objekte wie die Zustandssumme und thermodynamische Observablen für ein System aus N gekoppelten harmonischen Oszillatoren behandelt. Die hierbei auftretenden Herausforderungen motivieren den Einsatz von Näherungsmethoden wie der Störungstheorie (ST) und der LNN, welche häufig Anwendung in der QFT finden. Basierend auf diesen Diskussionen wird im zweiten Teil der Arbeit das Konzept der LNN auf eine einfache, nicht-triviale QFT übertragen. Mithilfe des Gross-Neveu (GN) Modells, einer fermionischen QFT mit Wechselwirkung, wird die Large-N-Methode von der klassischen Statistik auf eine QFT im thermischen Gleichgewicht angewendet.

Vorwort

Diese Arbeit wurde von mir, einem Studenten der Biophysik verfasst. Unser Studienplan deckt nicht alle theoretischen Physikvorlesungen ab, die für dieses Thema relevant wären. Für mich lag die Motivation dieser Arbeit darin, zwischen einem mir experimentell und theoretisch teilweise vertrauten Feld, der Thermodynamik und statistischen Physik, und einem mir unbekanntem Feld, der QFT und Teilchenphysik, eine Verbindung herzustellen. Ziel ist es, anderen Studierenden, insbesondere solchen mit einem ähnlichen Hintergrund, einen leichteren Zugang zu diesen Themen zu bieten.

1. Einleitung

In dieser Arbeit werden zunächst Grundlagen der klassischen statistischen Physik behandelt, um ein solides Verständnis für die späteren Anwendungen zu schaffen. Zu Beginn steht die Analyse eines Systems aus N gekoppelten harmonischen Oszillatoren, die im kanonischen Ensemble untersucht werden. Wir berechnen zunächst die Zustandssumme des Oszillatorsystems, die als Grundlage dient, um wichtige thermodynamische Größen wie Druck, Entropie und freie Energie abzuleiten. Die thermodynamischen Rechnungen werden zunächst für den freien, ungekoppelten Fall durchgeführt und dann analog auf den gekoppelten Fall übertragen. Aufgrund der steigenden Komplexität dieser Berechnungen durch die Kopplungsterme werden zwei Näherungsmethoden eingeführt. Die erste ist ein klassischer, störungstheoretischer Ansatz, der auf kleinen Kopplungen basiert. Die zweite Methode ist die LNN, eine Technik, die besonders in der statistischen Physik und QFT verwendet wird, um komplexe Systeme mit vielen Freiheitsgraden zu analysieren. Diese wird detailliert hergeleitet, angewendet und in ihrer Genauigkeit sowie ihren physikalischen Konsequenzen diskutiert. Ein zentrales Ziel dieser Arbeit ist es, die LNN auf ein System in der QFT anzuwenden. Dazu untersuchen wir das $(1+1)$ -dimensionale GN-Modell, eine fermionische QFT, die für ihre Eigenschaft bekannt ist, unter bestimmten Bedingungen chirale Symmetrie zu brechen. Das GN-Modell bietet eine theoretische Plattform zur Untersuchung von Symmetriebrechung und Phasenübergängen. Um dieses Modell zu analysieren, nutzen wir das Hubbard-Stratonovich-Verfahren, ein mathematisches Hilfsmittel, das es ermöglicht, den Vier-Fermionen-Kopplungsterm des GN-Modells in einen bosonischen Ausdruck umzuformen. Diese Transformation erlaubt es, die fermionischen Terme zu eliminieren und die Theorie in Bezug auf ein bosonisches Feld neu zu formulieren. Dadurch wird die Analyse des Systems erheblich vereinfacht, und wir erhalten eine Beschreibung, die den Vergleich zur statistischen Physik erleichtert. Im Rahmen dieser bosonisierten Theorie können wir dann die Large-N-Methode anwenden, um das effektive Potential des Systems zu berechnen. Die Berechnung des effektiven Potentials ermöglicht uns schließlich, die thermodynamischen Eigenschaften des GN-Modells zu untersuchen. Mithilfe der Minimierung des effektiven Potentials bestimmen wir das Verhalten des chiralen Kondensats in Abhängigkeit von Temperatur und chemischem Potential, was uns erlaubt, Phasenübergänge und das zugehörige Phasendiagramm für homogene Konfigurationen des Kondensats zu erstellen. Wir berechnen das großkanonische Potential, das uns Einblicke in die thermodynamischen Größen wie z.B. der Entropiedichte des Systems gibt. An dieser Stelle sollte noch erwähnt sein, dass diese Arbeit keine signifikanten neuen wissenschaftlichen Befunde präsentiert. Stattdessen verfolgt sie einen pädagogischen Ansatz. Sie dient als verständliche Ergänzung zur bestehenden Literatur und ermöglicht einen vertieften Zugang zu den Konzepten der statistischen Physik und der QFT, insbesondere im Hinblick auf Näherungsmethoden wie die Large-N-Methode und ihre Anwendungen.

2. Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen explizit die in dieser Arbeit verwendeten physikalischen Grundkonzepte aufgeführt werden. Die statistische Mechanik ist eine der zentralen Säulen der theoretischen Physik, da sie eine Brücke zwischen der mikroskopischen Eigenschaften der Teilchenbewegungen und den makroskopischen physikalischen Eigenschaften von Materie schlägt. Die Ensembletheorie bildet dabei einen grundlegenden Ansatz, um Systeme mit vielen Freiheitsgraden zu beschreiben, insbesondere wenn vollständige Kenntnis über die genauen Mikrozustände nicht möglich ist. Stattdessen erlaubt sie eine statistische Beschreibung solcher Systeme. Die fundamentale Idee der Ensembletheorie geht zurück auf J. Willard Gibbs, der 1902 den Begriff des Ensembles einführte [1], um große Mengen an möglichen Mikrozuständen eines Systems zu behandeln. Ein Ensemble stellt dabei eine hypothetische Sammlung von Systemen dar, die sich alle in unterschiedlichen Mikrozuständen befinden, aber makroskopisch durch dieselben Parameter wie Energie, Volumen oder Teilchenzahl beschrieben werden. Für weitere Details sei auf die Referenz [2] verwiesen, aus welcher ich die Grundlagen dieses Kapitels entnommen habe.

2.1. Thermodynamik

In der statistischen Mechanik dienen thermodynamische Ensembles als fundamentale Konzepte zur Beschreibung der makroskopischen Eigenschaften eines Systems aus der mikroskopischen Perspektive. Die drei wohl wichtigsten Typen sind das mikrokanonische, das kanonische und das großkanonische Ensemble. Diese Ensembles unterscheiden sich durch die Kontrollparameter und die Randbedingungen des Systems. Jedes Ensemble ist außerdem durch ein bestimmtes thermodynamisches Potential beschrieben, dessen Ableitungen nach den jeweiligen Variablen die thermodynamischen Größen liefern.

2.1.1. Kanonisches Ensemble

Das kanonische Ensemble kann zur Beschreibung von Systemen mit konstanter Temperatur T , Volumen V und Teilchenzahl N verwendet werden. Die Freie Energie $F(T, V, N)$ ist das thermodynamische Potential dieses Ensembles. Aus ihrem totalen Differential,

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN, \quad (1)$$

lassen sich beispielsweise folgende thermodynamischen Größen ableiten. Für die Entropie gilt,

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V,N} \quad (2)$$

und für die Entropiedichte,

$$s = \frac{S}{V}. \quad (3)$$

Für den Druck,

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N} \quad (4)$$

und für das chemische Potential gilt,

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T,V}. \quad (5)$$

Die Zustandswahrscheinlichkeit eines Mikrozustandes mit Energie E_i ist durch die Boltzmann-Verteilung gegeben,

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (6)$$

wobei $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B der Boltzmann-Faktor und Z die kanonische Zustandssumme ist,

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (7)$$

Beim Übergang von der diskreten zur kontinuierlichen Formulierung geht Gleichung (6) über in die kanonische Wahrscheinlichkeitsdichte,

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \quad \longrightarrow \quad \rho_{\text{kan}}(q_\nu, p_\nu) = \frac{e^{-\beta H(q_\nu, p_\nu)}}{\int dq dp e^{-\beta H(q_\nu, p_\nu)}}. \quad (8)$$

Die freie Energie F ist weiterhin über die Identität

$$F = -k_B T \ln Z \quad (9)$$

mit der kanonischen Zustandssumme verbunden. Mit der Information über die Zustandssumme lassen sich also die für die Thermodynamik interessanten Größen aus den mikroskopischen Wechselwirkungen und Dynamiken herleiten.

2.1.2. Großkanonisches Ensemble

Das großkanonische Ensemble beschreibt ein System bei konstanter Temperatur T , Volumen V und chemischem Potential μ . In der QFT sind Prozesse, bei denen Teilchen erzeugt oder vernichtet werden, zentral. Das großkanonische Ensemble erlaubt es, Systeme mit solchen Prozesse zu modellieren, da die Teilchenzahl nicht fest ist und fluktuieren kann. Das thermodynamische Potential ist hier das Großkanonische Potential $\Omega(T, V, \mu)$. Das totale Differential lautet,

$$d\Omega = -SdT - pdV - Nd\mu. \quad (10)$$

Daraus lassen sich beispielsweise durch entsprechende partieller Ableitung folgende thermodynamischen Größen herleiten: Für die Entropie gilt,

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \mu}, \quad (11)$$

für den Druck,

$$p = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \mu}, \quad (12)$$

und für die Teilchenzahl,

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V}. \quad (13)$$

Die Wahrscheinlichkeit eines mikroskopischen Zustandes mit Energie E_i und Teilchenzahl N_i ist:

$$P_i = \frac{e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}}{\mathcal{Z}}, \quad (14)$$

wobei \mathcal{Z} die Großkanonische Zustandssumme ist:

$$\mathcal{Z} = \sum_i e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}. \quad (15)$$

Das großkanonische Potential Ω ist über die Identität,

$$\Omega = -k_B T \ln \mathcal{Z}, \quad (16)$$

mit der Großkanonischen Zustandssumme verknüpft. Des Weiteren gilt die Gibbs-Duhem-Relation:

$$\Omega = -pV, \quad (17)$$

welche eine direkte Verbindung zwischen Ω und dem Druck herstellt. Auch hier lassen sich also mit der Kenntnis der Zustandssumme für die Thermodynamik interessanten Größen herleiten.

2.1.3. Observablen

Die Verteilungsfunktion lässt sich nutzen, um Observablen zu berechnen. Für eine beliebige Observable $f(q)$ gilt (wobei wir den Gibbs Faktor und Faktoren ignorieren):

$$\langle f(\vec{q}, \vec{p}) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i f(\vec{q}, \vec{p}) e^{-\beta H(\vec{p}, \vec{q})}, \quad (18)$$

wobei für die Berechnung eines Erwartungswertes irrelevante Vorfaktoren vernachlässigt wurden, \mathcal{Z} für die Zustandssumme des entsprechenden Ensembles ist und $H(\vec{p}, \vec{q})$ dem Hamiltonian des betrachteten Systems entspricht (hier wurde \vec{p} und \vec{q} Abhängigkeit explizit angegeben, allgemein kann der Hamiltonian natürlich von weiteren externen Parametern abhängen, über die jedoch nicht summiert bzw. integriert wird).

Beispiel: Freie Oszillatoren Um ein Gefühl für diesen Ausdruck zu entwickeln, bietet es sich an, ein kanonisches System von N harmonischen Oszillatoren zu betrachten. Der dazugehörige Hamiltonian lautet

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{q}^2, \quad (19)$$

wobei

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_N), \quad \vec{p} = (p_1, \dots, p_N), \quad (20)$$

die Koordinaten und Impulse sind. Im Folgenden betrachten wir Erwartungswerte, die ausschließlich von \vec{q} abhängen,

$$\langle f(\vec{q}) \rangle = \frac{\int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i f(\vec{q}) \exp\left(-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{q}^2\right)\right)}{\int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i \exp\left(-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{q}^2\right)\right)}. \quad (21)$$

Die Integration über \vec{p} kann isoliert ausgeführt werden, wenn die betrachtete Observable f keine \vec{p} -Abhängigkeit aufweist. Dies führt zu einem Vorfaktor R , welcher sich im Zähler und Nenner aufhebt (Gleiches gilt für Normierungsfaktoren und den Gibbs-Faktor).

$$\langle f(\vec{q}) \rangle = \frac{\mathcal{R} \int \prod_{i=1}^N dq_i f(\vec{q}) \exp\left(-\beta \left(\frac{1}{2}m\omega^2 \vec{q}^2\right)\right)}{\mathcal{R} \int \prod_{i=1}^N dq_i \exp\left(-\beta \left(\frac{1}{2}m\omega^2 \vec{q}^2\right)\right)}.$$

Je nach gesuchter Größe berechnet man also Ausdrücke dieser Form. Für einfache Funktionen f und simple Hamiltonians ist das gut berechenbar. Bei komplizierteren Funktionen und Hamiltonians wird dieser Ausdruck aber nicht mehr analytisch lösbar.

Beispiel: Gekoppelte Oszillatoren Ein solches Beispiel, wäre ein Hamiltonian mit Wechselwirkungstermen

$$H(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{q}^2 + \lambda(\vec{q}^2)^2, \quad (22)$$

wobei λ eine Kopplungskonstante repräsentiert. Der Kopplungsterm führt Terme proportional zu q^4 ein und koppelt des Weiteren die Auslenkungen der einzelnen Harmonischen Oszillatoren paarweise, siehe Kapitel 3 für eine detailliertere Beschreibung. Der Ausdruck zur Berechnung der Observablen nimmt dann die folgende Form an,

$$\langle f(\vec{q}) \rangle = \frac{\int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i f(\vec{q}) \exp\left(-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \vec{q}^2 + \lambda(\vec{q}^2)^2\right)\right)}{\int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i \exp\left(-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \vec{q}^2 + \lambda(\vec{q}^2)^2\right)\right)}. \quad (23)$$

Die schwierige bzw. teilweise unmögliche analytische Berechnung dieses Objekts motiviert das Heranziehen von Näherungsmethoden, weshalb wir später nochmal zu solch einem Ausdruck zurückkommen werden. Alternativ wird auf numerische Verfahren zurückgegriffen, siehe z.B. Lattice Monte-Carlo Simulationen [3], [4], was jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit ist.

Zusammenfassung Die verschiedenen Ensembles bieten unterschiedliche Ansätze zur Beschreibung thermodynamischer Systeme. Jedes Ensemble ist durch spezifische Randbedingungen und Variablen charakterisiert, und die Wahl des Ensembles hängt von der Natur des zu beschreibenden Systems ab. Durch das Aufstellen und Berechnen der jeweiligen Zustandssummen und Verteilungen lassen sich wichtige thermodynamische Größen ableiten.

2.2. Approximationsmethoden

Motivation Es ist nicht unüblich, bei der Behandlung physikalischer Problemstellungen auf Ausdrücke zu stoßen, welche an die Grenzen des analytisch Lösbaren kommen. Oftmals kann die geschickte Wahl bei der Anwendung von Approximationsverfahren in solchen Fällen weiterhelfen. In diesem Abschnitt sollen zwei dieser Näherungsverfahren vorgestellt werden, nämlich die klassische Störungstheorie und die Large-N-Näherung.

2.2.1. Störungstheorie

Die Störungstheorie ist eine grundlegende Methode in der theoretischen Physik, die dazu dient, komplizierte physikalische Probleme durch schrittweise Annäherung zu lösen [5]. Sie wird besonders dann eingesetzt, wenn ein physikalisches System in einem gewissen Grenzfall exakt lösbar ist, aber durch eine zusätzliche kleine Wechselwirkung (Störung)

komplizierter wird. Der grundlegende Gedanke hinter der Störungstheorie ist, dass man das gestörte System als eine Erweiterung des ungestörten Systems behandelt, indem man die Störung in Form einer Reihenentwicklung in einer kleinen Parametergröße, der sogenannten Störungsgröße, ausdrückt. Dabei ist die Störgröße, z.B. eine Kopplungskonstante, klein gegenüber anderen Skalen des Systems, die aus dem exakt lösbaren Teil bekannt sind. In einem typischen Szenario beginnt man mit einer exakt lösbaren Gleichung für das ungestörte System. Dann fügt man eine kleine Störgröße λ hinzu und betrachtet, wie diese Störung das System beeinflusst. Die zugehörige Größe, wie beispielsweise Energie, Wellenfunktion oder eine Observable, wird in einer Potenzreihe in λ entwickelt. Die Lösung für das gestörte System ergibt sich dann schrittweise als Summe der Terme, die von der Störungsgröße abhängen. In vielen praktischen Fällen betrachtet man nur die ersten Terme der Reihe, da höhere Terme in λ oft vernachlässigbar klein sind.

2.2.2. Large-N-Näherung

Die LNN ist eine wichtige Methode, die insbesondere dann zum Einsatz kommt, wenn viele Freiheitsgraden N zu behandeln sind. Ihre Stärke liegt in der systematischen Berechnung von Korrekturen über eine $\frac{1}{N}$ -Reihenentwicklung. Sie ist eine gute Ergänzung zur klassischen Störungstheorie, die auf kleinen (!) Störgrößen basiert. Zusätzlich lässt sich die LNN z.B. auf Systeme anwenden, die zwar stark wechselwirkend sind, aber durch ihre große Anzahl an Teilchen sich sogenannten Mean-Field-Effekte ergeben. Explizit in dieser Arbeit angewendet, sorgt die LNN dafür, dass integrale Ausdrücke der Form,

$$\mathcal{I}^{(N)}[f, g] \equiv \int_0^\infty dy g(y) e^{-Nf(y)} \quad (24)$$

durch eine $\frac{1}{N}$ -Reihenentwicklung der Form

$$\mathcal{I}^{(N)}[f, g] \simeq e^{-Nf^{(0)}} \sqrt{\frac{2\pi}{Nf^{(2)}}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{N^i} C_i[f, g] \quad (25)$$

ausgedrückt werden können [6], wobei es sich bei $C_i[f, g]$ um N unabhängige Koeffizienten handelt. Die ersten beiden Koeffizienten lauten beispielsweise

$$C_0[f, g] = g^{(0)}, \quad (26)$$

$$C_1[f, g] = \frac{g^{(2)}}{2f^{(2)}} - \frac{g^{(1)}f^{(3)}}{2(f^{(2)})^2} + \frac{5g^{(0)}(f^{(3)})^2}{24(f^{(2)})^3} - \frac{g^{(0)}f^{(4)}}{8(f^{(2)})^2}, \quad (27)$$

wobei hier sich das Superskript (n) bei f und g auf die n -te Ableitung dieser Funktionen ausgewertet bei dem Minimum y_0 der Funktion $f(y)$ bezieht. Höhere Ordnungsbeiträge ab $\mathcal{O}(\frac{1}{N})$ werden hier nicht behandelt. Die Kernidee dieser Methode ist, dass der Integrand von Gleichung (24) dort ein Maximum haben wird, wo $f(y)$ ein globales Minimum y_0 hat. Von der Exponentialfunktion erwartet man, dass sie für $N \gg 1$ verschwindend klein wird. Der kleinste Wert, den $f(y)$ annehmen kann, sorgt für die kleinstmögliche Größe im Exponenten. Je kleiner der Beitrag im Exponenten, desto größer der Beitrag der Exponentialfunktion im Integranden. Diese Überlegung wird als Grundlage genommen, um eine mehrschrittige Entwicklung der Funktionen f und g um das Minimum y_0 durchzuführen und lokal durch eine Gaußkurve zu nähern. Die Details lassen sich in Ref.

[6] nachvollziehen.

3. Kanonische Behandlung N Harmonischer Oszillatoren

Motivation: Wir beginnen bei einem Problem aus der klassischen statistischen Physik. Die Diskussion dieses Systems wird die Grundlage dieser Arbeit legen. Hier beginnen wir mit wohl bekannten thermodynamischen Rechnungen von einem System aus N ungekoppelten harmonischen Oszillatoren und gehen über zu einem gekoppelten System. Dieser Abschnitt behandelt die Verteilungsfunktion für klassische gekoppelte Harmonische Oszillatoren.

Der Hamiltonian für einen Harmonischen Oszillator ist gegeben durch,

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2. \quad (28)$$

Für N ungekoppelte Oszillatoren lautet der Hamiltonian,

$$H(q_1, p_1, \dots, q_N, p_N) = \sum_{i=1}^N H(q_i, p_i) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \frac{k}{2}q_i^2. \quad (29)$$

Für große Oszillationen führen wir Korrekturterme höherer Ordnung bei jedem Oszillator ein, wobei weiterhin keine Wechselwirkung stattfindet,

$$H_\lambda(q_1, p_1, \dots, q_N, p_N) = \sum_{i=1}^N \left(H(q_i, p_i) + \frac{\lambda}{4!}q_i^4 \right). \quad (30)$$

Führen wir nun zusätzlich für alle Oszillatoren weitere paarweise Wechselwirkungsterme der folgenden Art ein,

$$\frac{\lambda}{4!} \sum_{i \neq j}^N (q_i)^2 (q_j)^2. \quad (31)$$

Wir koppeln also die Oszillatoren untereinander und erhalten damit den folgenden Hamiltonian,

$$H_\lambda(\vec{q}, \vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\vec{q}^2 + \frac{\lambda}{4!}(\vec{q}^2)^2, \quad (32)$$

wobei,

$$\vec{q} = (q_1, \dots, q_N), \quad \vec{p} = (p_1, \dots, p_N), \quad (33)$$

und die dazugehörige Verteilungsfunktion lautet,

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i e^{-\beta \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{k}{2}\vec{q}^2 + \frac{\lambda}{4!}(\vec{q}^2)^2 \right)}. \quad (34)$$

Dies entspricht tatsächlich einer Theorie mit $O(N)$ -Symmetrie in \vec{q} . Diese Symmetrie kann im Folgenden dazu verwendet werden, um Rechnungen zu vereinfachen.

3.1. Ungekoppelte Oszillatoren

Bevor wir die komplizierte Rechnung des gekoppelten Falls betrachten, demonstrieren wir zunächst typische Rechnungen für das ungekoppelte Oszillatorproblem (ohne q_i^4 -Terme). Es werden exemplarisch aus der Zustandssumme einige thermodynamische Größen hergeleitet. Die explizite Lösung der Zustandssumme für N unterscheidbare harmonische Oszillatoren liefert uns folgendes Ergebnis:

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dq_i dp_i e^{-\beta \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{k}{2} q_i^2 \right)} = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right)^N, \quad (35)$$

wobei hier $k = m\omega^2$ gewählt und wieder der Faktor $(\frac{1}{\hbar})^N$ für das korrekte Integralmaß berücksichtigt wurde. Daraus resultiert die Freie Energie aus (9),

$$F(T, V, N) = -Nk_B T \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right). \quad (36)$$

Weiterhin erhalten wir für den Druck aus (4),

$$p = 0, \quad (37)$$

für das chemische Potenzial aus (5),

$$\mu = -k_B T \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right), \quad (38)$$

und für die Entropiedichte aus Gleichung (3),

$$s = \frac{Nk_B}{V} \left(1 + \ln \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega} \right) \right). \quad (39)$$

Außerdem lassen sich mit Gleichung (18) statistische Größen berechnen. Zum Beispiel die mittlere Auslenkung eines einzelnen Oszillators,

$$\langle q_i \rangle = \frac{\int \prod_{j=1}^N dq_j dp_j q_i \exp \left(-\beta \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2} q_j^2 \right) \right)}{\int \prod_{j=1}^N dq_j dp_j \exp \left(-\beta \left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2} q_j^2 \right) \right)}, \quad (40)$$

was sich nach der Faktorisierung und Kürzung identischer Terme im Bruch (siehe Anhang A.2) auf den Ausdruck,

$$\langle q_i \rangle \propto \int_{-\infty}^{\infty} dq_i q_i e^{-\beta \frac{k}{2} (q_i)^2} = 0, \quad (41)$$

reduziert. Dass dieses Integral den Wert 0 annimmt, lässt sich mit einem Symmetrieargument begründen. Hier wird eine antisymmetrische Funktion über einen symmetrischen Integrationsbereich ausgewertet, wodurch sich das Ergebnis auf 0 bilanziert. Dieses Ergebnis lässt sich so deuten, dass sich die Koordinate eines beliebigen harmonischen Oszillators im Mittel in Ruhelage wiederfindet. Das Ergebnis ist also physikalisch sinnvoll. Mit diesem Ergebnis bietet es sich noch an, eine weitere Größe zu betrachten, um daraus die Standardabweichung abzuleiten.

$$\langle q_i^2 \rangle = \frac{\int \prod_{j=1}^N dq_j dp_j q_i^2 \exp\left(-\beta\left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2}\bar{q}^2\right)\right)}{\int \prod_{j=1}^N dq_j dp_j \exp\left(-\beta\left(\frac{p_j^2}{2m} + \frac{k}{2}\bar{q}^2\right)\right)}, \quad (42)$$

Die Vorgehensweise ist analog wie zuvor. Wir faktorisieren die p -abhängigen und q_j -unabhängigen Terme heraus, für die $q_i \neq q_j$ gilt und kürzen diese im Bruch. Übrig bleibt dann noch

$$\langle q_i^2 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dq_i q_i^2 \exp\left(-\beta\frac{k}{2}q_i^2\right)}{\int_{-\infty}^{\infty} dq_i \exp\left(-\beta\frac{k}{2}q_i^2\right)}. \quad (43)$$

Beim Nenner handelt es sich um ein typisches Gaußintegral (Gleichung (140)) und liefert insgesamt den Faktor $C = \sqrt{\frac{\beta k}{2\pi}}$. Den Zähler werten wir mit partieller Integration aus und erhalten schließlich das finale Ergebnis,

$$\langle q_i^2 \rangle = \frac{1}{\beta k}. \quad (44)$$

Wodurch sich für die Standardabweichung für q_i mit (41) und (44) folgendes ergibt,

$$\sigma^2(q_i) = \langle q_i^2 \rangle - \langle q_i \rangle^2 = \frac{1}{\beta k} = \frac{k_B T}{k}. \quad (45)$$

Unser Streumaß der einzelnen Oszillatoren ist also proportional zur Temperatur und invers proportional zur Federkonstanten k . Das bedeutet für unser System insgesamt, dass der Erwartungswert einer Auslenkung q_i eines Harmonischen Oszillators im Ursprung zu erwarten ist, mit höheren Temperaturen die Streuung, also die Auslenkungen aber größer ausfallen, was sinnvoll ist. Es steckt dann mehr Energie in Form von ungeordneter Bewegung im System.

3.2. Gekoppelte Oszillatoren

Im Folgenden widmen wir uns der Berechnung der thermodynamisch bzw. statistisch relevanten Größen unseres gekoppelten Oszillatorsystems. Der Schwerpunkt dieser Rechnung wird die Bewältigung der Probleme beim Rechnen mit dem Kopplungsterm sein.

Erwartungswert Wir betrachten hier wieder eine typische Rechnung eines Erwartungswerts nach Gleichung (18), wobei hier $f(\vec{q}) = \vec{q}^2$ angenommen wird, was wieder mit der Varianz des einzelnen Oszillators über die Identität

$$\frac{1}{N} \langle \vec{q}^2 \rangle = \langle q_i^2 \rangle, \quad (46)$$

zusammenhängt. Wir beginnen die Betrachtung nach der Eliminierung der Impulsterme,

$$\langle \vec{q}^2 \rangle = \frac{\int \prod_{i=1}^N dq_i \vec{q}^2 \exp\left(-\beta\left(\frac{k}{2}\vec{q}^2 + \frac{\lambda}{4!}(\vec{q}^2)^2\right)\right)}{\int \prod_{i=1}^N dq_i \exp\left(-\beta\left(\frac{k}{2}\vec{q}^2 + \frac{\lambda}{4!}(\vec{q}^2)^2\right)\right)}. \quad (47)$$

Hier wird klar, dass unser übliches Vorgehen nicht mehr angewendet werden kann, da der Kopplungsterm eine Faktorisierung und die damit verbundene Ausführung der Gaußintegrale verhindert. Wir werden uns hier an einem Lösungsverfahren bedienen, wie es in

Ref. [6] verwendet wird. Dafür bringen wir unseren Ausdruck in die Form, mit der wir besagte Rechenschritte durchführen können. Hierfür substituieren wir im ersten Schritt,

$$\frac{\vec{q}^2}{2} = \rho, \quad (48)$$

unter Verwendung der $O(N)$ Symmetrie des Systems, wodurch wir folgenden Ausdruck erhalten,

$$\langle \vec{q}^2 \rangle = \frac{\int \prod_{i=1}^N dq_i 2\rho \exp(-\beta(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2))}{\int \prod_{i=1}^N dq_i \exp(-\beta(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2))}. \quad (49)$$

Anschließend ändern wir das Integrationsmaß, indem wir Kugelkoordinaten wählen. Dafür verwenden wir Anhang A.4. Die dadurch entstehenden Vorfaktoren kürzen sich wieder heraus, wodurch folgender Ausdruck übrig bleibt,

$$\langle \vec{q}^2 \rangle = \frac{2 \int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} \exp(-\beta(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2))}{\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} \exp(-\beta(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2))}. \quad (50)$$

3.2.1. Störungstheorie

An dieser Stelle richten wir unseren Blick auf den Exponentialausdruck im Integranden von Gleichung (50),

$$e^{-\beta(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2)} = e^{-\beta k\rho} e^{-\frac{\beta\lambda}{6}\rho^2}. \quad (51)$$

Hier wenden wir eine Reihenentwicklung für $\lambda \ll 1$ bis zu $\mathcal{O}(\lambda^2)$ an und erhalten,

$$e^{-\frac{\beta\lambda}{6}\rho^2} \approx 1 - \frac{\beta\lambda}{6}\rho^2 + \mathcal{O}(\lambda^2). \quad (52)$$

Zurück eingesetzt in Gleichung (50) erhalten wir,

$$\begin{aligned} \langle \vec{q}^2 \rangle &= \frac{2 \int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}} e^{-\beta k\rho} \left[1 - \frac{\beta\lambda}{6}\rho^2 + \mathcal{O}(\lambda^2) \right]}{\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} e^{-\beta k\rho} \left[1 - \frac{\beta\lambda}{6}\rho^2 + \mathcal{O}(\lambda^2) \right]} \\ &= \frac{2 \left[\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}} e^{-\beta k\rho} - \frac{\beta\lambda}{6} \int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}+2} e^{-\beta k\rho} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right]}{\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} e^{-\beta k\rho} - \frac{\beta\lambda}{6} \int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}+1} e^{-\beta k\rho} + \mathcal{O}(\lambda^2)}. \end{aligned} \quad (53)$$

An dieser Stelle führen wir die Substitutionen $\beta k\rho = \rho'$ mit $d\rho = \frac{d\rho'}{\beta k}$ durch, um mit den Identitäten aus Anhang A.5 auf den folgenden Ausdruck zu kommen,

$$\begin{aligned}
\langle \bar{q}^{-2} \rangle &= \frac{2 \left[(\beta k)^{-\frac{N}{2}} \Gamma\left(\frac{N}{2} + 1\right) - \frac{\beta \lambda}{6} (\beta k)^{-\left(\frac{N}{2} + 2\right)} \Gamma\left(\frac{N}{2} + 3\right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right]}{(\beta k)^{-\left(\frac{N}{2} - 1\right)} \Gamma\left(\frac{N}{2}\right) - \frac{\beta \lambda}{6} (\beta k)^{-\left(\frac{N}{2} + 1\right)} \Gamma\left(\frac{N}{2} + 2\right) + \mathcal{O}(\lambda^2)} \\
&= \frac{\frac{N}{\beta k} \left[1 - \frac{\lambda \beta}{6} \frac{1}{(\beta k)^2} \left(\frac{N}{2} + 2\right) \left(\frac{N}{2} + 1\right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right]}{1 - \frac{\lambda \beta}{6} \frac{1}{(\beta k)^2} \left(\frac{N}{2} + 1\right) \frac{N}{2} + \mathcal{O}(\lambda^2)}. \tag{54}
\end{aligned}$$

Hier sind einige Zwischenschritte vorgenommen worden, welche zunächst nicht ganz offensichtlich sein könnten. Aus diesem Grund kommentiere ich hier kurz die Vorgehensweise. Zuerst nutzen wir die Identität der Gamma-Funktion, um die Integrale zu ersetzen. Als Nächstes nutzen wir deren Rekursionsformel, um die Gamma-Funktionen auf einen einheitlichen Ausdruck $\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)$ zu bringen. Dieser lässt sich dann aus dem Bruch kürzen. Gleichmaßen können wir den Faktor $(\beta k)^{-\frac{N}{2}}$ sowohl im Zähler als auch im Nenner herausfaktorisieren und damit vollständig aus dem Bruch kürzen. Schließlich wird der übrige Ausdruck so umgeformt, dass Gleichung (54) angenommen wird. An dieser Stelle verwenden wir für die weitere Umformung dieses Ausdrucks die Taylorentwicklung des Nenners mit $\lambda \ll 1$,

$$f(\lambda) = \frac{1}{1 + \lambda} \longrightarrow f_{\text{TI}}(\lambda) = 1 - \lambda + \mathcal{O}(\lambda^2), \tag{55}$$

wodurch wir für den Erwartungswert nach sorgfältiger Verrechnung der einzelnen Terme den Ausdruck

$$\langle \bar{q}^{-2} \rangle = \frac{N}{\beta k} \left[1 - \frac{\lambda \beta}{6} \frac{1}{(\beta k)^2} (N + 2) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right] \tag{56}$$

erhalten. Dass es sich hierbei um ein grundsätzlich vernünftiges Ergebnis handelt, lässt sich leicht durch einen Cross-Check für den Fall $\lambda \longrightarrow 0$ einsehen. In diesem Fall nimmt Gleichung (56) wieder die Lösung für den Erwartungswert des freien bzw. wechselwirkungsfreien Falls über die Relation (46) ein. Zudem ist der Korrekturterm $\frac{\lambda \beta}{(\beta k)^2}$ dimensionslos und proportional zu λ sowie abhängig von N , was zu erwarten war.

3.2.2. Large-N-Näherung—Sattelpunktnäherung

Alternativ können wir an diese Rechnung mit der Large-N-Näherung herangehen. Der Kern dieser Methode ist es, unsere betrachtete Größe durch eine $\frac{1}{N}$ -Entwicklung auszudrücken. Dafür müssen extensive Größen unseres Systems sinnvoll mit N reskaliert werden. Hier stellt N die Zahl der Oszillatoren dar, welche miteinander wechselwirken können. Für die Entwicklung in $\frac{1}{N}$ wird $N \gg 1$ angenommen. Der Unterschied zu einer gewöhnlichen Störungstheorie ist der, dass diese Methode auch für starke Kopplungen (große λ) verlässlich angewendet werden kann, da in $\frac{1}{N}$ statt in λ entwickelt wird. Dies wird im Folgenden an unserem System gekoppelter Oszillatoren demonstriert und getestet. Die Einzelheiten zu den Vor- und Nachteilen dieser Methode und die erweiterte Diskussion auf beliebige Größenordnungen von N sind nicht Teil dieser Arbeit, können aber in Ref. [6] detaillierter nachvollzogen werden. Die Vorgehensweise hier wird sein, die Methode, wie sie in Ref. [6], Kapitel 3.3 angewendet wurde, für unsere Rechnung zu implementieren. Die Ausgangssituation hier ist die Reskalierung von Gleichung (50) durch die Einführung der Substitution von

$$y = \frac{1}{N} \rho, \quad V(y) = \frac{1}{N} U(\rho), \quad (57)$$

wobei hier $U(\rho) = \beta(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2)$ ist.
Dadurch erhalten wir den Ausdruck,

$$\begin{aligned} \langle \bar{q}^2 \rangle &= \frac{2N \int_0^\infty dy y y^{\frac{N}{2}-1} e^{-NV(y)}}{\int_0^\infty dy y^{\frac{N}{2}-1} e^{-NV(y)}} \\ &= \frac{2N \int_0^\infty dy e^{-N(V(y) - \frac{1}{2}\ln(y))}}{\int_0^\infty dy y^{-1} e^{-N(V(y) - \frac{1}{2}\ln(y))}} \\ &= \frac{2N \mathcal{I}^{(N)}[V(y) - \frac{1}{2}\ln(y), y^0]}{\mathcal{I}^{(N)}[V(y) - \frac{1}{2}\ln(y), y^{-1}]}. \end{aligned} \quad (58)$$

In der letzten Zeile wurde der integrale Ausdruck Gleichung (24) eingeführt. Dies ist die übliche Form, um die darauffolgende Sattelpunktnäherung bzw. LNN durchzuführen, siehe Ref. [7, pp. 4, 29, 363].

Die Ausführung: Die einzelnen Schritte um auf den finalen Ausdruck zu kommen sind rechenintensiv und können im genaueren Detail ebenfalls in Ref.[6], Kapitel 3.3.1, Glg. (3.20)-(3.29), nachvollzogen werden. Es soll hier die Idee der Methode im Vordergrund stehen. Diese basiert auf der Annahme, dass $f(y)$ ein globales Minimum bei y_0 hat. Für große N zeichnet sich der Integrand aus Gleichung (24) durch einen starken Peak um das Minimum y_0 von $f(y)$ aus. Somit lässt sich dieser durch eine Summe von Gauß Integralen nähern. Durch diese Näherung lässt sich nach einigen Rechenschritten für $\mathcal{I}^{(N)}[f(y), g(y)]$ einen Ausdruck in Form einer Potenzreihenentwicklung (entwickelt in $\frac{1}{N}$) finden. Setzen wir diesen zurück in Gleichung (58) ein, so erhalten wir schließlich einen Ausdruck für unseren Erwartungswert, welcher ebenfalls als Potenzreihe von $\frac{1}{N}$ formuliert wurde,

$$\langle \bar{q}^2 \rangle = 2Ny_0 \left(1 + \frac{1}{N} \left[\frac{-4y_0^2 V^{(2)}(y_0) - 2y_0^3 V^{(3)}(y_0)}{(2y_0^2 V^{(2)}(y_0) + 1)^2} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right), \quad (59)$$

wobei die Superskripte (n) sich auf die n -te Ableitung von $V(y_0)$ beziehen. $V(y)$ selbst ergibt sich aus Gleichung (57),

$$V(y) = \beta \left(ky + \frac{\lambda'}{6} y^2 \right), \quad \lambda' = N\lambda. \quad (60)$$

Zuletzt lässt sich y_0 aus dem Minimum von $f(y) = V(y) - \frac{1}{2}\ln(y)$ bestimmen,

$$y_0 = \frac{-3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}}}{2\lambda'}. \quad (61)$$

Eingesetzt in Gleichung (59) erhalten wir schließlich

$$\langle \bar{q}^2 \rangle = N \frac{-3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}}}{\lambda'} \left(1 + \frac{1}{N} \left[12\lambda' \frac{\left(-3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}}\right)^2}{\left(-3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}} + 6\lambda'\right)^2} \right] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \right). \quad (62)$$

Auch hier lässt sich mit Cross-Check des freien Falls für $\lambda \rightarrow 0$ einsehen, dass es sich um ein vernünftiges Ergebnis handelt. Dies lässt sich unter der Verwendung der Regel von de L'Hospital für den Vorfaktor

$$\frac{-3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}}}{\lambda'} \quad (63)$$

zeigen. Wir erhalten mit $f(\lambda') = -3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}}$ und $g(\lambda') = \lambda'$,

$$\lim_{\lambda' \rightarrow 0} \frac{f'(\lambda')}{g'(\lambda')} = \lim_{\lambda' \rightarrow 0} \frac{f(\lambda')}{g(\lambda')} = \frac{1}{\beta k}, \quad (64)$$

was gerade wieder dem Ergebnis aus Gleichung (44) entspricht. Im Vergleich der beiden Ergebnisse aus Gleichung (56) und (62) lässt sich außerdem festhalten, dass während das Ergebnis aus der ST eine lineare Proportionalität mit der Kopplungskonstanten aufweist, der Ausdruck aus der LNN komplexere, nicht-lineare Terme für λ beinhaltet. Dies lässt eine robustere Näherung für Ergebnisse mit größeren Kopplungskonstanten erwarten.

3.2.3. Berechnung der Kanonische Zustandsfunktion für die LNN

Für die kanonische Zustandsfunktion in Gleichung (34) erhalten wir im Large-N Formalismus den Ausdruck (Ausgangssituation nach Impulsintegration und Kugelkoordinatentransformation von Gleichung (34)),

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{2m\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}} \Omega_N \int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} \exp\left(-\beta\left(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2\right)\right) \quad (65) \\ &= \left(2\pi\sqrt{\frac{m}{\beta}}\right)^N \frac{\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} \exp\left(-\beta\left(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2\right)\right)}{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)} \\ &= R \frac{\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} \exp\left(-\beta\left(k\rho + \frac{\lambda}{6}\rho^2\right)\right)}{\int_0^\infty d\rho \rho^{\frac{N}{2}-1} \exp(-\rho)} \\ &\stackrel{(57)}{=} R \frac{\int_0^\infty dy y^{-1} \exp\left(-N\left(\beta\left(ky + \frac{\lambda'}{6}y^2\right)\right) - \frac{1}{2}\ln(y)\right)}{\int_0^\infty dy y^{-1} \exp\left(-N\left(y - \frac{1}{2}\ln(y)\right)\right)} \\ &\stackrel{(24)}{=} R \frac{\mathcal{I}^{(N)}[f_1, y^{-1}]}{\mathcal{I}^{(N)}[f_2, y^{-1}]} \quad , f_1 = \beta\left(ky + \frac{\lambda'}{6}y^2\right) - \frac{1}{2}\ln(y), f_2 = y - \frac{1}{2}\ln(y) \\ &\stackrel{(25)}{\simeq} R y_{0,f_2} \sqrt{\frac{f_2^{(2)}}{f_1^{(2)}}} e^{-N(f_1^{(0)} - f_2^{(0)})} \\ &\quad \times \left(\frac{1}{y_{0,f_1}} + \frac{1}{N} \left(C_1[f_1, y^{-1}] - \frac{y_{0,f_2}}{y_{0,f_1}} C_1[f_2, y^{-1}]\right) + \mathcal{O}(N^{-2})\right), \end{aligned}$$

wobei hier $R = \left(2\pi\sqrt{\frac{m}{\beta}}\right)^N$ benutzt wurde und in der letzten Zeile darauf zu achten ist, dass es sich bei $f_i^{(n)}$ um eine Kurzschreibweise handelt. Das Subskript i unterscheidet zwischen den beiden verschiedenen behandelten Funktionen, während das Superskript (n) auf die n -te Ableitung verweist. Zusätzlich werden diese Ausdrücke unter deren entsprechenden Minima y_{0,f_i} ausgewertet.

3.2.4. Berechnung der thermodynamischen Größen für die LNN

Zum Berechnen der thermodynamischen Größen beschränken wir uns bei ?? auf den Ausdruck bis zur führenden Ordnung. Aus Gründen der Überschaubarkeit werden alle Ausdrücke für f_1 nicht ausgeschrieben. Für die F erhalten wir folgende Korrekturtermen zum ungekoppelten System

$$\begin{aligned}
F &= -k_B T \ln \left(\left(2\pi\sqrt{\frac{m}{\beta}}\right)^N \sqrt{\frac{2}{f_1^{(2)}}} e^{-N(f_1^{(0)} - \frac{1}{2}(1 + \ln(2)))} + \mathcal{O}(N^{-1}) \right) \\
&= -k_B T \left[N \ln \left(2\pi\sqrt{\frac{m}{\beta}}\right) + \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2}{f_1^{(2)}}\right) - N \left(f_1^{(0)} - \frac{1}{2}(1 + \ln(2))\right) \right. \\
&\quad \left. + \ln \left(\frac{\lambda'}{-3k + \sqrt{9k^2 + 6\frac{\lambda'}{\beta}}} \right) \right]. \tag{66}
\end{aligned}$$

Weiterhin ist F volumenunabhängig, so dass

$$p = 0. \tag{67}$$

Dies war zu erwarten, da im System keine räumlichen Randbedingungen implementiert wurden, d.h. die Oszillatorauslenkung $q_i \in [-\infty, +\infty]$ gewählt wurde. Für die Entropiedichte erhält man jedoch Korrekturen zum freien System,

$$s = -\frac{k_B T}{V} \left[\frac{N}{2T} - \frac{1}{2} \partial_T \ln \left(f_1^{(2)}\right) - N \partial_T f_1^{(0)} - \frac{\lambda'}{k\sqrt{9k^2 + 6\lambda'T} + 3k^2 + 2\lambda'T} \right]. \tag{68}$$

3.2.5. Berechnung der Kanonische Zustandsfunktion mit ST

Im störungstheoretischen Formalismus erhalten wir zum Vergleich den folgenden Ausdruck für die Zustandssumme,

$$\begin{aligned}
Z &= \left[\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \right]^N \Omega_N \left[(\beta k)^{-\frac{N}{2}} \Gamma \left(\frac{N}{2}\right) - \lambda \frac{\beta}{6} (\beta k)^{-\left(\frac{N}{2}+2\right)} \Gamma \left(\frac{N}{2} + 2\right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right] \\
&= \left[\sqrt{\frac{2m\pi}{\beta}} \right]^N \frac{(2\pi)^{N/2}}{\Gamma \left(\frac{N}{2}\right)} (\beta k)^{-\frac{N}{2}} \left[\Gamma \left(\frac{N}{2}\right) - \lambda \frac{1}{6\beta k^2} \left(\frac{N}{2} + 1\right) \frac{N}{2} \Gamma \left(\frac{N}{2}\right) + \mathcal{O}(\lambda^2) \right] \\
&= \left(\frac{2\pi}{\beta} \sqrt{\frac{m}{k}} \right)^N \left[1 - \lambda \frac{1}{6\beta k^2} \left(\frac{N}{2} + 1\right) \frac{N}{2} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right]. \tag{69}
\end{aligned}$$

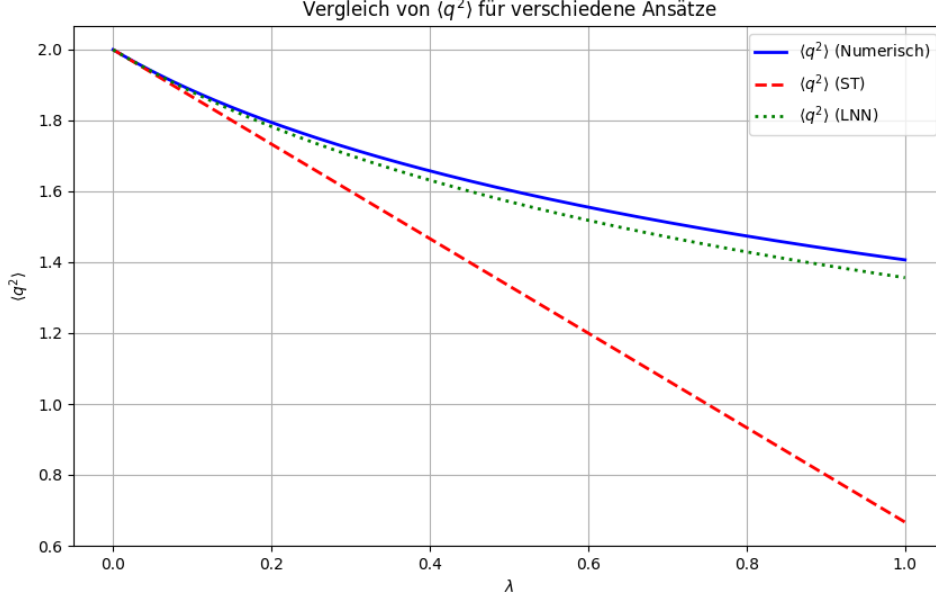


Abbildung 1: Vergleich von $\langle \bar{q}^2 \rangle$ für verschiedene Ansätze in Abhängigkeit von λ bei $N = 2, k, \beta = 1$

3.2.6. Berechnung der thermodynamischen Größen mit ST

Mit der Bestimmung der Zustandssumme lassen sich mit Gleichung (3) - (9) die folgenden thermodynamischen Größen bestimmen:

Für die Korrekturen zur freien Energie (36) findet man folgende λ -Korrekturterme,

$$F = -k_B T \left[N \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \sqrt{\frac{m}{k}} \right) + \ln \left(1 - \lambda \frac{1}{6\beta k^2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \frac{N}{2} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right) \right]. \quad (70)$$

Auch in ST gilt in allen Ordnungen,

$$p = 0. \quad (71)$$

Die Korrekturen zur Entropiedichte (39) haben die folgenden λ -Korrekturterme,

$$s = -\frac{k_B}{V} \left[N \ln \left(\frac{2\pi}{\beta} \sqrt{\frac{m}{k}} \right) + \ln \left(1 - \lambda \frac{1}{6\beta k^2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \frac{N}{2} + \mathcal{O}(\lambda^2) \right) \right] - \frac{k_B T}{V} \left[\frac{N}{T} - \frac{\lambda \frac{1}{6k^2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \frac{N}{2}}{1 - \lambda \frac{1}{6\beta k^2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right) \frac{N}{2} + \mathcal{O}(\lambda^2)} \right]. \quad (72)$$

3.2.7. Auswertung

In Abb. 1 wird das Verhalten von $\langle \bar{q}^2 \rangle$ in Abhängigkeit von λ für drei verschiedene Berechnungsmethoden dargestellt: die numerische Lösung (blaue durchgezogene Linie), die ST-Näherung (rote gestrichelte Linie) und die LNN-Näherung (grüne gepunktete Linie).

- **Numerische Lösung:** Diese liefert die exakte Lösung für die Funktion $\langle \vec{q}^2 \rangle$, berechnet durch numerische Integration.
- **ST-Näherung:** Diese Methode liefert bei sehr kleinen λ -Werten ein ähnliches Verhalten wie die numerische Lösung, weicht jedoch mit zunehmendem λ deutlich ab und unterschätzt die Werte für $\langle \vec{q}^2 \rangle$.
- **LNN-Näherung:** Die LNN-Methode zeigt im Vergleich eine bessere Übereinstimmung mit der numerischen Lösung, insbesondere im Bereich kleiner bis mittlerer λ -Werte, und folgt dem numerischen Ergebnis enger als die ST-Näherung.

Insgesamt erkennt man, dass die LNN-Näherung eine genauere Approximation darstellt als die ST-Näherung, die für größere Werte von λ signifikant abweicht.

4. GN-Modell

In diesem Kapitel wird das Gross-Neveu-Modell als Beispiel einer fermionischen Quantenfeldtheorie (QFT) verwendet, um zu demonstrieren, dass die LNN auch in diesem Kontext qualitativ wertvolle Ergebnisse liefern kann. Der Schwerpunkt liegt auf der Anwendung und Umsetzung der LNN im Pfadintegralformalismus. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der mathematischen Struktur der Näherung und deren Anwendung, während detaillierte physikalische und thermodynamische Interpretationen nur angeschnitten werden.

4.1. GN-Modell 1+1 Dimensionen

Das GN-Modell wurde 1974 von D. J. Gross und A. Neveu eingeführt [8]. Es modelliert eine relativistische QFT, welche die Dynamik masseloser Dirac Fermionen beschreibt, die selbstwechselwirkend in einer Raumdimension sind. Im Rahmen dieser Arbeit wird dieses Modell benutzt, um zu zeigen, wie die LNN auch hier zur Anwendung kommt, um einen Ausdruck für ein effektives Potential herzuleiten. Schließlich betrachten wir die Phänomenologie des homogenen Phasendiagramms für $N \rightarrow \infty$ an und diskutieren einige Besonderheiten. Das homogene Phasendiagramm wurde erstmals 1985 entdeckt [9]. Eine Orientierung für diesen Teil der Arbeit stellt Ref. [6] dar.

4.2. Die Wirkung des GN-Modells im Vakuum

Wir beginnen mit einem rein fermionischen GN-Modell. Die GN-Wirkung ist eine Summe aus der freien Dirac-Wirkung und einem Wechselwirkungsterm mit einer Kopplungskonstanten g . Der Wechselwirkungsterm beschreibt die lokale Streuung von Fermionen und wird als Vier-Fermionen Wechselwirkung bezeichnet. Wir starten mit der Darstellung einer Minkowski-Wirkung im Vakuum,

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left[\sum_{j=1}^N (\bar{\psi}_j i \not{\partial} \psi_j) + \frac{g^2}{2N} \left(\sum_{j=1}^N \bar{\psi}_j \psi_j \right)^2 \right]. \quad (73)$$

Hier sind γ^μ die Dirac- (oder Gamma-) Matrizen, die aus der Dirac-Gleichung und der entsprechenden Lagrangedichte bekannt sind, g die Vier-Fermionen Kopplung und N , die Anzahl der Fermionspezies, welche oft auch als Fermionenfarbe oder -geschmack in der GN-Model Literatur bezeichnet wird. Die Reskalierung von g mit $2N$ ist üblich und wird spätere Rechnungen für $N \rightarrow \infty$ erleichtern. Aus Gründen der Übersicht werden wir die Summen im Folgenden weglassen und die Einsteinsche Summenkonvention verwenden. Die Lagrangedichte des GN-Modells ist unter einer diskreten chiralen Symmetrietransformation invariant,

$$\psi \mapsto \gamma_5 \psi, \quad \bar{\psi} \mapsto -\bar{\psi} \gamma_5. \quad (74)$$

Chirale Symmetrie ist eine spezielle Art von Symmetrie in Systemen masseloser oder sehr leichter Fermionen. Sie beschreibt die Unterscheidbarkeit von zwei Arten von Fermionen, nämlich die linkshändigen und rechtshändigen Komponenten, die sich wie Spiegelbilder verhalten. Bei masselosen Fermionen ist diese Symmetrieeigenschaft besonders relevant, da für solche Teilchen die linkshändige und rechtshändige Komponente unabhängig voneinander transformiert werden können. Wohingegen sie bei massiven Teilchen explizit gebrochen ist, da die Massen die linkshändige und rechtshändige Komponente koppeln.

4.2.1. Übergang zur Euklidischen Beschreibung

Zur Beschreibung des Verhaltens unseres Modells in einem thermischen Medium überführen wir die Wirkung mittels einer Wick-Rotation in einen Imaginärzeit Formalismus, wodurch euklidische Größen auftreten. Diese Transformation ermöglicht es, die Temperatur als physikalischen Parameter in die QFT zu integrieren, indem der reelle Zeitbereich auf eine periodische Imaginärzeit eingeschränkt wird. Hier wird die im Appendix eingeführte Notation im Abschnitt Anhang A.1 verwendet.

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\beta} d\tau \left[(\bar{\psi} (\not{\partial} - \mu\gamma^2) \psi) - \frac{g^2}{2N} (\bar{\psi}\psi)^2 \right], \quad (75)$$

wobei hier μ das chemische Potential ist.

Die Einführung der Temperatur erfolgt über die Beschränkung der imaginären Zeit τ auf das Intervall $[0, \beta]$, wobei $\beta = \frac{1}{k_B T}$ den Kehrwert der thermischen Energie darstellt. Das Intervall ist periodisch, d.h., die Felder sind nach der Bedingung $\tau \sim \tau + \beta$ fortgesetzt. Dieser Periodizitätsansatz für die Imaginär-Zeit entspricht physikalisch der thermischen Gleichgewichtsbedingung für ein System bei Temperatur T .

Durch die Wick-Rotation erhalten wir die euklidische Form der Wirkung:

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\beta} d\tau \left[\bar{\psi} (\not{\partial} - \mu\gamma^2) \psi - \frac{g^2}{2N} (\bar{\psi}\psi)^2 \right],$$

wobei hier μ das chemische Potential darstellt. Die Einführung der Imaginärzeit sowie der Temperatur und des chemischen Potentials erlaubt es, das Verhalten des Systems in einem Medium und bei endlicher Teilchendichte zu beschreiben.

Die Pfadintegral-Darstellung der Zustandssumme, welche auch als Großkanonische Zustandssumme der QFT verstanden werden kann, ist gegeben durch:

$$\mathcal{Z} = \mathcal{R} \int [d\bar{\psi}, d\psi] \exp(-S[\bar{\psi}, \psi]), \quad (76)$$

wobei es sich bei dem Integrationsmaß nicht mehr um ein gewöhnliches, sondern ein funktionales Maß handelt, was mit der Notation $[d\bar{\psi}, d\psi]$ ausgedrückt werden soll. Dies signalisiert, dass die Integration über alle möglichen Funktionen ausgeführt werden soll. Aus dem Vergleich der beiden Wirkungen aus Gleichung (73) und (75) lässt sich die Motivation hinter dem Übergang in den euklidischen Formalismus nachvollziehen. Im Pfadintegral (Gleichung (76)) geht der komplexwertige Integrand über in einen Ausdruck, der als Verteilungsfunktion aufgefasst werden kann.

4.2.2. Bosonisierung - Hubbard-Stratonovich-Transformation

Die Bosonisierung wird über die sogenannte Hubbard-Stratonovich-Transformation durchgeführt, siehe Refs. [10], [11]. Es wird eine gaussartige Verteilungsfunktion einer einschränkenden Feldkonfiguration $\xi = \xi(x)$ eingeführt,

$$1 = \# \int [d\xi] e^{-\int_{-\infty}^{\infty} d^2x \frac{1}{2} \xi^2}. \quad (77)$$

Dieser Ausdruck wird in die ursprüngliche Verteilungsfunktion eingebaut, wodurch diese nun durch Einschubung der Eins folgende Form annimmt,

$$\mathcal{Z} \propto \int [d\bar{\psi}, d\psi] e^{-S[\bar{\psi}, \psi]} \quad (78)$$

$$= \int [d\xi, d\bar{\psi}, d\psi] \exp \left\{ - \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left[\bar{\psi} (\not{\partial} - \mu\gamma^2) \psi - \frac{g^2}{2N} (\bar{\psi}\psi)^2 + \frac{1}{2}\xi^2 \right] \right\}. \quad (79)$$

Mit der Substitution,

$$\xi = \frac{h}{g}\phi + \frac{g}{\sqrt{N}}\bar{\psi}\psi, \quad (80)$$

ergibt sich nach Einsetzen und Umformen folgende Ausdrücke für unsere Verteilungsfunktion und Wirkung,

$$\mathcal{Z} = \int [d\phi, d\bar{\psi}, d\psi] e^{-S[\phi, \bar{\psi}, \psi]}, \quad (81)$$

$$S[\phi, \bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left[\bar{\psi} \left(\not{\partial} - \mu\gamma^2 + \frac{1}{\sqrt{N}}h\phi \right) \psi + \frac{1}{2g^2}h^2\phi^2 \right]. \quad (82)$$

Diese Transformation kann man sich also als eine verschobene Gaussintegration vorstellen. Zum Vereinfachen wählen wir die Substitution $\sigma = \frac{h\phi}{\sqrt{N}}$. Aus dem Vergleich mit der Dirac-Gleichung lässt sich σ als eine Masse interpretieren, die durch den Erwartungswert des Feldes σ bestimmt ist. Prinzipiell kann dieses auch vom Ort abhängen, was eine exotische Eigenschaft für ein Teilchen wäre und als inhomogene Phase bezeichnet wird, siehe z.B. Ref. [12]. Wir beschränken uns später auf homogene Felder mit der Eigenschaft,

$$\sigma(x, \tau) = \bar{\sigma} = \text{const.} \quad (83)$$

Dies vereinfacht spätere Rechnungen erheblich. Unsere Wirkung und die dazugehörige Verteilungsfunktion lassen sich folgendermaßen darstellen,

$$S[\sigma, \bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left(\bar{\psi} \underbrace{(\not{\partial} - \mu\gamma^2 + \bar{\sigma})}_{:=Q} \psi + \frac{N}{2g^2}\sigma^2 \right), \quad (84)$$

$$\mathcal{Z} = \int [d\sigma, d\bar{\psi}, d\psi] e^{-\left(\int_{-\infty}^{\infty} d^2x \bar{\psi} Q \psi + \frac{N}{2g^2}\sigma^2 \right)}. \quad (85)$$

4.3. Berechnung der Zustandssumme und effektiver Wirkung in der Large-N-Näherung

4.3.1. Berechnung der funktionalen Determinante

Zunächst unterteilen wir unsere Wirkung wie folgt,

$$S[\bar{\psi}, \psi] = s_1[\bar{\psi}, \psi] + s_2, \quad (86)$$

wobei die Terme explizit lauten,

$$s_1[\bar{\psi}, \psi] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \bar{\psi} Q \psi = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \bar{\psi} (\not{\partial} - \mu\gamma^2 + \bar{\sigma}) \psi \quad (87)$$

und

$$s_2 = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \frac{N}{2g^2} \bar{\sigma}^2. \quad (88)$$

Für das weitere Vorgehen beschränken wir uns zunächst auf den Term s_1 . Hier werden die doppelten Fourier-Transformationen für unsere fermionischen Felder angewendet, siehe Anhang A.7.

Nach der Ausführung der Transformation lassen sich die partiellen Ableitungen in $\not{\partial}$ an dem Impulsintegral vorbeiziehen und auf die Phasenfaktoren der Fourier-Transformation anwenden. Beim Zusammenfassen ergibt sich für $s_1[\bar{\psi}, \psi]$ folgender Ausdruck,

$$\begin{aligned} \left(\frac{T}{2\pi}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 dp_2 \left(\tilde{\psi}_n(i\gamma^1 p_1 + \gamma^2(i\nu_m + \mu) + \bar{\sigma}) \tilde{\psi}_m \right. \\ \left. \times e^{i[(\nu_m - \nu_n)\tau + (p_2 - p_1)x]} \right). \end{aligned} \quad (89)$$

Wobei hier als Kurznotation $\bar{\psi}_n = \bar{\psi}(\nu_n, p_1)$ und $\psi_m = \psi(\nu_m, p_2)$ geschrieben wurde. Dieser Ausdruck lässt sich weiter reduzieren. Dafür ziehen wir das x und τ Integrale an der Summe und den Impulsintegralen vorbei und können dabei die folgenden Identitäten der Delta-Distributionen/Kronecker-Delta (Gleichung (166)) verwenden,

$$\begin{aligned} s_1[\bar{\sigma}, \bar{\psi}, \psi] &= \frac{T}{2\pi} \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 dp_2 \tilde{\psi}_n(i\gamma^1 p_1 + \gamma^2(i\nu_m + \mu) + \bar{\sigma}) \tilde{\psi}_m \delta_{n,m} \delta(p_1 - p_2) \\ &= \frac{T}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_2 \tilde{\psi}_n(i\gamma^1 p_2 + \gamma^2(i\nu_n + \mu) + \bar{\sigma}) \tilde{\psi}_n \\ &= \frac{T}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_2 \tilde{\psi}(\nu_n, p_2) Q \tilde{\psi}(\nu_n, p_2), \end{aligned} \quad (90)$$

wobei $Q \equiv (i\gamma^1 p_2 + \gamma^2(i\nu_n + \mu) + \bar{\sigma})$.

Setzen wir diesen Ausdruck in die Verteilungsfunktion, lässt sich mithilfe der Identität ?? der Ausdruck der Pfadintegrale über die fermionischen Felder weiter vereinfachen (der s_2 - Term wird aus Gründen der Übersicht zunächst ignoriert),

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &\propto \int [d\sigma, d\bar{\psi}, d\psi] \times \\ &\times \exp \left[-\frac{T}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dp_2 \tilde{\psi}(\nu_n, p_2) (i\gamma^1 p_2 + \gamma^2(i\nu_n + \mu) + \sigma) \tilde{\psi}(\nu_n, p_2) \right] \\ &= \int [d\sigma] \text{Det}(Q)^N, \end{aligned} \quad (91)$$

wobei es sich hier um eine Funktionaldeterminante handelt,

$$\text{Det}(Q) = \prod_{n,p_2} \det(Q). \quad (92)$$

Es wurde im letzten Schritt außerdem wieder die Summation über die N Fermionspezies berücksichtigt und die Identität Gleichung (176) verwendet. Somit nimmt Gleichung (85)

schließlich folgende Form an,

$$\mathcal{Z} \propto \int [d\sigma] \left[e^{-\left(\int_{-\infty}^{\infty} d^2x \frac{N}{2g^2} \sigma^2\right)} \text{Det}(Q)^N \right], \quad (93)$$

was, nachdem man die Determinante in den Exponenten zieht, wie folgt aussieht,

$$\mathcal{Z} \propto \int [d\sigma] e^{-\int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left(\frac{N}{2g^2} \sigma^2\right) + N \ln(\text{Det}(Q))} \quad (94)$$

$$= \int [d\sigma] e^{-N S_{\text{eff}}[\sigma]}. \quad (95)$$

wobei hier eine effektive Wirkung,

$$S_{\text{eff}}[\sigma] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left(\frac{1}{2g^2} \sigma^2 \right) - \ln(\text{Det}(Q)) \quad (96)$$

beschrieben wird. Nachdem wir diese Form erreicht haben, betrachten wir $N \rightarrow \infty$, sodass für diesen Ausdruck lediglich Terme einen Beitrag leisten, bei denen die Wirkung ein Minimum annimmt. Dies entspricht gerade dem ersten Term in ???. An dieser Stelle sieht man die Parallele zu Gleichung (24), der Ausgangssituation für unsere LNN. In dieser Näherung tragen nur noch Minima der Wirkung zur Verteilungsfunktion bei. Wir suchen also nach dem chiralen Kondensat $\bar{\sigma}$, welches die effektive Wirkung minimiert,

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}[\sigma(x)]}{\delta \sigma(x)} = 0. \quad (97)$$

Hierbei gilt die Einschränkung $\sigma(x, \tau) = \bar{\sigma} = \text{const.}$ Zunächst müssen wir uns aber erst mit dem weiteren Vereinfachen des Determinanten Ausdrucks beschäftigen. Dafür werden wir im Folgenden die Methode der Matsubara Summationen verwenden.

4.3.2. Lösen der Determinante mittels Matsubara Summation

Die Ausgangssituation ist die Betrachtung der Matrix,

$$\begin{aligned} Q &\equiv (i\gamma^1 p_2 + \gamma^2 (i\nu_n + \mu) + \bar{\sigma} I_{2 \times 2}) \\ &= \begin{pmatrix} \bar{\sigma} & (i\nu_n + \mu) + p_2 \\ (i\nu_n + \mu) - p_2 & \bar{\sigma} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (98)$$

wobei $I_{2 \times 2}$ die 2 dimensionale Einheitsmatrix bezeichnet und γ^1, γ^2 die euklidischen Gamma-Matrizen sind, vgl. Anhang A.1. An dieser Stelle nehmen wir an, dass es sich um homogenen Felder handelt,

$$\sigma(x, \tau) = \bar{\sigma} = \text{const.} \quad (99)$$

Die Determinante von Q wird mittels der Sarrusregel im Diracraum bestimmt und liefert,

$$\det(Q) = [\bar{\sigma}^2 - [(i\nu_n + \mu)^2 - p_2^2]] = [E_p^2 - (i\nu_n + \mu)^2], \quad (100)$$

wobei hier die Substitution für den relativistischen Ausdruck für die Energie $E_p = \sqrt{p^2 + \bar{\sigma}^2}$ verwendet wurde. Es bleibt die Determinante im Impulsraum, welche wir mit $\text{tr}(\ln) = \ln \det$ in eine Summe und ein Integral umschreiben (Es sei angemerkt, dass es sich bei den Ausdrücken Tr und Det um funktionale Objekte handelt),

$$\ln(\text{Det}(Q)) = \text{Trln} [E_p^2 - (i\nu_n + \mu)^2] = T \sum_n \int \frac{dp}{2\pi} \ln [E_p^2 - (i\nu_n + \mu)^2]. \quad (101)$$

Was über die Methode der Matsubara-Summation, siehe Ref. [13], in den folgenden Ausdruck umgeformt werden kann,

$$\ln(\text{Det}(Q)) = \frac{1}{\pi} \left[\int dp E_p + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p - \mu)}] + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p + \mu)}] \right]. \quad (102)$$

Insgesamt lässt sich also für unsere Zustandsfunktion und die zugehörige effektive Wirkung festhalten, wobei wir nur noch über konstante Feldkonfigurationen integrieren.

$$Z \propto \int [d\sigma] \exp \left[-N \left(\int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left(\frac{1}{2g^2} \sigma^2 \right) - \frac{1}{\pi} \int dp \left[E_p + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p - \mu)}] + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p + \mu)}] \right] \right) \right], \quad (103)$$

$$S_{\text{eff}}[\bar{\sigma}] = \int_{-\infty}^{\infty} d^2x \left(\frac{1}{2g^2} \bar{\sigma}^2 \right) - \frac{1}{\pi} \int dp \left[E_p + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p - \mu)}] + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p + \mu)}] \right], \quad (104)$$

4.3.3. Minimierung der effektiven Wirkung und Renormierung

Zusätzlich lässt sich nun die chirale Symmetrie des Systems durch das effektive Potential (104) über das chirale Kondensat beschreiben,

$$\bar{\sigma} \longrightarrow -\bar{\sigma}. \quad (105)$$

Das System behält seine chirale Symmetrie für verschwindende chirale Kondensate, verschwindende Minima von $S_{\text{eff}}[\bar{\sigma}]$ also bei. Falls bei der Minimierung ein endlicher Wert für σ_{min} gefunden wird, bricht die Symmetrie des Systems spontan. Mit der Einschränkung auf homogene chirale Kondensate und der Annahme, dass es ein globales Minimum für σ gibt,

$$\sigma(x, \tau) = \bar{\sigma} = \text{const.}, \quad (106)$$

wird aus dem variationellen Minimierungsproblem (97) ein Klassisches der wohlbekannten Form,

$$\frac{dS_{\text{eff}}(\bar{\sigma})}{d\bar{\sigma}} = 0, \quad (107)$$

und unser Pfadintegral geht in eine gewöhnliche Integration über. Weiterhin kann die Integration bei s_2 nun mithilfe der Definition,

$$U(\bar{\sigma}) = \frac{S_{\text{eff}}(\bar{\sigma})}{\beta V}, \quad (108)$$

wobei V das räumliche Volumen des Systems darstellt, welches im Laufe der folgenden Rechnung $\rightarrow \infty$ geschickt wird,

$$\frac{1}{\beta V} s_2[\bar{\sigma}] = \frac{1}{\beta V} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\beta} d\tau \left(\frac{1}{2g^2} \bar{\sigma}^2 \right) = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{1}{2g^2} \bar{\sigma}^2 \right). \quad (109)$$

unter Berücksichtigung von $V \rightarrow \infty$ wird folgender Ausdruck erreicht,

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \int_{-\frac{V}{2}}^{\frac{V}{2}} dx \left(\frac{1}{2g^2} \bar{\sigma}^2 \right) = \frac{1}{2g^2} \bar{\sigma}^2. \quad (110)$$

Die Ableitung lautet dann insgesamt,

$$\frac{dU(\bar{\sigma})}{d\bar{\sigma}} = \frac{1}{g^2} \bar{\sigma} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{\bar{\sigma}}{E_p} [1 - n(E_p, -\mu) - n(E_p, \mu)], \quad (111)$$

wobei hier die Definition der Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion $n(E, \mu) \equiv \frac{1}{e^{\beta(E+\mu)} + 1}$ verwendet wurde.

Betrachtet man nun $T, \mu \rightarrow 0$, fallen die Fermi-Dirac- bzw. Mediumsterme weg, wodurch für die Minimierungsbedingung schließlich gilt,

$$\bar{\sigma} \left(\frac{1}{g^2} - \frac{1}{\pi} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_0^{\Lambda} \frac{dp}{E_p} \right) = 0, \quad (112)$$

wobei hier die Grenzen der Impulsintegration durch Symmetrieüberlegungen umgeformt wurden. Die triviale Lösung erhält man hier offensichtlich für $\bar{\sigma} = 0$. Diese ist jedoch physikalisch uninteressant, da sie wie man zeigen kann, ein Maximum im Vakuum darstellt. Im Integralausdruck treten hier zudem Divergenzen auf, welche im folgenden speziell in einem Renormierungsprozess behandelt werden müssen.

Renormierung Die Renormierungsbedingung lautet $\bar{\sigma} = \Sigma_0 \neq 0$, wobei

$$\bar{\Sigma}_0 \equiv \bar{\Sigma}(\mu, T) \Big|_{\mu=0, T=0} \quad (113)$$

der Vakuumserwartungswert von σ im Vakuum ist. Damit ein Minimum vorliegt, muss also der Term in der Klammer gleich Null sein. Mit der Identität,

$$\int dx \frac{1}{\sqrt{x^2 + a}} = \tanh^{-1} \left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + a}} \right), \quad (114)$$

ergibt sich für uns folgender Ausdruck,

$$\frac{1}{\pi} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \int_0^{\Lambda} \frac{dp}{E_p} = \frac{1}{\pi} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left[\tanh^{-1} \left(\frac{p}{\sqrt{p^2 + \bar{\sigma}^2}} \right) \right]_{p=0}^{p=\Lambda} \stackrel{!}{=} \frac{1}{g^2}. \quad (115)$$

Hier verwenden wir die Identität,

$$\tanh^{-1} \left(\frac{p}{\sqrt{p^2 + \bar{\Sigma}_0^2}} \right) = \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{p^2}} \right). \quad (116)$$

Dafür verwenden wir die infinitesimalanalytischen Definitionen der Hyperbolicusfunktionen,

$$\operatorname{artanh}(x) := \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right) \quad \text{für } |x| < 1, \quad (117)$$

$$\operatorname{arcoth}(x) := \frac{1}{2} \ln \left(\frac{x+1}{x-1} \right) \quad \text{für } |x| > 1, \quad (118)$$

und formen unser Argument in unserer \tanh^{-1} -Funktion folgendermaßen um,

$$\frac{p}{\sqrt{p^2 + \bar{\Sigma}_0^2}} = \frac{p}{\sqrt{p^2 \left(1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{p^2}\right)}} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{p^2}}}, \quad (119)$$

sodass wir bei Verwendung der Logarithmischen Definition durch eine kleine Termumformung sofort die Definition der arcoth-Funktion erkennen können. Schließlich lautet der finale Ausdruck dann,

$$\frac{1}{\pi} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left[\operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{p^2}} \right) \right]_{p=0}^{p=\Lambda} = \frac{1}{g^2}, \quad (120)$$

wobei für $p \rightarrow 0$ das Argument der arcoth-Funktion gegen Unendlich geht und somit die Funktion selbst gegen 0 läuft. Während für den $\Lambda \rightarrow \infty$ Fall sich das Argument der 1 nähert und somit die Funktion divergiert. Es lässt sich also festhalten, dass damit wir eine Lösung die Minimierungsbedingung bekommen können, muss es eine Abhängigkeit der Kopplungskonstante von Λ geben, was man als Renormierungsbedingung der Form

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) = \frac{1}{g^2}, \quad (121)$$

bezeichnet. Zurück eingesetzt in Gleichung (107) (Allgemeine Minimierungsbedingung ohne Einschränkungen) erhalten wir (Limites implizierend $\Lambda, V \rightarrow \infty$),

$$\bar{\sigma} \left[\frac{1}{\pi} \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) - \frac{1}{\pi} \int_0^\Lambda dp \frac{1}{E_p} [1 - n(E_p, -\mu) - n(E_p, \mu)] \right] = 0. \quad (122)$$

Wobei wir hier wieder die Impulsintegration über den Vakuumsterm analog wie zuvor durchführen können. Dadurch erhalten wir,

$$\begin{aligned} & \bar{\sigma} \left[\operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) - \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\sigma}^2}{\Lambda^2}} \right) \right. \\ & \left. + \int_0^\Lambda dp \frac{1}{E_p} [n(E_p, -\mu) + n(E_p, \mu)] \right] = 0. \end{aligned} \quad (123)$$

Und für das effektive Potential,

$$\begin{aligned} U(\bar{\sigma}, T, \mu) = & \\ & \frac{1}{\pi} \left[\frac{\bar{\sigma}^2}{2} \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) \right. \\ & \left. - \int_0^\Lambda dp \left[E_p + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p - \mu)}] + T \ln [1 + e^{-\beta(E_p + \mu)}] \right] \right]. \end{aligned} \quad (124)$$

Mit der Taylorentwicklung des Arguments,

$$f(x) = \sqrt{1+x} \simeq 1 + \frac{1}{2}x + \mathcal{O}(x^2), \quad (125)$$

bekommen wir die Näherung,

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) \simeq \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2 + \frac{1}{2} \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}}{\frac{1}{2} \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right), \quad (126)$$

und wir erhalten in der GAP-Gleichung (112) den Ausdruck,

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) - \operatorname{arcoth} \left(\sqrt{1 + \frac{\bar{\Sigma}_0^2}{\Lambda^2}} \right) \simeq \ln \left(\frac{\bar{\sigma}}{\bar{\Sigma}_0} \right), \quad (127)$$

insgesamt also $\lambda \rightarrow \infty$,

$$\bar{\sigma} \left[\ln \left(\frac{\bar{\sigma}}{\bar{\Sigma}_0} \right) + \int_0^\Lambda dp \left[\frac{1}{E_p} (n(E_p, -\mu) + n(E_p, \mu)) \right] \right] = 0. \quad (128)$$

Im Vakuum, wo der hintere Term verschwindet, erhalten wir somit eine Extremalbedingung für $\bar{\Sigma}_0 = \bar{\sigma}$ (da $\ln(1)=0$). Schlussendlich finden wir das effektive Potential,

$$U(\bar{\sigma}, T, \mu) = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\bar{\sigma}^2}{2} \left[\ln \left(\frac{\bar{\sigma}^2}{\bar{\Sigma}_0^2} \right) - 1 \right] - \int_0^\infty dp \left[T \ln(1 + e^{\beta(E_p + \mu)}) + T \ln(1 + e^{\beta(E_p - \mu)}) \right] \right] \quad (129)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\bar{\sigma}^2}{2} \left[\ln \left(\frac{\bar{\sigma}^2}{\bar{\Sigma}_0^2} \right) - 1 \right] - \int_0^\infty dp \frac{p^2}{E_p} [n(E_p, -\mu) + n(E_p, +\mu)] \right], \quad (130)$$

wobei bei der Herleitung dieses Ausdrucks der arcoth -Term mit der Auswertung des Impulsintegrals über den Energie-Ausdruck verrechnet wurde und die Mediumsterme über partielle Integration in die entsprechende Form gebracht wurden (Rand- bzw. Oberflächenterme fallen weg). Dies verbessert spätere numerische Rechnungen.

4.4. Auswertung und Thermodynamik des GN-Modells

Im Folgenden wird nun der Ausdruck für das effektive Potential für verschiedene Temperatur- und chemische Potentialwerte geplottet und ausgewertet. Anschließend wird das dazugehörige Phasendiagramm aufgezeigt und dessen Besonderheiten diskutiert.

4.4.1. Phasenübergänge und das Effektive Potential

Abb. 2 zeigt das effektive Potential $U(\bar{\sigma}, T, \mu)$ in Abhängigkeit von $\bar{\sigma}$ für verschiedene Werte des chemischen Potentials μ bei einer festen Temperatur. Hier lässt sich beobachten, dass sich das globale Minimum von der orangenen zu der grünen Kurve diskontinuierlich geändert hat.

In Abb. 3 wird die Lösung der Gap-Gleichung (Gleichung (112)) für verschiedene Werte der Temperatur T bei festem chemischen Potential $\mu = 0$ dargestellt. Die Kurven zeigen die Ableitung des effektiven Potentials in Abhängigkeit von $\bar{\sigma}$ bei unterschiedlichen Temperaturen. Mit steigender Temperatur (in Richtung der oberen Kurven) wird das Minimum des Potentials $\bar{\sigma}_{\min}$ kleiner, was eine Verringerung des kondensierten Zustands signalisiert. Dies kann als ein Hinweis auf die thermische Entstehung eines Phasenübergangs verstanden werden. Die Existenz eines ausgeprägten Minimums bei tieferen

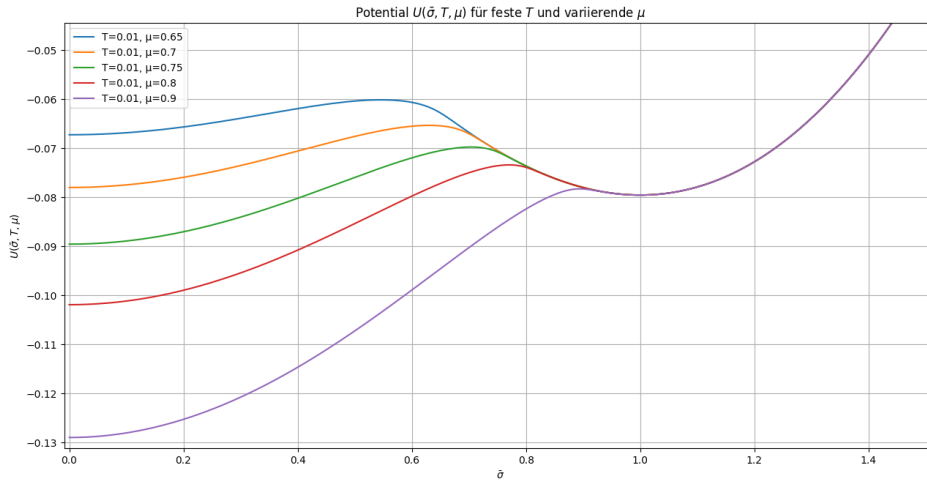


Abbildung 2: Potential $U(\bar{\sigma}, T, \mu)$ für eine feste Temperatur $T = 0.01$ und variierendem μ

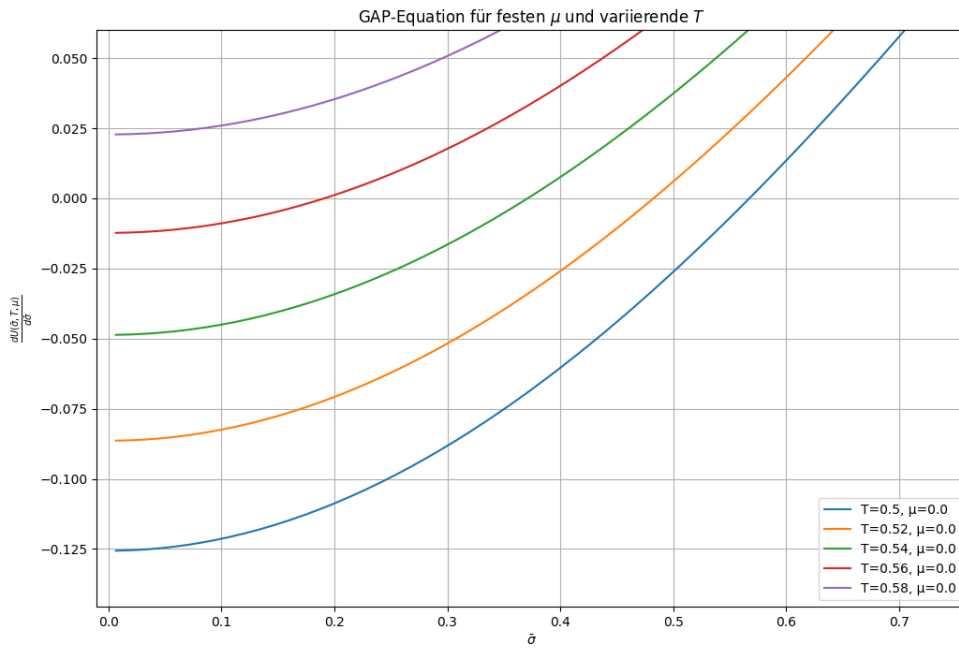


Abbildung 3: Gap-Gleichung bei festem chemischen Potential $\mu = 0$ und variierendem T

Temperaturen deutet auf eine stabile kondensierte Phase hin, während die Abflachung bei höheren Temperaturen das Schmelzen dieses kondensierten Zustands widerspiegelt. Das Verschwinden des Minimums bei hohen Temperaturen lässt darauf schließen, dass oberhalb einer kritischen Temperatur die chirale Symmetrie wiederhergestellt wird. Diese Analyse erlaubt es, den Zusammenhang zwischen Temperatur und chiraler Symmetriebrechung zu erforschen.

Abb. 4 zeigt das zur Abb. 3 zugehörige effektive Potential $U(\bar{\sigma}, T, \mu)$. Die Kurven zeigen,

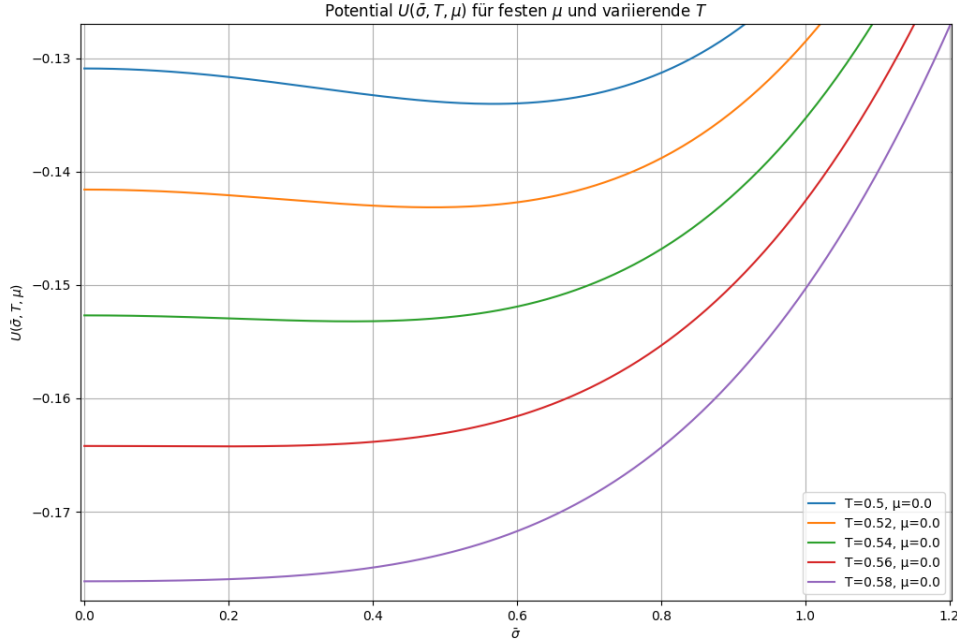


Abbildung 4: Potential $U(\bar{\sigma}, T, \mu)$ bei festem chemischen Potential $\mu = 0$ und variierendem T

wie sich der Grundzustand bzw. das globale Minimum in Abhängigkeit von μ ändert. Bei niedrigen Werten von μ besitzt das Potential ein ausgeprägtes Minimum bei einem nicht verschwindenden $\bar{\sigma}$ -Wert. Dies beschreibt das Vorhandensein eines chiralen Kondensats. Die Kurven zeigen eine Reihe von Potentialprofilen für verschiedene Temperaturen. Diese Profile illustrieren, wie sich das energetische Gleichgewicht in Abhängigkeit von T verändert. Bei niedrigen Temperaturen besitzt das Potential ein ausgeprägtes Minimum bei einem nicht verschwindenden $\bar{\sigma}$ -Wert, was eine stabile, kondensierte Phase beschreibt. Mit zunehmender Temperatur verschiebt sich das Minimum in Richtung kleinerer $\bar{\sigma}$ -Werte, bis es letztendlich bei höheren Temperaturen ($T = 0.58$) verschwindet, was eine Tendenz zur chiralen Symmetrienerhaltung nahelegt. Diese Darstellung verdeutlicht den Effekt der Temperaturerhöhung auf den chiralen Kondensatwert und somit auf die Phasenstruktur des Systems. Der Übergang von einer kondensierten (symmetriegebrochenen) Phase zu einer symmetrischen Phase kann durch das Verschwinden des Minimums im effektiven Potential erklärt werden. Diese in den Kurven sichtbar werdende Symmetrieänderung entspricht einem Phasenübergang vom chiralen gebrochenen Zustand in den symmetrischen Zustand.

Nach den Ehrenfestkriterien lässt sich bei Abb. 3 und Abb. 4 durch das kontinuierlich zum Ursprung wandernde Minimum der Graphen ein Phasenübergang 2. Ordnung erkennen. Die violette Kurve weist nur ein Minimum für die triviale Lösung auf, da die Ableitung keine Nullstelle aufweist. Es handelt sich hierbei um einen Phasenübergang 2. Ordnung, da sich das Minimum kontinuierlich verschiebt.

Das Phasendiagramm Aus der Minimierung des effektiven Potentials erhalten wir ein Phasendiagramm für homogene Feldkonfigurationen von $\bar{\sigma}$. Für nicht-verschwindende $\bar{\sigma}_{\min} = \bar{\Sigma}(\mu, T)$, was bevorzugt bei niedrigen Werten für T und μ realisiert wird, ist

die diskrete chirale Symmetrie des Systems gebrochen. An den Grenzen des Phasendiagramms, bei denen $\bar{\sigma}_{\min} = \bar{\Sigma}(\mu, T)$ verschwindet, wird die Symmetrie wiederhergestellt.

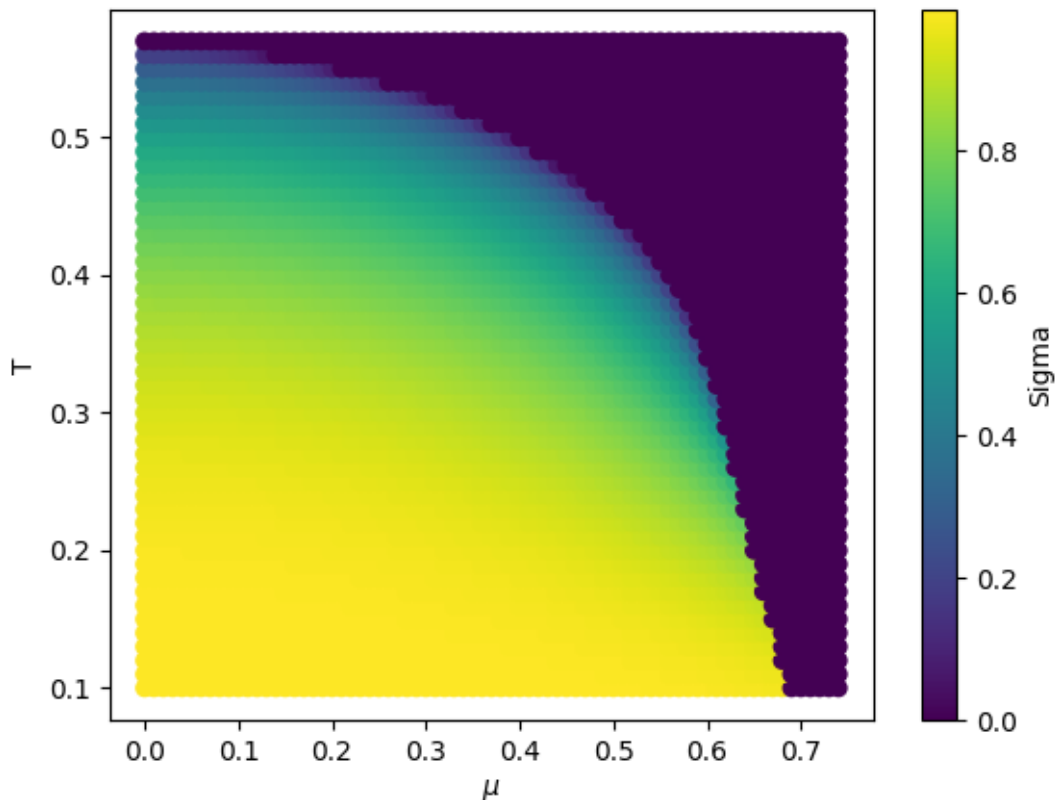


Abbildung 5: Phasendiagramm des GN-Modells in der $N \rightarrow \infty$ Näherung unter der Annahme, dass $\bar{\sigma}_{\min} = \bar{\Sigma}(\mu, T)$ räumlich konstant ist. Die Farbskala stellt die Größe des Kondensats dar, wobei die Farbintensität von dunkleren zu helleren Tönen zunimmt. Helle Bereiche repräsentieren dabei höhere Werte des Kondensats.

Durch diesen Übergang von der Analyse des effektiven Potentials hin zur Darstellung im Phasendiagramm wird das Verhalten des Systems unter verschiedenen thermodynamischen Bedingungen transparent und anschaulich dargestellt. Besonders gut lassen sich die verschiedenen Ordnungen der Phasenübergänge in Abb. 5 einsehen. Während man für feste, niedrige Temperaturen das chemische Potential erhöht, erkennt man bei einem kritischen Wert für μ , dass es einen Sprung für den Grundzustandswert $\bar{\sigma}_{\min} = \bar{\Sigma}(\mu, T)$ gibt. Dies lässt sich wie bereits erwähnt auch in Abb. 2 beobachten. Das ist der Phasenübergang 1. Ordnung. Andererseits lässt sich für niedrige, feste Werte von μ beim Erhöhen der Temperatur ein kontinuierliches Absinken von $\bar{\sigma}_{\min} = \bar{\Sigma}(\mu, T)$ beobachten, bis es bei einer kritischen Temperatur vollständig verschwindet. An diesem Verhalten erkennen wir einen Phasenübergang 2. Ordnung.

4.4.2. Thermodynamik

Abgesehen vom Minimum als Funktion von μ und T lassen sich auch thermodynamische Größen mit unserem berechneten effektiven Potential ableiten. Dies soll hier durchgeführt werden, um eine Parallele zu dem vorherigen Kapitel aufzuzeigen. Für die Herleitung der thermodynamischen Größen benutzen wir die Identität für das großkanonische Potential, siehe Ref. [14],

$$\frac{1}{V}\Omega(\mu, T, V) = U(\sigma_{\min}(\mu, T), \mu, T) - U(\bar{\Sigma}_0, 0, 0), \quad (131)$$

wobei $U(\bar{\Sigma}_0, 0, 0) = -\frac{\bar{\Sigma}_0}{4\pi}$.

Dies lässt sich direkt aus Gleichung (130) berechnen.

Druck

Der Druck lässt sich direkt aus dem großkanonischen Potential über die Identität (17),

$$p(\mu, T) = -\frac{1}{V}\Omega(\mu, T, V) = -U(\sigma_{\min}(\mu, T), \mu, T) + U(\bar{\Sigma}_0, 0, 0), \quad (132)$$

bestimmen.

Teilchenzahldichte

Die Teilchenzahl N liefert uns der Ausdruck aus Gleichung (13),

$$N(\mu, T, V) = -\frac{d}{d\mu}\Omega(\mu, T, V). \quad (133)$$

Die dazu korrespondierende Teilchenzahldichte, welche unabhängig von der Größe unseres Systems ist, lautet dann,

$$n(\mu, T) = -\frac{1}{V}\frac{d}{d\mu}\Omega(\mu, T, V) = -\frac{\partial}{\partial\mu}U(\sigma, \mu, T)\Big|_{\sigma=\sigma_{\min}} \equiv n(\sigma, \mu, T). \quad (134)$$

Explizit ausgeschrieben,

$$n(\sigma, \mu, T) = -\int_0^\infty dp (n(E_p, \mu) - n(E_p, -\mu)). \quad (135)$$

Entropiedichte

Die Ableitung des großkanonischen Potentials nach der Temperatur liefert uns den Ausdruck für die Entropie des Systems (Gleichung (11)),

$$S(\mu, T, V) = -\frac{\partial}{\partial T}\Omega(\mu, T, V). \quad (136)$$

Wieder gehen wir über zur Größe, welche unabhängig von der Systemgröße ist - die Entropiedichte,

$$s(\mu, T) = -\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial T}\Omega(\mu, T, V) = -\frac{\partial}{\partial T}U(\sigma, \mu, T)\Big|_{\sigma=\sigma_{\min}} \equiv s(\sigma, \mu, T). \quad (137)$$

Explizit ausgerechnet erhalten wir,

$$s(\sigma, \mu, T) = \int_0^\infty dp \left[\ln \left(1 + e^{-\beta(E_p + \mu)} \right) + \ln \left(1 + e^{-\beta(E_p - \mu)} \right) \right. \\ \left. + \beta((E_p + \mu)n(E_p, \mu) + (E_p - \mu)n(E_p, -\mu)) \right]. \quad (138)$$

Hierbei habe ich mich stark an Diskussion aus Ref. [15] orientiert, da ein Ziel der Arbeit die Reproduktion dieser Ergebnisse war.

5. Schlusswort

Diese Arbeit war für mich eine äußerst lehrreiche Erfahrung. Besonders mein Verständnis dafür, wie zentral Näherungsmethoden für die theoretische Physik sind, konnte ich deutlich vertiefen – insbesondere ihre Anwendung und Einordnung. Unter den zeitlichen Restriktionen der Arbeit konnten einige Aspekte jedoch nur in Ansätzen behandelt werden. Drei Aspekte erscheinen mir dabei besonders ausbaufähig:

Erstens wäre eine detailliertere Aufbereitung des Pfadintegralformalismus von Vorteil, um den Zugang zur QFT zu erleichtern.

Zweitens wäre ein Vergleich thermodynamischer Observablen, wie bspw. der Entropiedichte, für die drei verschiedenen Systeme ein interessanter, abschließender Vergleich gewesen.

Drittens ließe sich die Analyse des hergeleiteten Phasendiagramms der QFT vertiefen. In dieser Arbeit haben wir uns auf homogene Phasen beschränkt, indem wir nur homogene Feldkonfigurationen betrachtet haben. Eine Auflockerung dieser Bedingung würde den Zugang zur Untersuchung des Phasendiagramms für allgemeinere, räumlich abhängige inhomogene chirale Kondensate $\sigma(x)$ eröffnen. Das Ergebnis dieser Untersuchung würde Abb. 6 liefern. Man erkennt dort im HBP-Bereich gut das von uns hergeleitete Phasendiagramm für homogene chirale Kondensate.

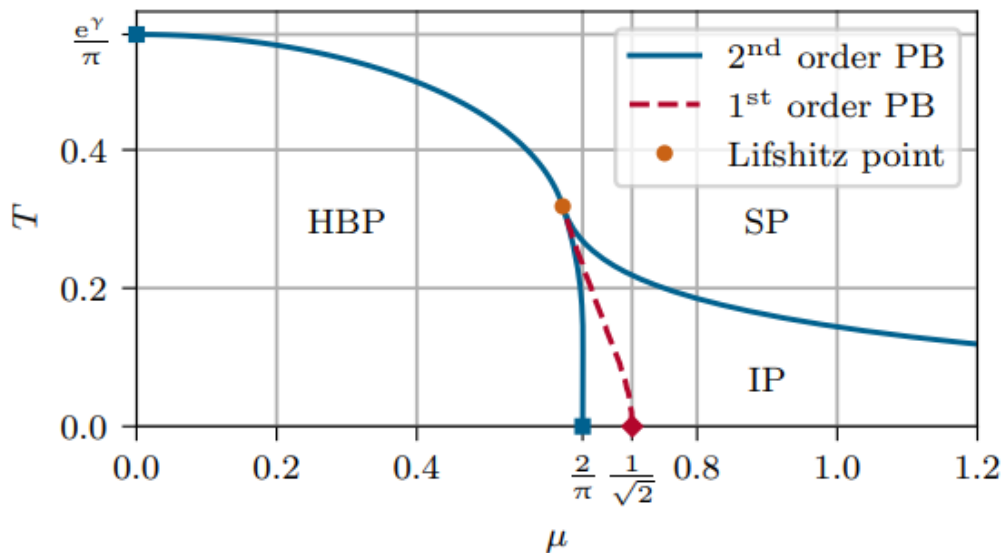


Abbildung 6: Das Phasendiagramm des GN-Modells für $N \rightarrow \infty$ [12].

Literatur

- [1] J. W. Gibbs, *Elementary principles in statistical mechanics: developed with especial reference to the rational foundations of thermodynamics*. C. Scribner's sons, 1902.
- [2] W. Greiner, L. Neise und H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Springer New York, 1995, ISBN: 9781461208273. DOI: 10.1007/978-1-4612-0827-3. Adresse: <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4612-0827-3>.
- [3] M. Kastner, "Monte Carlo methods in statistical physics: Mathematical foundations and strategies," *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Jg. 15, Nr. 6, 1589–1602, Juni 2010, ISSN: 1007-5704. DOI: 10.1016/j.cnsns.2009.06.011. Adresse: <http://dx.doi.org/10.1016/j.cnsns.2009.06.011>.
- [4] K. Binder und D. W. Heermann, "Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction," 2002. Adresse: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:60470067>.
- [5] M. Bartelmann, B. Feuerbacher, T. Krüger, D. Lüst, A. Rebhan und A. Wipf, "Störungstheorie und Virialsatz," in() *Theoretische Physik 3 — Quantenmechanik*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2018, S. 271–303, ISBN: 978-3-662-56072-3. DOI: 10.1007/978-3-662-56072-3_10. Adresse: https://doi.org/10.1007/978-3-662-56072-3_10.
- [6] A. Koenigstein, "Non-perturbative aspects of (low-dimensional) quantum field theories," Diss., Goethe U., Frankfurt (main), 2023. DOI: 10.21248/gups.74658.
- [7] G. B. Arfken und H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 6. Aufl. California: Elsevier Academic Press, 2005.
- [8] D. J. Gross und A. Neveu, "Dynamical Symmetry Breaking in Asymptotically Free Field Theories," *Phys. Rev. D*, Jg. 10, S. 3235, 1974. DOI: 10.1103/PhysRevD.10.3235.
- [9] U. Wolff, "THE PHASE DIAGRAM OF THE INFINITE N GROSS-NEVEU MODEL AT FINITE TEMPERATURE AND CHEMICAL POTENTIAL," *Phys. Lett. B*, Jg. 157, S. 303–308, 1985. DOI: 10.1016/0370-2693(85)90671-9.
- [10] J. Hubbard, "Calculation of partition functions," *Phys. Rev. Lett.*, Jg. 3, S. 77–80, 1959. DOI: 10.1103/PhysRevLett.3.77.
- [11] R. L. Stratonovich, "On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions," 1957. Adresse: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:116766197>.
- [12] M. Thies und K. Urlichs, "Revised phase diagram of the Gross-Neveu model," *Phys. Rev. D*, Jg. 67, S. 125015, 2003. DOI: 10.1103/PhysRevD.67.125015. arXiv: hep-th/0302092.
- [13] T. Matsubara, "A New Approach to Quantum-Statistical Mechanics," *Progress of Theoretical Physics*, Jg. 14, Nr. 4, S. 351–378, Okt. 1955, ISSN: 0033-068X. DOI: 10.1143/PTP.14.351. eprint: <https://academic.oup.com/ptp/article-pdf/14/4/351/5286981/14-4-351.pdf>. Adresse: <https://doi.org/10.1143/PTP.14.351>.
- [14] D. Rischke, *Statistische Feldtheorie*. Adresse: https://www.uni-frankfurt.de/65315388/Arbeitsgruppe_Dirk_Rischke.

- [15] A. Koenigstein, L. Pannullo, S. Rechenberger, M. J. Steil und M. Winstel, “Detecting inhomogeneous chiral condensation from the bosonic two-point function in the $(1 + 1)$ -dimensional Gross–Neveu model in the mean-field approximation*,” *J. Phys. A*, Jg. 55, Nr. 37, S. 375 402, 2022. DOI: 10.1088/1751-8121/ac820a. arXiv: 2112.07024 [hep-ph].
- [16] S. Lottini, O. Philipsen und M. Wagner, *Quantenfeldtheorie 2*.

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere an Eides statt durch meine eigene Unterschrift, dass ich die vorstehende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt und alle Stellen, die wörtlich oder annähernd wörtlich aus Veröffentlichungen genommen sind, als solche kenntlich gemacht habe. Die Versicherung bezieht sich auch auf in der Arbeit gelieferte Zeichnungen, Skizzen, bildliche Darstellungen und dergleichen.

Ort, Datum

Unterschrift

A. Formelsammlung und Nebenrechnung

A.1. Gamma Matrizen

Die euklidischen Gamma Matrizen in der Weyl Basis werden folgendermaßen dargestellt:

$$\gamma^1 = -\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^{ch} = i\gamma^1\gamma^2 = -\sigma_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (139)$$

Wobei hier σ_i die wohlbekanntenen Pauli-Matrizen darstellt und γ^2 mit der zeitlichen Komponente assoziiert wird.

A.2. Gauß Integral

Für ein einzelnes Gaußintegral findet man

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-cx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \quad (140)$$

Die Verallgemeinerung multidimensionaler Gaußintegrale lautet

$$\int d^N p \exp\left(\sum_{i=1}^N -cp_i^2\right) = \int d^N p \prod_{i=1}^N e^{-cp_i^2} = \prod_{i=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dp_i e^{-cp_i^2} = \left[\sqrt{\frac{\pi}{c}}\right]^N \quad (141)$$

A.3. Wick-Rotation

$$\begin{aligned} \not\partial_M &= \gamma_M^\mu \partial_{\mu,M} = \gamma_M^i \partial_{i,M} + \gamma_M^{d+1} \partial_{d+1,M} \\ &= -\gamma_M^i \partial_M^i + \gamma_M^{d+1} \partial_M^{d+1} \\ &= i\gamma_E^i \partial_E^i + i\gamma_E^{d+1} \partial_E^{d+1} = i\gamma_E^\mu \partial_{\mu,E} = i\not\partial_E. \end{aligned} \quad (142)$$

Unter Verwendung dieses Zwischenergebnisses können wir feststellen, dass die Minkowski- und die euklidische Wirkung wie folgt zusammenhängen:

$$\begin{aligned} S_M[\bar{\psi}, \psi] &= \int_{-\infty}^{\infty} d^{d+1}x_M \left[\bar{\psi} i\not\partial_M \psi + \frac{1}{2N} g^2 (\bar{\psi}\psi)^2 \right] = \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} d^{d+1}x_E \left[-\bar{\psi} \not\partial_E \psi + \frac{1}{2N} g^2 (\bar{\psi}\psi)^2 \right] = iS_E[\bar{\psi}, \psi], \end{aligned}$$

wobei die euklidische Wirkung definiert ist durch,

$$S_E[\bar{\psi}, \psi] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d^{d+1}x \left[\bar{\psi} \not\partial \psi - \frac{1}{2N} g^2 (\bar{\psi}\psi)^2 \right].$$

A.4. Volumenintegral in d Dimensionen

Für bestimmte Berechnungen in dieser Arbeit ist es notwendig, d -dimensionale Volumenintegrale zu berechnen. Wenn eine sphärische Symmetrie des Integranden vorliegt, verwenden wir üblicherweise,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d p}{(2\pi)^d} f(|\vec{p}|) = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^{\infty} dp p^{d-1} f(p), \quad (143)$$

wobei wir das Volumen der $(d-1)$ -dimensionalen Sphäre S^{d-1} definieren durch

$$\Omega_d \equiv \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2})}. \quad (144)$$

A.5. Gamma-Funktion

Zum Lösen der Integral-Ausdrücke im Erwartungswert erweist sich folgende Identität als nützlich,

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} d\rho \rho^{z-1} e^{-\rho}. \quad (145)$$

Außerdem benötigen wir die dazugehörige Rekursionsidentität,

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z). \quad (146)$$

A.6. Zwischenergebnisse aus der LNN in Kapitel 3

Es folgen Berechnungen, die für die Auswertung relevant sind.

$$f_1^{(0)}(y) = \beta k y + \frac{\beta \lambda'}{6} y^2 - \frac{1}{2} \ln(y), \quad f_1^{(1)}(y) = \beta k + \frac{\beta \lambda'}{3} y - \frac{1}{2} y^{-1} \quad (147)$$

$$f_1^{(2)}(y) = \frac{\beta \lambda'}{3} + \frac{1}{2} y^{-2}, \quad f_1^{(3)}(y) = -y^{-3} \quad (148)$$

$$f_1^{(4)}(y) = 3y^{-4} \quad (149)$$

$$f_2^{(0)}(y) = y - \frac{1}{2} \ln(y), \quad f_2^{(1)}(y) = 1 - \frac{1}{2} y^{-1} \quad (150)$$

$$f_2^{(2)}(y) = \frac{1}{2} y^{-2}, \quad f_2^{(3)}(y) = -y^{-3} \quad (151)$$

$$f_2^{(4)}(y) = 3y^{-4} \quad (152)$$

$$g^{(0)}(y) = y^{-1}, \quad g^{(1)}(y) = -y^{-2}, \quad g^{(2)}(y) = 2y^{-3} \quad (153)$$

$$f_2^{(1)}(y) = 1 - \frac{1}{2} y^{-1} = 0 \quad \rightarrow \quad y_{0,f_2} = \frac{1}{2} \quad (154)$$

$$f_2^{(0)}(y_{0,f_2}) = \frac{1}{2} [1 + \ln(2)] \quad (155)$$

$$f_2^{(2)}(y_{0,f_2}) = 2 \quad (156)$$

$$C_1[y - \frac{1}{2} \ln(y), y^{-1}] = -\frac{13}{6} \quad (157)$$

$$C_1[V(y) - \frac{1}{2}\ln(y), y^{-1}] = \tag{158}$$

$$\frac{y^{-3}}{\frac{\lambda'}{3} + \frac{1}{2}y^{-2}} \left[1 + \frac{1}{24} \frac{y^{-2}}{\left(\frac{\lambda'}{3} + \frac{1}{2}y^{-2}\right)^2} \left[-\frac{11}{2}y^{-2} - 7\lambda'\beta \right] \right]$$

Nützliche Ausdrücke zum Berechnen von den Ableitungen für F ,

$$-\frac{1}{2}\partial_T \ln\left(f_1^{(2)}\right) = -\frac{1}{2}\partial_T \left[\ln \left(\frac{\lambda'}{3T} + \left(\frac{2\lambda'}{3k + \sqrt{9k^2 + 6T\lambda'}} \right)^2 \right) \right] = \tag{159}$$

$$\frac{-6\lambda'^2 T^2 + \sqrt{6\lambda'T + 9T^2} (2k\lambda'T + 2k^3) - 21k^2\lambda'T - 18k^4}{12\lambda'^2 T^3 + 34k^2\lambda'T^2 + 24k^4 T}$$

$$\partial_T \left[\ln \left(\frac{2\lambda'}{3k + \sqrt{9k^2 + 6\lambda'T}} \right) \right] = -\frac{\lambda'}{k\sqrt{9k^2 + 6\lambda'T} + 3k^2 + 2\lambda'T} \tag{160}$$

$$-N\partial_T f_1^{(0)} = \frac{N(k+2) \left(k \left(3\sqrt{2\lambda'T} + 3k^2 + 3^{\frac{3}{2}}k \right) + \sqrt{3\lambda'T} \right)}{4\lambda'T^2\sqrt{2\lambda'T} + 3k^2} \tag{161}$$

A.7. Fourier-Transformation der fermionischen Felder

In dieser Arbeit verwenden wir in euklidischer Raumzeit folgende Konvention

$$\psi(\tau, \vec{x}) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \tilde{\psi}(\nu_n, \vec{p}) e^{+i(\nu_n\tau + px)}, \tag{162}$$

$$\tilde{\psi}(\nu_n, p) = \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} dp \psi(\tau, x) e^{-i(\nu_n\tau + px)}, \tag{163}$$

$$\bar{\psi}(\tau, x) = T \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \tilde{\bar{\psi}}(\nu_n, p) e^{-i(\nu_n\tau + px)}, \tag{164}$$

$$\tilde{\bar{\psi}}(\nu_n, p) = \int_0^{\frac{1}{T}} d\tau \int_{-\infty}^{\infty} dp \bar{\psi}(\tau, x) e^{+i(\nu_n\tau + px)}, \tag{165}$$

wobei $\nu_n = 2\pi(n + \frac{1}{2})$ die fermionische Matsubara Frequenz darstellt, welche nötig ist, damit man in der kompaktifizierten Zeitdimension antiperiodische Randbedingungen gewährleisten kann.

Im Kontext dieser Transformationen halten wir eine weitere Identität fest, welche beim Berechnen der Matsubara Frequenzen relevant wird:

$$2\pi\beta\delta_{n,m}\delta^{(2)}(p_1 - p_2) = \int_0^\beta d\tau \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\pm i((\nu_n - \nu_m)\tau + (p_1 - p_2)x)} \tag{166}$$

A.8. Nebenrechnungen: GN Modell

Für die Berechnung der Ableitung von $U(\bar{\sigma})$ können folgende Identitäten helfen,

$$\frac{dE_p}{d\bar{\sigma}} = \frac{d \left[\sqrt{p^2 + \bar{\sigma}^2} \right]}{d\bar{\sigma}} = \frac{\bar{\sigma}}{E_p} \quad (167)$$

und

$$\frac{d \left[\ln \left(1 + e^{-\beta(E_p \pm \mu)} \right) \right]}{d\bar{\sigma}} = -\frac{\bar{\sigma}}{E_p} n(E_p, \pm \mu), \quad (168)$$

wobei hier die Definition der Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion $n(E, \mu) \equiv \frac{1}{e^{\beta(E+\mu)} + 1}$ verwendet wurde.

B. Beweis der Hubbard-Stratonovich-Identität

Die Identität, die wir beweisen möchten, lautet:

$$e^{-\frac{g^2}{2N}(\bar{\psi}\psi)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-\frac{1}{2g^2}\sigma^2 + \sigma(\bar{\psi}\psi)}$$

Diese Identität nutzt die Eigenschaft von Gauß'schen Integralen. Um sie zu beweisen, beginnen wir mit dem rechten Ausdruck und zeigen, dass er äquivalent zum linken Ausdruck ist.

1. Quadratischer Term isolieren

Wir starten mit dem Gauß'schen Integral auf der rechten Seite:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma \exp \left(-\frac{1}{2g^2}\sigma^2 + \sigma(\bar{\psi}\psi) \right)$$

Zuerst kombinieren wir die Terme im Exponenten. Der Exponent besteht aus einem quadratischen Term in σ und einem linearen Term in σ . Diese können wir zu einer quadratischen Form umschreiben:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma \exp \left(-\frac{1}{2g^2} (\sigma - g^2(\bar{\psi}\psi))^2 + \frac{g^2}{2}(\bar{\psi}\psi)^2 \right)$$

Das heißt, wir haben den Exponenten in zwei Teile aufgeteilt: - Einen quadratischen Term in σ , $-\frac{1}{2g^2} (\sigma - g^2(\bar{\psi}\psi))^2$ - Einen konstanten Term $\frac{g^2}{2}(\bar{\psi}\psi)^2$, der unabhängig von σ ist.

2. Gauß'sche Integration

Nun führen wir das Gauß'sche Integral über σ durch. Da wir σ um einen konstanten Term verschoben haben, bleibt das Integral das gleiche wie ein gewöhnliches Gauß'sches Integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-\frac{1}{2g^2}(\sigma - g^2(\bar{\psi}\psi))^2} = \sqrt{2\pi g^2}$$

Dieser Faktor $\sqrt{2\pi g^2}$ kommt aus der Gauß'schen Integration, bei der der Vorfaktor vor σ^2 im Exponenten $\frac{1}{2g^2}$ ist.

3. Zusammensetzen des Ergebnisses

Jetzt setzen wir das Ergebnis des Gauß'schen Integrals in den Ausdruck ein. Was bleibt, ist der konstante Term $\frac{g^2}{2}(\bar{\psi}\psi)^2$, der ursprünglich aus dem Exponenten herausgezogen wurde:

$$I = \sqrt{2\pi g^2} e^{\frac{g^2}{2}(\bar{\psi}\psi)^2}$$

Um die ursprüngliche Identität zu erhalten, müssen wir diesen Faktor $\sqrt{2\pi g^2}$ in die Normierung des Pfadintegrals einbeziehen. Da dieser Faktor eine Konstante ist, die in der Quantenfeldtheorie häufig weggelassen oder in die Definition des Pfadintegrals aufgenommen wird, erhalten wir den gewünschten Ausdruck:

$$e^{-\frac{g^2}{2N}(\bar{\psi}\psi)^2} = \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma e^{-\frac{1}{2g^2}\sigma^2 + \sigma(\bar{\psi}\psi)}$$

4. Schlussfolgerung

Der Beweis zeigt, dass durch die Hubbard-Stratonovich-Transformation (bzw. den Gaussian Shift) der komplizierte Vier-Fermionen-Term $(\bar{\psi}\psi)^2$ durch die Einführung eines bosonischen Feldes σ vereinfacht wird. Diese Transformation ist besonders nützlich in der Quantenfeldtheorie, weil sie es erlaubt, komplizierte fermionische Wechselwirkungen in eine einfachere bilineare Kopplung an ein bosonisches Feld zu überführen.

Die Konstante $\sqrt{2\pi g^2}$, die bei der Integration auftritt, wird oft ignoriert oder in die Normierung des Pfadintegrals aufgenommen, weshalb die Gleichung ohne diesen Vorfaktor dargestellt wird.

C. Pfadintegration über Grassmanwertige Zahlen

Hierbei handelt es sich nicht um meine eigene Arbeit. Diese Herleitung wurde aus [16], Kapitel 5.2, übernommen.

Pfadintegralausdrücke erfordern in der Regel die Berechnung von Gauß-Integralen. Für die Behandlung von Fermionen im Pfadintegralformalismus sind also Gauß-Integrale mit Grassmann-Variablen zu lösen.

$\psi_j = a_j + ib_j$ bezeichnen im Folgenden komplexe Grassmann-Variablen, d.h. a_j und b_j sind reelle Grassmann-Variablen.

Das Ziel ist es, folgenden Ausdruck zu berechnen,

$$\int \left(\prod_j da_j db_j \right) e^{-\psi_k^* A_{kl} \psi_l} \equiv \int \left(\prod_j da_j db_j \right) e^{-(a-ib)_k A_{kl} (a+ib)_l}, \quad (169)$$

wobei A eine hermitesche Matrix ist.

1-dimensionale Version:

$$\int da db e^{-(a-ib)A(a+ib)} = \int da db (1 - 2iaAb) = 2iA, \quad (170)$$

wobei die Exponentialfunktion über ihre Potenzreihenentwicklung definiert ist und diese wegen der Grassmann-Variablen nach der 1. Ordnung endet.

n-dimensionale Erweiterung, $A = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$:

$$\int \left(\prod_j da_j db_j \right) e^{-(a-ib)_k A_{kl} (a+ib)_l} = \prod_j \int da_j db_j (1 - 2ia_j \lambda_j b_j) = (2i)^n \prod_j \lambda_j. \quad (171)$$

Eine hermitesche Matrix A kann durch eine unitäre Koordinatentransformation U diagonalisiert werden,

$$\begin{aligned} (a-ib)_j A_{jk} (a+ib)_k &= \left((a-ib)U^\dagger \right)_j \left(UAU^\dagger \right)_{jk} \left(U(a+ib) \right)_k \\ &= \left((a-ib)U^\dagger \right)_j \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)_{jk} \left(U(a+ib) \right)_k, \end{aligned} \quad (172)$$

wobei λ_j die Eigenwerte von A sind; unitäre Koordinatentransformationen ändern das Integrationsmaß nicht, also

$$\begin{aligned} \int \left(\prod_j da_j db_j \right) e^{-\psi_k^* A_{kl} \psi_l} &= \int \left(\prod_j d\tilde{a}_j d\tilde{b}_j \right) e^{-(\tilde{a}-i\tilde{b})_k \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)_{kl} (\tilde{a}+i\tilde{b})_l} \\ &= (2i)^n \prod_j \lambda_j = (2i)^n \det(A). \end{aligned} \quad (173)$$

Unter Berücksichtigung der Summation der Fermispezies also:

$$\int \left(\prod_j^N da_j db_j \right) e^{-\sum_j \psi_{k,j}^* A_{kl} \psi_{l,j}} = \int \left(\prod_j^N da_j db_j \right) \prod_j^N e^{-\psi_{k,j}^* A_{kl} \psi_{l,j}} \quad (174)$$

$$= \prod_j^N \int da_j db_j e^{-\psi_{k,j}^* A_{kl} \psi_{l,j}} \quad (175)$$

$$= \text{Det}(Q)^N \quad (176)$$