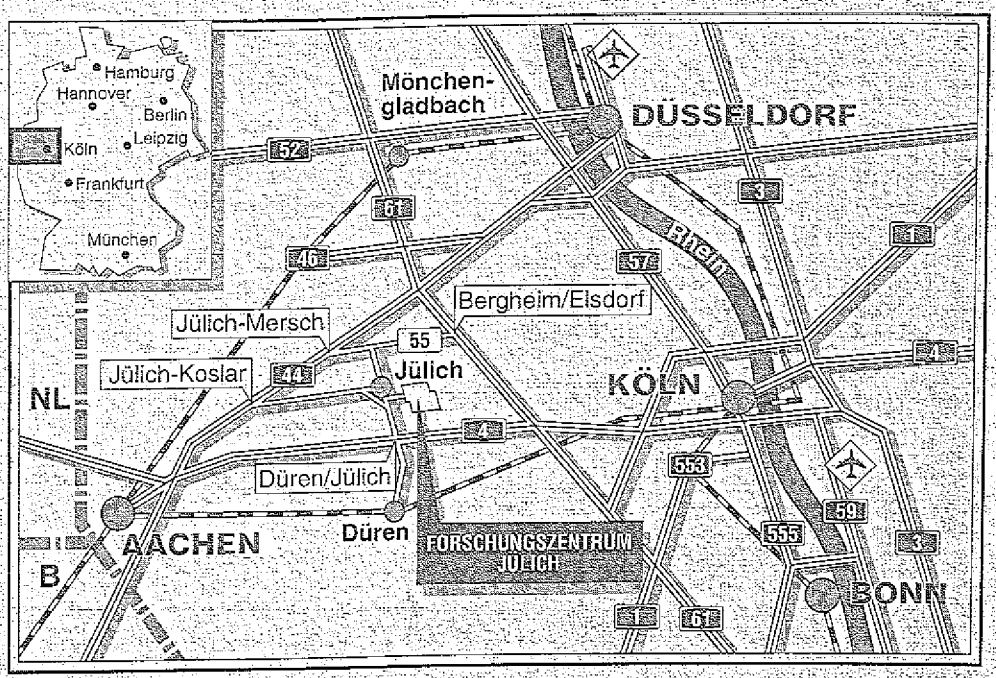
FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH KFA

Institut für Festkörperforschung

Kritisches Verhalten in der Nähe von symmetriebrechenden Oberflächen und der Spannungstensor

Michael Stapper



Berichte des Forschungszentrums Jülich ; 3096
ISSN 0944-2952
Institut für Festkörperforschung Jül-3096
D 61 (Diss. Universität Düsseldorf)

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland
Telefon: 02461/61-6102 · Telefax: 02461/61-6103 · Telex: 833556-70 kfa d

Kritisches Verhalten in der Nähe von symmetriebrechenden Oberflächen und der Spannungstensor

Michael Stapper

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung und Überblick

1.1 Einleitung

1.1.1 Allgemeine Bemerkungen

Diese Arbeit untersucht das kritische Verhalten begrenzter Systeme [1, 2]. Kritisches Verhalten ist durch eine große Korrelationslänge ξ gekennzeichnet, die am kritischen Punkt des Volumen (kPV) divergiert. Das System fühlt dadurch den Einfluß von Begrenzungen auch tief im Volumen, wodurch sich die kritischen Eigenschaften qualitativ gegenüber dem entsprechenden unbegrenzten System unterscheiden. Die Berechnung von System-Eigenschaften wird jedoch durch die Begrenzungen erheblich kompliziert, da die Translationsinvarianz gebrochen ist. Charakteristische Eigenschaften sind Skalenfunktionen, Amplitudenverhältnisse und kritische Exponenten, die das kritische Verhalten von Systemgrößen, wie z.B. der Ordnungsparameterdichte, kurz als Ordnungsparameter (OP) bezeichnet, und der OP-Korrelationsfunktion beschreiben.

Ein Beispiel ist ein ferromagnetisches Halbraum-System mit kurzreichweitiger Wechselwirkung, wie z.B. das "Ising-Modell" [2], mit einer planaren Oberfläche bei $z = 0$ (siehe Abb. 1.1). Der lokale OP nahe dem kPV ist dann die Magnetisierung $m = \langle\Phi\rangle$, deren leitendes singuläres Verhalten die Form

$$m(z,t) = t^{\beta} A_{\pm}(z/\xi_{\pm}) \tag{1.1a}$$

hat. Hier ist $t \sim T - T_{cb}$ die Abweichung von der Übergangstemperatur des unbegrenzten Systems. $\xi_{\pm} \sim \mid t \mid^{-\nu}$ ist die Volumen-Korrelationslänge, mit der Bezeichnung $+$ $(-)$ für $T > T_{cb}$ $(T < T_{cb})$. Die Gleichung gilt nur, wenn $z >>$ mikroskopische Abstände [2] ist. Es gibt verschiedene Oberflächenuniversalitätsklassen, siehe Abbildung 1.2 und die Diskussion weiter unten: Die Skalenfunktion $A_{\pm}$ verhält sich z.B. nahe am außergewöhnlichen Übergang (EX) im Volumen- $(z/\xi_{\pm} \gg 1)$ und Oberflächengrenzfall $(z/\xi_{\pm} \ll 1)$ wie

$$A_{\pm}(\mathcal{Z}) = \begin{cases} const_{\pm} & \text{für} \quad \mathcal{Z} >> 1 \\ const\, \mathcal{Z}^{-x_{\Phi}}[1 + const'_{\pm}\mathcal{Z}^{x_{\Phi}^{(s)}} + \cdots] & \text{für} \quad \mathcal{Z} << 1 \end{cases}, \tag{1.1b}$$

hier ist $x_\Phi = \beta/\nu$ der "Volumen-" und $x_\Phi^{(s)}$ der "Oberflächenexponent" des OP's [2]. Dieses Beispiel zeigt, daß selbst bei großem festen Abstand z das "Volumen" die Oberfläche fühlt, wenn nur t hinreichend klein wird, denn dann ist $m - [m]_{t=0} \sim t^{x_\Phi^{(s)}\nu}$.

Die OP-Korrelationsfunktion $\langle\Phi\Phi\rangle - \langle\Phi\rangle\langle\Phi\rangle$ genau am kritischen Fixpunkt, hat die Skalenform

$$K(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{2x_\Phi}} B\left(\frac{z_1 z_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2}\right) \quad , \tag{1.2a}$$

mit $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, z_1, z_2 >>$ mikroskopische Längen und x_Φ aus (1.1b). Hier ist $\mathbf{r}_1 \equiv (r_{\|1}, z_1)$ und $\mathbf{r}_2 \equiv (r_{\|2}, z_2)$. Die Skalenfunktion B hängt nur von *einer* Variablen $\zeta^2 \equiv z_1 z_2 / |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2$ ab, wegen der Konformen Invarianz am kritischen Fixpunkt [3, 4], siehe auch Kapitel III. Die übliche Skalentheorie würde dagegen eine Abhängigkeit von ζ^2 *und* einem weiteren Längenverhältnis z_1/z_2 zulassen. Ähnlich wie in (1.1b) sind die beiden Grenzwerte

$$B(\zeta^2) \sim \begin{cases} const & \text{für} \quad \zeta^2 >> 1 \\ \zeta^{-2(x_\Phi - x_\Phi^{(s)})} & \text{für} \quad \zeta^2 << 1 \end{cases} \quad . \tag{1.2b}$$

Dies bedeutet, wenn nur die Abstände z_1, z_2 (vergl. Abb. 1.1) von der Oberfläche fest sind und $|r_{\|1} - r_{\|2}|$ nach (1.2b) "hinreichend" groß ist, wird die OP-Korrelation $\sim |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-2x_\Phi^{(s)}}$ also von einem Oberflächenexponenten $x_\Phi^{(s)} \neq x_\Phi$ bestimmt.

Eine Besonderheit kritischer System am kritischen Fixpunkt ist die Detailunabhängigkeit der Skalenfunktionen, Amplitudenverhältnisse und kritischen Exponenten. Das heißt, diese Größen hängen von mikroskopischen Details, wie z.B. vom Gittertyp, der Gitterkonstante a, von Details der Wechselwirkung etc. *nicht* ab, sondern nur von qualitativen Größen wie z.B. der Raumdimension d, der Anzahl der Komponenten des OP's, dem Typ der Wechselwirkung (kurz- oder langreichweitig [2]) und dem Einfluß von Begrenzungen. Diese Detailunabhängigkeit wird als Universalität bezeichnet. Dadurch ist es möglich, kritisches Verhalten in sogenannte Universalitätsklassen einzuteilen. Für das Vorhersagen von makroskopischen Systemgrößen genügt es daher, das am bequemsten handhabbare Modell zu benutzen. So wird z.B. für Computer-Simulationen das Gitter- und für analytische Rechnungen das Kontinuumsmodell benutzt.

Der Einfluß von Begrenzungen ändert das kritische Verhalten: Es zeigt sich, daß eine Volumenuniversalitätsklasse in mehrere Oberflächenuniversalitätsklassen aufspalten kann. Die Oberflächenuniversalitätsklasse hängt von der Volumenuniversalitätsklasse und einigen wenigen qualitativen Oberflächeneigenschaften ab. Charakteristisch für die Oberfläche ist, ob diese am kPV (bei T_{cb}) die Ordnung des "Volumens" schwächt oder verstärkt. Die Oberflächenuniversalitätsklasse (der Oberflächenübergang) wird daher über den Ordnungsgrad der Oberfläche am kPV mit $T = T_{cb}$ definiert, ist diese ungeordnet oder geordnet, wird dies als *gewöhnlicher* (O) oder *außergewöhnlicher* Übergang (EX) bezeichnet. Wenn die Oberfläche und das

"Volumen" gleichzeitig kritisch sind[1], wird dies als *spezieller* oder *multikritischer* Übergang (SB) bezeichnet, siehe Abb. 1.2. Der außergewöhnliche Übergang liegt bei hinreichend starker Kopplung zwischen den Oberflächenspins vor und impliziert bei einer Temperatur $T_{cs} > T_{cb}$ den Oberflächenübergang (S), der aber ein $(d-1)$ dimensionaler Volumenübergang ist, vergl. Abb. 1.2. Die untere kritische Dimension dafür ist $(d-1)^* = 1$, unterhalb der die $d-1$ dimensionale Oberfläche für sich nicht bei einer endlichen Temperatur ordnen kann. Für das Auftreten eines außergewöhnlichen und speziellen Übergangs muß daher die Dimension d größer als zwei sein. Der Oberflächenübergang S ist *nicht* Gegenstand dieser Arbeit, daher wird auf eine weitere Erläuterung verzichtet. Eine ausführliche Darlegung aller Übergänge findet sich z.B. in dem Übersichtsartikel von H.W. Diehl [2].

Die Oberflächenübergänge lassen sich genauer am Beispiel des schon erwähnten Ising-Modells mit ferromagnetischer nächster Nachbar-Wechselwirkung auf einem Halbraum-Gitter erläutern:

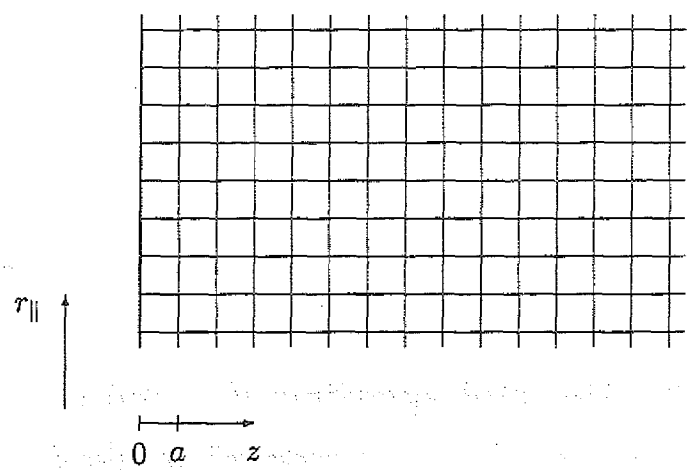


Abbildung 1.1: Ising-Modell auf einem hyperkubischen d dimensionalen Halbraum-Gitter mit Gitterkonstante a. Die planare Oberfläche liegt bei $z = 0$.

Wegen der Universalität genügt es den einfachsten Fall zu betrachten, wo zwischen den nächsten Nachbar-Spins in allen Schichten $z \geq a$ die reduzierte Volumenkopplung $k = j/k_BT$, und nur in der Schicht $z = 0$ die reduzierte Oberflächenkopplung $k_1 = j_1/k_BT$ ist. Damit ein spezieller Übergang auftritt, muß die reduzierte Oberflächenkopplung $[k_1]_{SB}$ die Relation erfüllen [2]:

$$k_c(d) \leq [k_1]_{SB} \leq k_c(d-1) \quad , \tag{1.3}$$

mit der reduzierten kritischen Volumenkopplung in d Dimensionen $k_c(d)$. Der rechte Teil der Ungleichung ergibt sich daraus, daß der anhängende gleichzeitig ordnende Halbraum die Ordnung der Oberfläche unterstützt.

[1] Das bedeutet die Oberflächensuszeptibilität $\chi_{11} \to \infty$ *und* die Volumensuszeptibilität $\chi_b \to \infty$, vergl. Ref. [2].

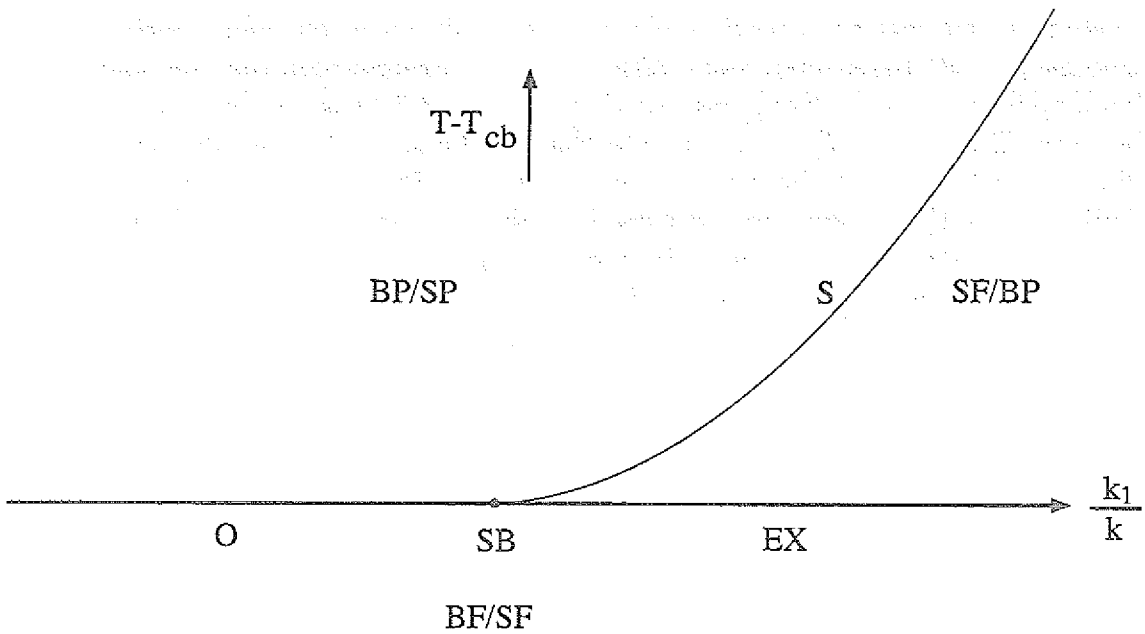


Abbildung 1.2: Phasendiagramm eines Ising-Modells auf einem Halbraum-Gitter in $d > 2$ Dimensionen. Alle Magnetfelder sind null, $h = h_1 = 0$.

In dieser Arbeit untersuchen wir den außergewöhnlichen Übergang eines Landau-Ginzburg-Modells (Kapitel II) mit einem *einkomponentigen* OP-Feld, vergl. die Abbn. 1.1 und 1.2, das zur Ising-Universalitätsklasse gehört.

1.1.2 Der außergewöhnliche und der normale Übergang

Charakteristisch für den *außergewöhnlichen Übergang* [5, 6] ist das Einsetzen der Volumenordnung bei einer bereits spontan geordneten Oberfläche. Er wird im Ising-Modell durch das Verhältnis der Kopplungen $k_1/k > [k_1/k]_{SB}$ und Magnetfelder null beschrieben, siehe Abb. 1.2.

Von größerem praktischen (experimentellen) Interesse ist der sogenannte *normale Übergang* [7], der auch durch die beginnende Volumenordnung, bei einer bereits geordneten Oberfläche charakterisiert ist. In diesem Fall erfolgte die Ordnung der Oberfläche aber nicht spontan, sondern durch ein Oberflächenmagnetfeld h_1 bezogen auf k_BT. Im Ising-Modell wird dieser Übergang daher durch $h_1 \neq 0$ und beliebiges (k_1/k) klassifiziert. Der normale Übergang beschreibt durch die Ising-Gittergas-Äquivalenz [2], das kritische Verhalten von Flüssigkeiten. Hierbei bedeutet "Spin hoch" z.B. die Besetzung und "Spin runter" die Nichtbesetzung eines Gitterplatzes mit einem Flüssigkeitsmolekül. Bei binären Flüssigkeitsmischungen [2, 8, 9] entspricht z.B. "Spin hoch" und "Spin runter" einer Besetzung mit der Sorte A und B der Flüssigkeitsmoleküle. Das reduzierte Oberflächenmagnetfeld h_1 beschreibt die Wechselwirkung der Moleküle mit der Behälterwand: h_1 ist die Differenz aus dem chemischen Potentialunterschied $\mu_A - \mu_B$ an der Wand und im kritischen Volumen

bezogen auf k_BT. Das nichtverschwindende h_1 bewirkt die Bevorzugung einer Molekülsorte durch die Wand, so daß es am Entmischungspunkt der Flüssigkeit zur kritischen Adsorption (Überschußbildung) dieser Sorte kommt [2]. Beim Gas-Flüssig-Übergang tritt μ_B nicht auf (nur eine Molekülsorte). Ist die Wechselwirkung der Moleküle mit der Wand attraktiv oder repulsiv, wird die flüssige oder gasförmige Phase am kritischen Punkt adsorbiert.

Bray und Moore [6] entwickelten die Vorstellung, daß der normale und der außergewöhnliche Übergang äquivalent sind. Ihr plausibles Argument ist, daß in beiden Fällen das Volumen in Anwesenheit einer bereits geordneten Oberfläche ordnet und es für das asymptotische kritische Verhalten (wahrscheinlich) unerheblich ist, ob die Ordnung der Oberfläche durch ein Oberflächenmagnetfeld oder spontan erfolgte. Diese Vermutung ist von Burkhardt und Diehl [7] unlängst für die Ising-Universalitätsklasse bewiesen worden.

Ausgangspunkt ihres Argumentes [7] ist das bereits in Abb. 1.1 eingeführte hyperkubische d dimensionale Halbraum-Gitter mit Ising-Spins und reduzierter ferromagnetischer nächster Nachbar-Wechselwirkung k im Volumen, k_1 an der Oberfläche und Magnetfelder null (außer zur Erzeugung eines geordneten Zustandes, siehe unten). Die Beweisidee [7] ist: den außergewöhnlichen auf den normalen Übergang abzubilden, wie wir im folgenden kurz skizzieren. Die Spins σ der ersten Oberflächenschicht sind durch die Oberflächenkopplung $k_1 > [k_1]_{SB}$ spontan geordnet, und wirken auf die zweite Schicht als effektives Oberflächenmagnetfeld. Die Abbildung erfolgt durch die Aussummation der Oberflächenspins aus der Zustandssumme, so daß die "neuen" Oberflächenspins einem effektiven Oberflächenmagnetfeld ausgesetzt sind.

Die Oberfläche wird mit S bezeichnet, der übrige Halbraum mit S_C und die Spins in S und S_C mit σ und s. Der außergewöhnliche Ausgangs-Hamiltonian mit Oberflächenmagnetfeld $h_1=0$ und $k_1>[k_1]_{SB}$ ist dann

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}(s,\sigma) &= \mathcal{H}_d(s) + \mathcal{H}_{d-1}(\sigma) + \mathcal{H}_{int}(s,\sigma) \\
\mathcal{H}_d(s) &= -k \sum_{<i,j>\subset S_C} s_i s_j \\
\mathcal{H}_{d-1}(\sigma) &= -k_1 \sum_{<i,j>\subset S} \sigma_i \sigma_j \\
\mathcal{H}_{int}(s,\sigma) &= -k \sum_{<i,j>\subset S\times S_C} s_i \sigma_j \quad ,
\end{aligned} \tag{1.4a}$$

wobei $< i,j >$ ein Paar nächster Nachbar-Spins bezeichnet. [Zur Präparation eines geordneten Zustands müssen wir zu $\mathcal{H}(s,\sigma)$ noch einen Magnetfeldterm $-h\sum\sigma_i - h\sum s_j$ mit $h>0$ addieren und das Magnetfeld nach dem thermodynamischen Limes gegen 0^+ schicken.]

Burkhardt und Diehl generieren nun einen effektiven Hamiltonian $\mathcal{H}_{eff}$ des Systems in S_C. Durch Heraussummation der Oberflächenspins σ aus der Zustandssum-

me ergibt sich

$$\mathrm{e}^{-\mathcal{H}_{eff}(s)} = \mathrm{e}^{-\mathcal{H}_d(s)} \left\langle \mathrm{e}^{-\mathcal{H}_{int}(s,\sigma)} \right\rangle_{\mathcal{H}_{d-1}} \mathrm{Sp}_\sigma \, \mathrm{e}^{-\mathcal{H}_{d-1}(\sigma)} \quad . \tag{1.4b}$$

Wegen der Universalität genügt es den Fall $k_1 \gg k_c(d-1) > [k_1(d)]_{SB}$ zu betrachten. Es folgt dann aus (1.4b)

$$\mathcal{H}_{eff}(s) = \mathcal{F}_{d-1}(k_1) - \ln \left\langle \mathrm{e}^{-\mathcal{H}_{int}(s,\sigma)} \right\rangle_{\mathcal{H}_{d-1}} + \mathcal{H}_d(s) \quad , \tag{1.4c}$$

mit der am kPV regulären freien Energie $\mathcal{F}_{d-1}(k_1)$. Wegen der Vereinfachung ($k_1 \to \infty$) selektiert die Konfigurationswahrscheinlichkeit $\sim \exp\left[-\mathcal{H}_{d-1}(\sigma)\right]$ im Mittelwert in (1.4c) nur den Zustand heraus, indem alle Spins σ parallel sind. Somit ist (wegen $h = 0^+$)

$$-\ln \left\langle \mathrm{e}^{-\mathcal{H}_{int}(s,\sigma)} \right\rangle_{\mathcal{H}_{d-1}} = -k \sum_{i'} s_{i'} \quad . \tag{1.4d}$$

Die Summe läuft nur über die Spins s aus der Oberflächenschicht von S_C. Der Hamiltonian (1.4c) modelliert also einen *normalen* Übergang.

Bei Benutzung eines Kontinuumsmodells ist die *asymptotische* Äquivalenz von außergewöhnlichen und normalen Übergang unmittelbar einsichtig: die in der Fluktuationsentwicklung vorkommenden Bausteine, die Magnetisierung in leitender Ordnung und der gaußsche Propagator, sind nämlich identisch für die beiden asymptotischen Fälle ($k_1 \to \infty$, $h_1 = 0$) und ($k_1 \to \infty \mathrm{sign}(k_1 - [k_1]_{SB})$, $h_1 \to \infty$) (siehe Abb. 1.2). Dies wird im II. Kapitel bei der Erläuterung des in dieser Arbeit verwendeten Kontinuumsmodells und der daraus folgenden Zustandsgleichung sichtbar.

Im folgenden bezeichnen wir die symmetriebrechende (außergewöhnliche oder normale) Oberfläche stets mit EX. Der EX-Übergang hat die Besonderheit, daß die kritischen Oberflächenexponenten des OP's Φ und der Energiedichteabweichung $\mathcal{E}$ vom kritischen Volumenwert[2] (im folgenden immer einfach als Energiedichte bezeichnet) also die Exponenten der entsprechenden Oberflächengrößen m_1 und $\langle \mathcal{E}_1 \rangle$, *nicht* von der Volumenuniversalitätsklasse abhängen, sondern gleich der Raumdimension d sind [7, 10]:

$$\left[x_\Phi^{(s)}\right]_{EX} = d \tag{1.5a}$$

$$\left[x_\mathcal{E}^{(s)}\right]_{EX} = d \quad . \tag{1.5b}$$

Das Gleiche gilt am gewöhnlichen Übergang (O) jedoch nur für die Energiedichte [7, 10, 11, 12, 13]:

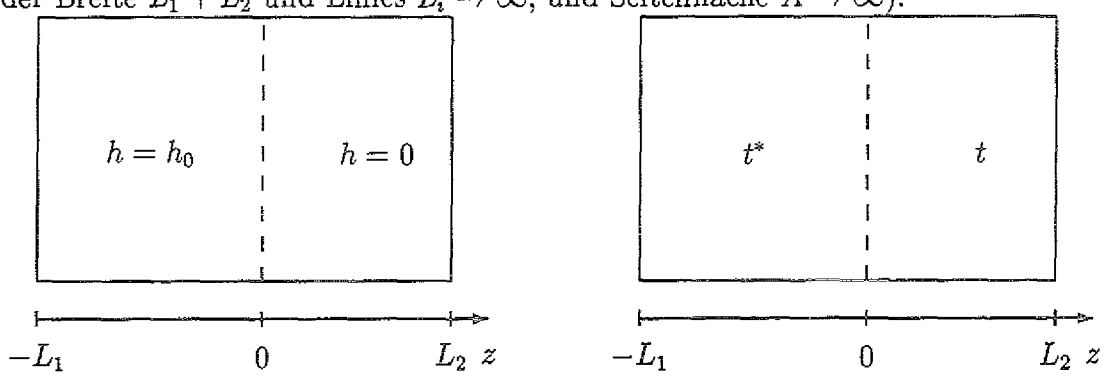
$$\left[x_\mathcal{E}^{(s)}\right]_O = d \quad . \tag{1.5c}$$

[2]Im unbegrenzten Volumen am kritischen Punkt ist der thermische Mittelwert des OP's aus Symmetriegründen null, aber der Energiedichte-Mittelwert nur in Dimensionsregularisierung, vergl. (B.7a).

Die Oberflächenexponenten $\left[x_{\Phi}^{(s)}\right]_O$ sowie $\left[x_{\Phi}^{(s)}\right]_{SB}$ und $\left[x_{\varepsilon}^{(s)}\right]_{SB}$ des speziellen Übergangs (SB) haben nichttriviale Werte und hängen von der Volumenuniversalitätsklasse ab [2]. Die Relationen (1.5) lassen sich für ein d dimensionales Spin-System im Halbraum mit einem einfachen Argument [7, 10] erklären. Im folgenden wird das Burkhardt und Diehl Argument [7] für die Ising-Universalitätsklasse kurz skizziert.

Ausgangspunkt ist das einkomponentige Landau-Ginzburg-Modell (II. Kapitel, Gl. (2.1)) einer d dimensionalen Film-Geometrie mit $-L_1 \leq z \leq L_2$ und Limes $L_i \to \infty$, das bei $z = 0$ durch eine Grenzfläche mit Inhalt $A \to \infty$ in zwei Teilbereiche zerlegt wird (Abb. 1.3):

Abbildung 1.3: d dimensionales System mit Grenzfläche bei $z = 0$ (Film-Geometrie der Breite $L_1 + L_2$ und Limes $L_i \to \infty$, und Seitenfläche $A \to \infty$).



1.3a: $h(z) = h_0\theta(-z)$ und $t(z) = const.$ 1.3b: $h(z) = 0$ und $t(z) = t^*\theta(-z) + t\theta(z)$.

(i) Das gesamte System (Abb. 1.3a) habe die reduzierte Temperatur $t \sim T - T_{cb}$. Im Bereich $z < 0$ ist ein homogenes Magnetfeld $h(z) = h_0\theta(-z)$ angelegt. Der Halbraum mit $h = h_0$ erzeugt somit eine endliche Magnetisierung der Grenzfläche bei $z = 0$ und bleibt für $t \to 0$ *unkritisch*. Der Halbraum mit $h = 0$ dagegen hat für sich bei $t = 0$ einen *kritischen* Punkt einsetzender spontaner Ordnung. Er fühlt den anderen Halbraum nur über die geordnete Grenzfläche. Da dieser Übergang in Anwesenheit einer bereits geordneten Oberfläche stattfindet, läßt er sich als normaler und wegen der Äquivalenz von normalem und außergewöhnlichem Übergang als EX-Übergang identifizieren. Wir werden nun die Magnetisierung der Grenzfläche dieses Film-Modells berechnen (und damit die Oberflächenmagnetisierung m_1 des EX-Übergangs).

Wir betrachten dazu eine infinitesimale Verschiebung der Grenzfläche um δL in den Bereich mit $h = 0$. Dies kostet die magnetische freie Energie $\delta\mathcal{F}$, aufgrund der Änderung des Hamiltonians

$$\delta\mathcal{H} = h_0 \int_0^{\delta L} dz \int d^{d-1}r_{\parallel}\, \Phi(r_{\parallel}, z) \quad . \tag{1.6a}$$

Die (reduzierte) freie Energie des Gesamtsystems hat im thermodynamischen Limes

$L_i \to \infty$ und $A \to \infty$ die (geometrische) Zerlegung

$$\mathcal{F} = A\left[L_1 f_b(t,h) + L_2 f_b(t,0) + f_i(t,h) + f_s(t,h) + f_s(t,0)\right] + \cdots \quad , \tag{1.6b}$$

mit der Querschnittsfläche A. Die ersten beiden Terme sind die Volumenbeiträge der Bereiche mit $h = h_0$ und $h = 0$. Die drei nachfolgenden Terme bezeichnen die (reduzierte) freie Energie der Grenzfläche bei $z = 0$ und der Oberflächen bei $z = -L_1$ und $z = L_2$. Die Punkte bedeuten Korrekturen aufgrund der endlichen Systemgröße, die aber für $t \to 0$ weniger singulär sind. Die Verschiebung der Grenzfläche um δL in den Bereich mit $h = 0$ (Abb. 1.3a) vergrößert den Bereich mit $h = h_0$ um $A\delta L$, um den der Bereich mit $h = 0$ entsprechend verkleinert wird. Die Änderung der reduzierten freien Energie ergibt sich aus (1.6b) zu

$$\delta\mathcal{F} = A\delta L\left[f_b(t,h) - f_b(t,0)\right] + \cdots \quad . \tag{1.6c}$$

Andererseits kann man $\delta\mathcal{F}$ durch $\delta\mathcal{H}$ aus (1.6a) ausdrücken als

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{F} &= -\ln\left\langle e^{-\delta\mathcal{H}}\right\rangle \\ &= A\left(h_0 \int_0^{\delta L} dz\,\langle\Phi\rangle + O\left[(\delta L)^2\right]\right) \quad . \end{aligned} \tag{1.6d}$$

Mit der Grenzflächenmagnetisierungsdichte $m_1 \equiv \left\langle\Phi(r_\parallel, 0)\right\rangle$ folgt aus (1.6c) und (1.6d) im Limes $\delta L \to 0$ das Resultat

$$h_0 m_1 = -f_b(t,0) + f_b(t,h) \quad . \tag{1.6e}$$

Da $f_b(t, h \neq 0)$ regulär ist, wird die z.B. aus (1.1) folgende leitende (thermische) Singularität $m_1 \sim t^{x_\Phi^{(s)}\nu}$ von $f_b(t \to 0, 0)$ bestimmt. Daher hat m_1 den gleichen kritischen Exponenten $2 - \alpha$ und das gleiche universelle Verhältnis der Amplituden B_+/B_- ober- und unterhalb T_{cb}, wie der leitende singuläre Anteil der freien Energie pro Volumen: $[f_{b,\pm}]_{LS} \sim B_\pm\,|t|^{2-\alpha}$. Mit der Hyperskalengleichung $2 - \alpha = d\nu$ folgt damit $x_\Phi^{(s)} = d$. Aufgrund der schon anfangs erklärten Grenzflächen-EX-Äquivalenz beschreibt Gleichung (1.6e) das kritische Verhalten der Oberflächenmagnetisierung $[m_{1,\pm}]_{LS} \sim [f_{b,\pm}]_{LS}$ für den EX-Übergang.

(ii) Ähnlich läßt sich zeigen, daß auch die Oberflächenenergiedichte am EX- und O-Übergang das gleiche leitende singuläre Verhalten (LS) wie die freie Energie pro Volumen hat. Dazu betrachten wir entsprechend eine *thermische* Störung des kritischen Systems (Abb. 1.3b), d.h. zwei verschiedene Temperaturen t und t^* in den Halbräumen $z > 0$ und $z < 0$.

Zur Charakterisierung des O-Verhaltens, wählen wir für den Halbraum $z < 0$ die konstante Temperatur $t^* > 0$. Dieser Halbraum und die Grenzfläche bei $z = 0$ sind dann *ungeordnet*. Im Limes $t \to 0$ ordnet der an der Grenzfläche anhängende Halbraum $z > 0$. Er nimmt den ungeordneten Halbraum $z < 0$ nur über die Grenzfläche

wahr, die damit einer ungeordneten Oberfläche entspricht. Der "Grenzflächen-" und O-Übergang sind damit für $t^* > 0$ äquivalent.

Zur Repräsentierung des EX-Verhaltens, wählen wir entsprechend $t^* < 0$. Der Halbraum $z < 0$ und die Grenzfläche $z = 0$ sind dann *geordnet*. Der "Grenzflächen-Übergang" des Teilsystens $z > 0$ ist für $t \to 0$ nun dem EX-Übergang äquivalent. Eine Verschiebung der Grenzfläche um δL und eine ähnliche Betrachtung der (reduzierten) freien Energie Änderung ergibt dann in beiden Fällen:

$$(t^* - t)\,\mathcal{E}_1 = f_b(t^*, 0) - f_b(t, 0) \qquad , \tag{1.6f}$$

mit $\mathcal{E}_1 \equiv \left\langle \Phi^2(r_\parallel, 0) \right\rangle$ im Landau-Ginzburg-Modell. Nach der obigen Argumentation folgt nun aus (1.6f), daß die leitenden singulären Anteile der Oberflächenenergiedichte $\mathcal{E}_1$ am O- und EX-Übergang, und der (reduzierten) freien Energie pro Volumen (siehe oben) gleich sind. D.h. $\mathcal{E}_1$ hat den gleichen kritischen Exponenten und das gleiche universelle Amplitudenverhältnis (für $t \to 0^+$ und $t \to 0^-$) wie f_b.

1.2 Überblick dieser Arbeit

Das Anliegen dieser Arbeit [14] ist der EX-Übergang. Er ist im Vergleich zu dem O- und SB-Übergang, die heute sehr gut verstanden sind [2, 13], wegen der gebrochenen OP-Symmetrie sehr viel schwieriger analytisch zu untersuchen und war daher zunächst weniger gut verstanden. Eine Übersicht über frühere Arbeiten findet sich z.B. in den Referenzen [2, 15, 14]. An einigen Stellen in dieser Arbeit werden wir die Resultate aus der Referenz [15] für Konsistenzüberprüfungen benutzen, und werden deshalb diese nun kurz vorstellen.

Diehl und Smock [15] interessierten sich für das OP-Profil am EX-Übergang der Ising-Universalitätsklasse (mit kurzreichweitiger Wechselwirkung). Sie verwendeten das einkomponentige feldtheoretische Landau-Ginzburg-Modell für den Halbraum und die RG verbesserte Fluktuations- und ϵ-Entwicklung, um das OP-Profil für $t \geq 0$ und $t \leq 0$ in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen in erster Ordnung der Fluktuationen ("1-Loop") zu berechnen. Mit ihren Resultaten im Oberflächenlimes $z/\xi_\pm \to 0$ bestätigten sie insbesondere das leitende singuläre Verhalten des Oberflächenprofils [6, 7, 10, 16] $m_1 \sim |t|^{2-\alpha}$, vergleiche (1.6e). So konnten frühere Zweifel am kritischen Exponenten $x_\Phi^{(s)} = d$, und am monotonen Verhalten des Profils in den Referenzen [17] und [18] (in 1-Loop-Ordnung) ausgeräumt werden. Ihre Resultate sind konsistent mit der asymptotischen Äquivalenz des außergewöhnlichen und des normalen Übergangs.

In dieser Arbeit benutzen wir jedoch im Unterschied zu Referenz [15] die allgemeine Methode des KDE-Ansatzes [2, 4, 13, 14, 16]. Damit werden wir das kritische Verhalten des OP's und der Energiedichte (in Profilen, Korrelationen und Schichtsuszeptibilitäten) in Halbraum- und Film-Geometrien untersuchen. Diese Methode ist definiert durch eine Entwicklung von Operatoren (fluktuierenden Feldern) in Korrelationsfunktionen. Der zu entwickelnde Operator muß einen Abstand z von der

Oberfläche haben, der sehr viel kleiner ist als der Abstand zu den übrigen Operatoren (in der Korrelationsfunktion) und die Korrelationslänge ξ. Alle vorkommenden Längen sind jedoch groß gegen mikroskopische Längenskalen, da wir am universellen Verhalten interessiert sind. [Wie früher[3] bezeichnet $\mathcal{E}$ die Abweichung der Energiedichte von ihrem kritischen Volumenmittelwert.] Für diese Größen $\Psi \equiv \Phi$ oder $\mathcal{E}$ hat die Entwicklung im einfachsten Fall die Form

$$\Psi(r_\parallel, z) \Big/ \Big\langle \Psi(r_\parallel, z) \Big\rangle = 1 + \sigma_\Psi(r_\parallel, 0)\, z^{x^{(s)}_{\sigma_\Psi}}\, C_\Psi + \cdots \quad , \tag{1.7}$$

$\langle\Psi\rangle$ ist der (nichtverschwindende) Mittelwert in einer Halbraum-Geometrie am kPV mit $T = T_{cb}$. Die geordnete EX-Oberfläche bricht die $\Phi \to -\Phi$ Symmetrie. Es gilt daher keine $\Phi \to -\Phi$ Auswahlregel und es ist zu erwarten, daß *derselbe* Operator σ_Ψ für $\Psi = \Phi$ (ungerade) und $\Psi = \mathcal{E}$ (gerade in Φ) auftritt. Die rechte Seite ist eine unendliche Summe von Oberflächenoperatoren mit anwachsenden Skalendimensionen, und 1 ist der "Einheitsoperator" mit der Skalendimension null. Der Oberflächenoperator σ_Ψ beschreibt das nichttriviale *leitende singuläre* Verhalten von Ψ. Er wird daher als der *leitende* Oberflächenoperator bezeichnet und hat die kleinste Skalendimension $x^{(s)}_{\sigma_\Psi} > 0$. Die Oberflächenoperatoren und die Amplituden auf der rechten Seite hängen dabei weder von der Zahl, den Orten und der Natur der sonstigen Operatoren in der Korrelationsfunktion, noch von den Oberflächenuniversalitätsklassen von weiteren entfernten Oberflächen ab, sondern nur von der Oberflächenuniversalitätsklasse der sich bei $z = 0$ befindenden nahen Oberfläche und vom Operator Ψ [2, 4]. Die KDE läßt sich daher intuitiv als Operator-Produkt-Entwicklung [2, 4, 19] in einem unbegrenzten System interpretieren, in der die Oberfläche dem zweiten Operator entspricht.

Die Größe $\Psi / \langle\Psi\rangle$ ist (im Sinne der minimalen Subtraktion multiplikativ)[4] renormiert [2], denn es kürzen sich die Z-Faktoren aus Zähler und Nenner heraus (vergl. (2.2a)), und hat daher *keine* anormale Skalendimension. Die bekannten Oberflächenskalendimensionen (1.5) offenbaren Eigenschaften des unbekannten Operators σ_Ψ. Dazu betrachten wir die 2-Punkt-Funktion von Ψ (vergl. (1.2)) im lateralen Oberflächenlimes $|r_\parallel - r'_\parallel| \gg z, z'$ am kritischen Fixpunkt:

$$\Big\langle \Psi(r_\parallel, z)\Psi(r'_\parallel, z') \Big\rangle \sim |r_\parallel - r'_\parallel|^{-2d} \quad . \tag{1.8}$$

Damit (1.8) mit (1.7) konsistent ist, muß die Skalendimension $x^{(s)}_{\sigma_\Psi}$ gleich der Raumdimension d sein. Cardy [16] hat für σ_Ψ die Komponente $T_{\perp\perp}$ des ("verbesserten") renormierten Spannungstensors $T_{\mu\nu}$ vorgeschlagen. Hierbei bezeichnet $\perp$ die Komponente senkrecht zur planaren Oberfläche, vergleiche Abb. 1.2 mit $\perp = z$. Der

[3] Vergleiche die Fußnote vor Gleichung (1.5a).

[4] Wenn $\Psi \equiv \mathcal{E}$ *und* $t \sim T - T_{cb}$ ungleich null ist, wird jedoch eine zusätzliche additive Renormierung notwendig [2], die aber regulär in t ist, und somit nicht zum leitenden singulären Verhalten in (1.7) beiträgt.

Spannungstensor [20] hat[5] nämlich die Skalendimension d. Die Kontinuitätsgleichung (3.15) impliziert, daß die Komponente $T_{\perp\perp}$ einen endlichen Grenzwert an der Oberfläche hat, d.h. ein geeigneter Oberflächenoperator ist. Wir werden im III. Kapitel diese Eigenschaften von $T_{\mu\nu}$ im Detail darlegen. Der Kurze-Distanz-Entwicklungs (KDE's) Ansatz (1.7) hat dann die Form [16]:

$$\Psi(r_\parallel, z) \Big/ \Big\langle \Psi(r_\parallel, z) \Big\rangle = 1 - \left[\lim_{z\to 0} T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\right] z^d \, C_\Psi + \cdots \quad . \tag{1.9}$$

Die KDE-Amplitude C_Ψ ist *universell*, da $\Psi / \langle\Psi\rangle$ und $T_{\perp\perp}$ *keine* anormale Dimension haben (und alle Distanzen groß gegen mikroskopische Längen sind, vergl. (2.11b)). Sie hängt nur von der Universalitätsklasse der sich bei $z = 0$ befindenden nahen Oberfläche, von der Universalitätsklasse des Volumens und vom Operator Ψ ab, vergl. die allgemeine Diskussion nach (1.7). In $d = 2$ Dimensionen ist die Besonderheit, daß C_Ψ *hyperuniversell* [21] ist, d.h. nur von der Volumen- und nicht von der Oberflächenuniversalitätsklasse (dem Typ der Oberfläche) abhängt, vergl. auch die Diskussion nach (1.22) und (3.49b). [Die Punkte auf der rechten Seite von (1.9) bezeichnen Beiträge von Oberflächenoperatoren mit *größerer* Skalendimension als d.]

Ziel dieser Arbeit ist es, diesen Ansatz (1.9) in den verschiedensten Situationen mit $\Psi = \Phi$ oder $\mathcal{E}$ und für eine Halbraum- oder Film-Geometrie zu verifizieren, und seine Konsequenzen zu untersuchen. Dazu betrachten wir zunächst parallelinvariante Größen wie Profile und Schichtsuszeptibilitäten. Nach Einsetzen der KDE (1.9) tritt dort der (renormierte) *Verschiebe-Operator* $\int d^{d-1} r_\parallel T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)$ auf, der andere Operatoren von der Oberfläche wegschiebt, vergl. (3.20). Anschließend werden wir diesen Ansatz auch in nichtparallelinvarianten Korrelationsfunktionen untersuchen, vergl. Kapitel III, Abschnitt 3.4.

1.2.1 Untersuchung der experimentellen Konsequenzen

(i) Dazu betrachten wir zunächst das OP-Profil Φ eines Halbraums bei T nahe T_{cb}. Es hat die universelle Skalenform

$$\Big\langle \Phi(r_\parallel, z) \Big\rangle_\pm \Big/ \Big\langle \Phi(r_\parallel, z) \Big\rangle_{T=T_{cb}} = F\left(z / \xi_\pm\right) \quad , \tag{1.10}$$

mit der Bezeichnung $+(-)$ für $T > T_{cb}$ ($T < T_{cb}$) und der Volumen-Korrelationslänge $\xi_\pm$ des Systems. Nach den vor (1.9) gemachten Bemerkungen, erwarten wir, daß die KDE (1.9) auch für den thermischen *leitenden* singulären Anteil bei $T \neq T_{cb}$ gilt. Dann tritt der "erhaltene" (*ortsunabhängige*) [Kapitel III] Mittelwert $\langle T_{\perp\perp}\rangle_\pm$ mit der Skalendimension d auf. Wegen $T \neq T_{cb}$ ist dann die einzige relevante Länge die Korrelationslänge $\xi_\pm$ von der $\langle T_{\perp\perp}\rangle_\pm$ abhängen kann, daher muß der leitende singuläre Anteil (LS) $\left[\langle T_{\perp\perp}\rangle_\pm\right]_{LS} \sim \xi_\pm^{-d}$ sein. Die gleiche Abhängigkeit hat auch der

[5] Jedenfalls in Mittelwerten und lateral translationsinvarianten Korrelationsfunktionen, wo die $r_\parallel$-Abhängigkeit rausfällt.

leitende singulären Anteil der Volumen freien Energie $[f_{b,\pm}]_{LS}$. Wie bei (1.14) gezeigt wird, ist wie erwartet

$$\left[\langle T_{\perp\perp}\rangle_{\pm}\right]_{LS} = -\left[f_{b,\pm}\right]_{LS} \quad , \tag{1.11}$$

für $T \to T_{cb}$. Die thermische Mittelung der KDE (1.9) von $\Psi = \Phi$ ergibt dann mit (1.11) die Faktorisierung der Skalenfunktion

$$\left[F\left(z/\xi_{\pm}\right)\right]_{LS} = -\left(z/\xi_{\pm}\right)^{d} C_{\Phi}\left[\xi_{\pm}^{d} f_{b,\pm}\right]_{LS} \quad , \tag{1.12}$$

im Limes $t \to 0$ bei festem z. Die universelle Volumengröße $\left[\xi_{\pm}^{d} f_{b,\pm}\right]_{LS}$ ist die bekannte Ferer-Stauffer-Wortis-Amplitude [22]. Die Gleichung (1.12) zeigt die experimentelle Relevanz von C_{Φ}, bei z.B. der kritischen Adsorption von Flüssigkeiten. Die Relation (1.12) geht über den schon von Burkhardt und Diehl gezeigten Spezialfall [7]

$$\left[\left\langle \Phi(r_{\parallel}, z)\right\rangle_{+}\right]_{LS} \Big/ \left[\left\langle \Phi(r_{\parallel}, z)\right\rangle_{-}\right]_{LS} = \left[f_{b,+}\right]_{LS} \Big/ \left[f_{b,-}\right]_{LS} \quad . \tag{1.13}$$

hinaus.

(ii) Nun betrachten wir einen Film der Breite L am kPV mit $T = T_{cb}$ (Abb. 1.4). Die beiden Oberflächen ("Wände") haben die Oberflächenuniversalitätsklassen $a \equiv EX$ und b beliebig. Der reduzierte leitende singuläre Anteil der freien Energie

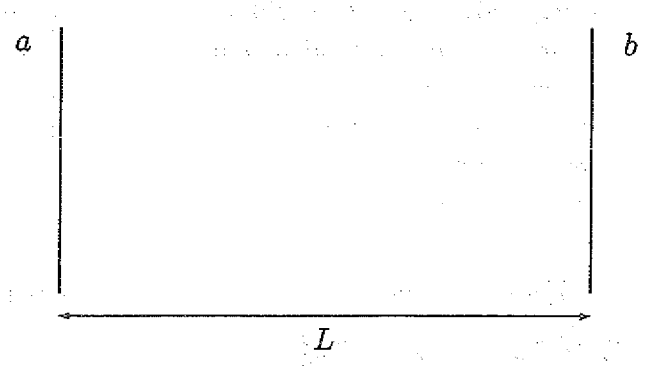


Abbildung 1.4: Film-Geometrie mit zwei parallelen planaren Oberflächen der Oberflächenuniversalitätsklassen $a \equiv EX$ und b. Die Breite des Films ist L. Der Inhalt einer Seitenfläche beträgt A.

$\mathcal{F}_{a,b}/(k_B T_{cb} A)$ pro Seitenfläche hat, aus Dimensions- und Skaleninvarianzgründen da $L/\xi_{\pm}$ die einzige dimensionslose Variable ist, die folgende Form [22][6]

$$\begin{aligned} \lim_{A\to\infty}\left(\frac{\mathcal{F}_{a,b}}{k_B T_{cb} A}\right)_{LS} &= L^{1-d}\,\mathcal{Y}_{a,b}^{\pm}\left(L/\xi_{\pm}\right) \\ &\underset{\xi_{\pm}\to\infty}{=} L^{1-d}\,\Delta_{a,b} \quad , \end{aligned} \tag{1.14}$$

[6]Damit das kritische Volumen-Verhalten reproduziert wird, muß $\mathcal{Y}_{a,b}^{\pm}\left(L/\xi_{\pm}\right) \underset{\xi_{\pm}\ll L}{\to} L^{d}\left[f_{b,\pm}\right]_{LS}$ gehen. Daraus folgt dann mit (1.14) und der Kraft-Relation (1.15) die Halbraum-Relation (1.11).

mit der von den beiden Oberflächenuniversalitätsklassen a und b abhängenden universellen Skalenfunktion $\mathcal{Y}^{\pm}_{a,b}$. Am kPV mit $T = T_{cb}$ divergiert die Korrelationslänge und die beiden Begrenzungen wechselwirken durch die kritischen Fluktuationen des Op's in der Form eines Potenzgesetzes $\sim L^{1-d}$. Dies wird als *Casimir-Effekt* [2, 8, 23] bezeichnet, der durch die universelle Casimir-Amplitude $\Delta_{a,b}$ charakterisiert ist[7]. Für gleiche Oberflächenuniversalitätsklassen $a = b$ findet eine Anziehung, hingegen für ungleiche Oberfächenuniversalitätsklassen $a \neq b$, im allgemeinen eine Abstoßung der "Wände"[8] durch die Casimir-Kraft statt. Die Abstoßung tritt insbesondere auf bei Randbedingungen a und b mit Oberflächenmagnetfeldern $h_1\hat{h}_1 < 0$ die den OP invertieren, vergl. (A.28). Die reduzierte (leitende singuläre) Casimir-Kraft pro Flächeneinheit zwischen den Wänden, ist durch [16]

$$[\mathcal{K}_{Casimir}]_{LS} = \langle T_{\perp\perp}\rangle_{LS} \tag{1.15}$$

gegeben, vergleiche die Fußnote vor (3.19). Aus den Gleichungen (1.15) und (1.14) folgt dann

$$(d-1)\Delta_{a,b} = L^d \langle T_{\perp\perp}\rangle_{LS} \quad . \tag{1.16}$$

Fisher und de Gennes [8] erhalten aus einem phänomenologischen Ansatz für die freie Energie des Films das OP-Profil[9] bei $T = T_{cb}$, in der Nähe der "Wand" a, mit der von dem Exponenten d (der Raumdimension) abhängenden "Entfernten-Wand-Korrektur":

$$\left\langle \Phi(r_\parallel, z)\right\rangle_L \Big/ \left\langle \Phi(r_\parallel, z)\right\rangle_{L=\infty} = 1 - B^{(\Phi)}_{a,b}\,(z/L)^d + \cdots \quad , \tag{1.17}$$

im Limes $z/L \ll 1$. Aus der thermischen Mittelung der KDE (1.9) und Gleichung (1.16) ergibt sich dann

$$B^{(\Phi)}_{a,b} = (d-1)\,\Delta_{a,b}\,C_\Phi \quad , \tag{1.18}$$

die Faktorisierung der universellen Entfernten-Wand-Korrektur in die KDE-Amplitude C_Φ und die Casimir-Amplitude $\Delta_{a,b}$. D.h., das Verhältnis $B^{(\Phi)}_{a,b}/\Delta_{a,b}$ hängt *nur* von der Natur der nahen Wand a ab! Im II. Kapitel und im Anhang A berechnen wir diese universellen Größen $B^{(\Phi)}_{a,b}, \Delta_{a,b}$ und C_Φ in leitender Ordnung, und werden damit die KDE direkt überprüfen.

(iii) Um die KDE-Amplituden explizit zu berechnen und zur weiteren Überprüfung des KDE-Ansatzes, werden wir in leitender und nächstleitender Ordnung der Fluktuationsentwicklung ("0- und 1-Loop") die *Schichtsuszeptibilitäten* für ein Halbraum-System am kPV mit $T = T_{cb}$ berechnen:

$$\chi_{\Psi,\Xi}(z,z') = \int d^{d-1}r_\parallel \left[\left\langle \Psi(r_\parallel, z)\Xi(r'_\parallel, z')\right\rangle - \left\langle \Psi(r_\parallel, z)\right\rangle\left\langle \Xi(r'_\parallel, z')\right\rangle\right] \quad , \tag{1.19}$$

[7] Diese Bezeichnung stammt vom "Casimir-Effekt" aus der Quantenelektrodynamik: Stellt man zwei perfekt leitende Platten parallel im Abstand L im Vakuum auf, so gibt es zwischen diesen eine anziehende Kraft $\sim L^{-4}$ aufgrund der Nullpunktsfluktuationen des elektromagnetischen Feldes. In beiden Fällen ist die Kraft nämlich durch die entsprechende Relation (1.15) gegeben.

[8] Eine Ausnahme ist $\Delta_{EX,SB} < 0$ (Anziehung) für $d \simeq 4$, vergl. Ref. [24].

[9] In einer "1-Loop-Rechnung" in der Referenz [25] bestätigt worden.

mit $\Psi, \Xi = \Phi$ oder $\mathcal{E}$.
Unter Benutzung der KDE (1.9) und einer im Kapitel III diskutierten "Ward-Identität" für eine Verschiebung der Oberfläche (vergl. (3.32)), erhalten wir die universelle KDE-Amplitude aus der Relation

$$\lim_{z' \to \infty} z^{-d} z' \chi_{\Psi,\Xi}(z, z') \Big/ \Big[\big\langle \Psi(r_\parallel, z) \big\rangle \big\langle \Xi(r'_\parallel, z') \big\rangle \Big] = C_\Psi x_\Xi \quad . \tag{1.20}$$

Dem Limes $z' \to \infty$ entspricht der KDE-Bereich[10] $z/z' \to 0$.

1.2.2 Weitere Konsequenzen der Kurzen-Distanz-Entwicklung

Cardy [16] hat gezeigt (vergl. Abschnitt 3.3), daß für ein Halbraum-System am infrarotstabilen Renormierungs-Gruppen-Fixpunkt[11] die hyperuniverselle (d.h. vom Typ der Oberfläche unabhängige) Relation gilt

$$\lim_{z \to 0} \big\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z) \Psi(r'_\parallel, z') \big\rangle \Big/ \big\langle \Psi(r'_\parallel, z') \big\rangle = -2^d S_d^{-1} x_\Psi \left[z' \Big/ \Big(\big(r_\parallel - r'_\parallel\big)^2 + (z')^2 \Big) \right]^d \quad , \tag{1.21}$$

mit dem kritischen Volumenexponent x_Ψ von Ψ und der Oberfläche der d dimensionalen Einheitskugel $S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$, vergl. auch [13, 26] und die Diskussion in Kapitel III. Einsetzen der KDE (1.9) in Gleichung (1.21) ergibt dann [13, 26, 3]

$$C_\Psi / x_\Psi = 2^d S_d^{-1} \Big/ \Big[\big\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, 0) T_{\perp\perp}(r'_\parallel, 0) \big\rangle \, |r_\parallel - r'_\parallel|^{2d} \Big] \quad . \tag{1.22}$$

[Im Halbraum ist bei $t = 0$ nach (1.11) $\langle T_{\perp\perp} \rangle = 0$, und alle Beiträge von Oberflächenoperatoren mit größerer Skalendimension als d verschwinden im Limes $z \to 0$.] Die Gleichung (1.22) zeigt die Verknüpfung des KDE-Koeffizienten C_Ψ mit der 2-Punkt-Korrelationsfunktion des Spannungstensors am Fixpunkt. In $d = 2$ Dimensionen hat die 2-Punkt-Funktion die Besonderheit, daß sie hyperuniversell [21] ist. Sie hängt dann *nur* von der Volumen- und nicht von der Oberflächenuniversalitätsklasse ab. [Damit ist natürlich auch C_Ψ in $d = 2$ Dimensionen hyperuniversell.] Der Grund ist, daß (der ganze) R^2 und die komplexe Ebene isomorph sind. Der Übergang zu den entsprechenden komplexen Variablen und Funktionen erlaubt dann den Zugriff auf die starken Methoden der Funktionentheorie. Die den beiden unabhängigen Komponenten von $T_{\mu\nu}$ entsprechenden komplexen Größen am Fixpunkt sind wegen der Kontinuitätsgleichung (3.15) analytische Funktionen, so daß durch Fortsetzung die 2-Punkt-Funktion in der Halbebene durch einen Volumen- und Spiegelterm *unabhängig* vom Typ der Oberfläche ausgedrückt werden kann [4, 16, 21]. In Dimensionen $d > 2$ ist die 2-Punkt-Funktion (im Gegensatz zu früheren Vermutungen [16]) jedoch *nicht* hyperuniversell (und damit auch C_Ψ nicht), dies ist von Eisenriegler et

[10] Wie in den anderen Relationen sind alle Abstände groß gegen mikroskopische Längen, vergl. (2.11b).
[11] Wo die Konforme Invarianz [3], [Kapitel III] gilt.

al. [13] und von MacAvity und Osborne [26] durch direkte Rechnungen am O- und SB-Übergang gezeigt worden.

Wir zeigen die Nichthyperuniversalität von $\langle T_{\perp\perp} T_{\perp\perp}\rangle$ in Dimensionen $d > 2$ durch ein allgemeines und einfaches Argument [14] für beliebige Oberflächenuniversalitätsklassen (O, SB und EX), vergl. (3.48).

Die Gleichung (1.22) impliziert die nützliche Beziehung

$$C_{\mathcal{E}} / C_{\Phi} = x_{\mathcal{E}} / x_{\Phi} \quad . \tag{1.23}$$

Das Verhältnis von zwei *Oberflächengrößen* ist also durch zwei *Volumengrößen* bestimmt. Eine solche Identität existiert nur für den EX-Übergang, da *nur* dort $T_{\perp\perp}$ als leitender Oberflächenoperator in der KDE von Φ *und* $\mathcal{E}$ auftritt.

1.3 Kurze Übersicht zu den folgenden Kapiteln

Wir werden im II. Kapitel das schon erwähnte Landau-Ginzburg-(Φ^4)-Modell für die Halbraum- und Film-Geometrie und seine Fluktuationsentwicklung im Detail erläutern, und die besprochenen Größen und Konsequenzen der KDE in *leitender* Ordnung der "Renormierungs-Gruppen verbesserten Fluktuations- und ϵ-Entwicklung" [2] berechnen und überprüfen. Wir bestimmen insbesondere die universellen KDE-Amplituden C_{Φ} und $C_{\mathcal{E}}$ in erster Ordnung in $\epsilon = 4 - d$.

Im III. Kapitel geben wir eine Einführung in die Konforme Invarianz von kritischen Systemen im Halbraum und definieren und erläutern den Spannungstensor. Wir werden seine Verknüpfung mit der Konformen Invarianz erkennen. Wir zeigen mit der Kontinuitätsgleichung die Eignung von $T_{\perp\perp}$ und insbesondere von $\int d^{d-1}r_{\parallel} T_{\perp\perp}$ als Oberflächenoperatoren. Wir berechnen in leitender Ordnung Korrelationsfunktionen, die die Spannungstensorkomponente $T_{\perp\perp}$ enthalten und zeigen, daß auch am EX-Übergang die RG-Fixpunkt-Bedingung $T_{\perp\parallel}(r) = 0$ für r in der Oberfläche bereits erfüllt ist, wenn nur die Oberfläche an ihrem Fixpunkt ist, d.h. für beliebiges t und u. Wir erklären durch ein einfaches allgemeines Argument die Verletzung der Hyperuniversalität der 2-Punkt-Funktion von $T_{\perp\perp}$ in Dimensionen $d > 2$. Ihre universelle Skalenfunktion werden wir für die EX-Oberfläche in leitender Ordnung in ϵ bestimmen.

Im IV. Kapitel berechnen wir die erwähnten Schichtsuszeptibilitäten (1.19) einer Halbraum-Geometrie bei $t = 0$ in leitender und nächstleitender Ordnung, und die KDE-Koeffizienten C_{Φ} und $C_{\mathcal{E}}$ in zweiter Ordnung in ϵ. Wir werden eine weitere Bestätigung des KDE-Ansatzes (1.9) finden.

Das V. Kapitel gibt eine Zusammenfassung der Resultate und einen Ausblick. Im Anhang A erläutern wir die Fluktuationsentwicklung für Systeme mit symmetriebrechenden Oberflächen. Wir bestimmen die universellen Casimir-Amplituden $\Delta_{+,+}$ und $\Delta_{+,-}$ für eine Film-Geometrie mit zwei symmetriebrechenden Oberflächen in leitender Ordnung in ϵ. Die Relation zwischen der freien Energie und $\langle T_{\perp\perp}\rangle$, und die Erhaltung von $\langle T_{\perp\perp}\rangle$ werden wir in leitender Ordnung verifizieren.

In den Anhängen B und C erhalten wir benötigte Relationen zwischen der freien Energie im Volumen und $\langle T_{\perp\perp} \rangle$ in leitender Ordnung, und die Verschiebungseigenschaften von $\int d^{d-1} r_{\parallel} T_{\perp\perp}$ in leitender und nächstleitender Ordnung ("0- und 1-Loop").

Im Anhang D erörtern wir die Berechnung von C_{Φ} in nächstleitender Ordnung.

Kapitel 2

Modell und Resultate in leitender Ordnung

2.1 Landau-Ginzburg-Modell eines Halbraums

Um das kritische Verhalten am EX-Übergang zu untersuchen, benutzen wir das Landau-Ginzburg-Modell eines Halbraums [2]:

$$\mathcal{H}[\Phi] = \int d^d r \left\{ \Theta(z) \left[\tfrac{1}{2} (\nabla\Phi)^2 + \mathcal{L}_B(\Phi) \right] + \delta(z) \mathcal{L}_1(\Phi) \right\} \quad , \tag{2.1}$$

mit der Stufenfunktion $\Theta(z)$,

$$\mathcal{L}_B(\Phi) = \frac{t}{2}\Phi^2 + \frac{u}{4!}\Phi^4 \quad , \tag{2.1a}$$

$$\mathcal{L}_1(\Phi) = \frac{c}{2}\Phi^2 - h_1\Phi \quad , \tag{2.1b}$$

und der Konfigurationswahrscheinlichkeit $\sim \exp(-\mathcal{H})$.

Der Oberflächenwechselwirkungsparameter c aus (2.1b) ist proportional zur Größe $([k_1/k]_{SB} - k_1/k)$ aus dem Phasendiagramm (Abb. 1.2) des Ising-Modells auf einem Gitter. Denn wie sich an der Konfigurationswahrscheinlichkeit ablesen läßt, beschreibt Gleichung (2.1) mit $h_1 = 0$ und $c < 0$ am kPV außergewöhnliches (EX) Verhalten, da dann Konfigurationen mit großem OP-Feld Φ an der Oberfläche energetisch günstig sind. Das Konträre gilt für den gewöhnlichen (O) Übergang, der durch $c > 0$ charakterisiert ist. Multikritisches (SB) Verhalten mit dem Verhältnis der Kopplungen $[k_1/k]_{SB}$ entspricht $c = 0$. Dies (alles) gilt in der sogenannten ϵ-Entwicklung mit Dimensionsregularisierung [2] (siehe unten). Bei Verwendung anderer Regularisierungsverfahren [2, 19] (z.B. mit einem "Wellenvektor-Cutoff-Λ") korrespondiert zu $[k_1/k]_{SB}$ ein nichtverschwindendes c_{SB} und die Diskussion ist entsprechend mit $c < c_{SB}$ und $c > c_{SB}$ zu führen [2, 4].

Wir beschränken uns im folgenden auf ein einkomponentiges OP-Feld, das bedeutet auf die Ising-Universalitätsklasse. Das OP-Profil ist dann z.B. die Dichteabweichung [2] $\langle\Phi\rangle \equiv m(z) = \rho(z) - \rho_{T_{cb}}(\infty)$ eines einkomponentigen Gases nahe dem

Gas-Flüssig-Übergang von seinem kritischen Wert im unbegrenzten Volumen. Wie früher ist die Größe z der Abstand von der planaren Oberfläche. Wenn die Oberfläche (Behälterwand) mit den Molekülen eine attraktive (EX) Wechselwirkung hat, wird die flüssige Phase adsorbiert, und bei repulsiver (O) Wechselwirkung die gasförmige Phase. Ein anderes Beispiel sind binäre Mischungen. Die Oberfläche bevorzugt im allgemeinen eine Sorte der Flüssigkeitsmoleküle und dies führt am Entmischungspunkt zur kritischen Adsorption [2, 8, 9, 15, 18, 27]. Der thermodynamische Erwartungswert des OP's am Entmischungspunkt ist nun die Konzentrationsabweichung der Molekülsorte (z.B. A) die von der "Wand" (Oberfläche) adsorbiert wird, von ihrem Wert im unbegrenzten kritischen System [2, 8, 9]: $m(z) = \varphi_A(z) - \varphi_A(\infty)$.

Die Berechnung von Profilen und Korrelationsfunktionen für unser Landau-Ginzburg-Modell ist wegen der anharmonischen Φ^4-Wechselwirkung in (2.1a) nur störungstheoretisch möglich. Üblicherweise wird eine Fluktuationsentwicklung [2, 19] der (verbundenen) Korrelationsfunktionen in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen um die sogenannte "Mean-Field"-Lösung gemacht, da die Fluktuationen nahe $d = 4$ "klein" sind (Ginzburg-Kriterium [19, 28][1]). Damit jedoch unsere einfachen Modelle reale Systeme beschreiben [2, 4, 19], müssen jedoch alle Längenskalen wie die Korrelationslänge, die Abstände von Operatoren in Korrelationsfunktionen etc. groß sein, gegen mikroskopische Längen, wie die Gitterkonstante, der Moleküldurchmesser etc. Leider divergieren die Koeffizienten der Fluktuationsentwicklung für diesen Fall. Dies wird als Infrarot-Divergenz bezeichnet. (Die Beseitigung dieser Divergenzen werden wir nach (2.2d) diskutieren.) Zunächst besprechen wir die naive Störungsentwicklung:

Zur störungstheoretischen Berechnung von (verbundenen) Korrelationsfunktionen wird die Konfigurationswahrscheinlichkeit $\sim \exp(-\mathcal{H})$ nach der Kopplungskonstante u der anharmonischen Φ^4-Wechselwirkung entwickelt. Die verbleibenden *gaußschen* Erwartungswerte werden mit dem Wick-Theorem in Produkte gaußscher Propagatoren zerlegt. Jeder Term dieser Fluktuationsentwicklung besteht somit aus Integralen über Produkte von Propagatoren ("Distributionen"), die im allgemeinen nicht integrabel (und damit undefiniert) sind. Der physikalische Grund dieser sogenannten Ultra-Violet (UV) Divergenzen liegt im Kontinuumslimes des Modells (2.1), d.h. dem Limes aller mikroskopischen Längenskalen (siehe oben) gegen null.

Damit die Fluktuationsentwicklung sinnvoll wird, müssen daher zunächst die einzelnen Terme ("Feynman-Integrale, -Diagramme") *regularisiert* werden. Zur Beseitigung dieser UV-Divergenzen in den Integralen verwenden wir in dieser Arbeit die Methode der "Dimensions-Regularisierung" [2, 4, 19]: Die Integrale werden in Raumdimensionen berechnet, in denen diese UV-Singularitäten integrabel sind. Danach werden die wohldefinierten Resultate als Funktion der Raumdimension d analytisch nach $d = 4 - \epsilon$ mit $\epsilon \ll 1$ fortgesetzt. Die UV-Divergenzen äußern sich dadurch in $1/\epsilon$-Polen, da $d = 4$ die "obere kritische Dimension" [2, 19] ist, oberhalb der

[1] Das impliziert z.B. die Störungsentwicklung der Volumen-Suszeptibilität nach der als "klein" angenommenen Φ^4-Wechselwirkung. Das Konvergenzverhalten der ersten Fluktuationskorrektur für $t \to 0$ ist dann das Ginzburg-Kriterium.

diese Φ^4-Theorie nicht mehr renormierbar ist. Im nächsten Schritt werden mit dem Renormierungs-Verfahren diese UV-Divergenzen beseitigt. Dies geschieht durch eine Reparametrisierung der Felder und Kopplungskonstanten [2, 4, 19]. Durch die so definierten neuen dimensionslosen Parameter des Hamiltonians lassen sich diese $1/\epsilon$-Pole absorbieren. In einer renormierbaren Feldtheorie genügt eine *endliche* Anzahl von Reparametrisierungen (Parametern), um die UV-Divergenzen für alle Korrelationsfunktionen zu beseitigen. Die Landau-Ginzburg-Feldtheorie für einen Halbraum (2.1) erweist sich als renormierbar in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen [2]. Für ihre Dichteprofile und Korrelationsfunktionen an inneren Punkten, d.h. mit einem endlichen Abstand von der Oberfläche, reicht die Volumen-Reparametrisierung der marginalen Kopplung u, des OP-Feldes Φ und der erzeugenden Felder (Quellen) h und t. Diese Parameter benötigen eine multiplikative Renormierung (siehe (2.2)). Einige Größen wie die freie Volumen-Energie (vergl. Anhang B), ihre erste Ableitung nach t, wie die Volumen-Energiedichte und der Mittelwert des Spannungstensors [20] (siehe Kapitel III und Anhang B) $\langle T_{\mu\nu}\rangle$ benötigen bei endlichem $t \neq 0$ zusätzlich eine sogenannte additive Renormierung [2, 4].

Die in dieser Arbeit benötigten (lokalen) Volumen-Reparametrisierungen in $d = 4 - \epsilon$ sind [2, 4, 19]:

$$h(r) = \mu^{3-\epsilon/2} Z_\Phi^{-\frac{1}{2}} h^R(\mu r) \tag{2.2a}$$

$$t(r) = \mu^2 Z_t t^R(\mu r) + t_{cb} \tag{2.2b}$$

$$u = \mu^\epsilon 16\pi^2 f Z_u u^R \tag{2.2c}$$

$$\Phi(r) = Z_\Phi^{\frac{1}{2}} \Phi^R(\mu r) \quad . \tag{2.2d}$$

Wir verwenden die "minimale Renormierung", d.h. nur die $1/\epsilon$-Pole werden von den lokalen Z-Faktoren absorbiert ("gekürzt"). Die Fluktuationskorrekturen, die die kritische (relative) Volumen-Übergangs-Temperatur t_{cb} und die multikritische Oberflächenverstärkung c_{SB} verschieben, sind innerhalb der sogenannten ϵ-Entwicklung *mit* Dimensionsregularisierung null [2, 4, 19]: $t_{cb} = c_{SB} = 0$. Die Größe μ ist eine beliebige inverse Längenskala, die auf die Renormierungs-Gruppen (RG) Gleichungen und die Universalität führt.

Die RG bildet kritische Systeme mit "großen" Längenskalen (und damit Infrarot-Divergenzen) auf nichtkritische Systeme mit "kurzen" Längenskalen ab und erklärt die Universalität [2, 4, 19]. Kritisches (universelles) Verhalten mit $\xi \to \infty$ wird dann durch die infrarotstabilen Fixpunkte dieser RG-Abbildung beschrieben. Die Fluktuationsentwicklung von renormierten (nichtkritischen) Systemen ist daher wohldefiniert: Denn die renormierten Korrelationsfunktionen haben (in jeder Ordnung u^R) weder UV- (wegen der vorherigen Reparametrisierung, siehe (2.2)), noch Infrarot-Divergenzen (wegen der RG-Abb.). Damit sind kritische Systeme in (regularisierter) renormierter Störungstheorie berechenbar.

Die Koeffizienten f_i von $f = 1 + \epsilon f_1 + \cdots$ aus (2.2c) kürzen sich in universellen Größen heraus und sind daher beliebig.

In nächstleitender Ordnung ("1-Loop") ergeben sich die lokalen Z-Faktoren zu [2, 4, 19]:

$$Z_\Phi = 1 + O((u^R)^2) \tag{2.3a}$$

$$Z_t = 1 + \frac{n+2}{3\epsilon} u^R + O((u^R)^2) \tag{2.3b}$$

$$Z_u = 1 + \frac{n+8}{3\epsilon} u^R + O((u^R)^2) \quad . \tag{2.3c}$$

n ist die Anzahl der Komponenten des OP's. Für unsere EX-Rechnungen ist $n = 1$.

Am infrarotstabilen Fixpunkt ergibt sich aus den RG-Gleichungen für u^R bei $n = 1$ [2]

$$u^{*R} = \frac{1}{3}\epsilon \left(1 + \frac{17}{27}\epsilon + O(\epsilon^2)\right) \quad . \tag{2.4}$$

Nachdem wir gesehen haben, daß eine Fluktuationsentwicklung für das Landau-Ginzburg-Modell (2.1) existiert, beschäftigen wir uns nun mit der konkreten Durchführung für den EX-Übergang.

2.2 Resultate in leitender Ordnung für die Halbraum- und Film-Geometrie

Am kPV ist durch die bereits geordnete Oberfläche die $\Phi \to -\Phi$ Symmetrie des Systems (2.1) gebrochen, daher ist es sinnvoll den OP Φ in seinen nichtverschwindenden Erwartungswert und seinen Fluktuationsanteil zu zerlegen:

$$\Phi(r) = m(z) + \varphi(r) \quad , \tag{2.5a}$$

mit

$$m(z) = \langle \Phi(r) \rangle_{\mathcal{H}} \quad . \tag{2.5b}$$

Die Terme der Fluktuationsentwicklung von (verbundenen) Korrelationsfunktionen, lassen sich nun wieder mit dem Wick-Theorem in die üblichen gaußschen Anteile zerlegen. Die Details dieser Fluktuationsentwicklung [2, 15, 17, 18, 19, 29] werden im Anhang A erklärt. Ihre Bausteine sind die Magnetisierung in leitender Ordnung ("0-Loop") $\overset{0}{m}$ und der Propagator G der gaußschen Fluktuationen um $\Phi = \overset{0}{m}$. Diese Größen sind genau an den Fixpunkten des außergewöhnlichen Übergangs ($c \to -\infty$, $h_1 = 0$) und des normalen Übergangs ($c \to \mathrm{sign}(c)\infty$, $h_1 \to +\infty$) asymptotisch gleich. Dies impliziert die asymptotische Äquivalenz dieser Fixpunkte (Übergange) in jeder Ordnung der Störungsentwicklung, vergl. Kapitel I, und die Gleichungen (A.12) mit $t = 0$ und (2.6) folgende.

Die Magnetisierung in leitender Ordnung bei $t = 0$

$$\overset{0}{m}(z) = (12/u)^{1/2} z^{-1} \quad , \tag{2.6}$$

ergibt sich aus der Gleichung (A.12) des Anhangs A. Zur Berechnung des gaußschen Propagators G aus (A.9) bei $t = 0$ nutzen wir die laterale Translationsinvarianz des Systems. Die Lösung der Fourier-Transformierten von (A.10) hat die Form

$$\tilde{G}(p; z, z') = \int d^{d-1}r_{\parallel}\, \mathrm{e}^{-ip\cdot(r_{\parallel}-r'_{\parallel})}\, G(r_{\parallel} - r'_{\parallel}; z, z') \quad . \tag{2.7}$$

Zur expliziten Darstellung von (2.7) betrachten wir die Fälle $z > z'$ und $z < z'$ separat und führen die dimensionslose Variable $x = pz$ ein. Wir erhalten dann am EX-Fixpunkt die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + 1 + \frac{6}{x^2}\right] W(x) = 0 \quad . \tag{2.8a}$$

Der Propagator $\tilde{G}$ aus (2.7) ist eine Kombination der beiden linear unabhängigen Lösungen von (2.8a) [5]:

$$W(x) = \mathrm{e}^{-x}P(x) \quad , \quad P(x) = 1 + \frac{3}{x} + \frac{3}{x^2} \tag{2.8b}$$

und $W(-x)$. Der übliche Ansatz [5] ist

$$\tilde{G}(p; z, z') = (pw_R)^{-1}U[p\min(z, z')]W[p\max(z, z')] \quad . \tag{2.8c}$$

Die Funktion U ist die Lösung von (2.8a), die mit der Randbedingung (A.10b) für $h_1 \to \infty$ und c endlich konsistent ist: Denn die Kombination

$$U(x) = W(-x) - W(x) \tag{2.8d}$$

ist bei $x = 0$ wohldefiniert, da

$$U(x \to 0) \simeq \frac{2}{15}x^3 \tag{2.8e}$$

ist, wie sich aus einer Taylorentwicklung von W in $O(x^5)$ ergibt. Die Randbedingung $\tilde{G}(p; z = 0, z' > 0)$ ist intuitiv verständlich: Der EX-Übergang ist durch ($c \to -\infty$, $h_1 = 0$) bzw. ($c \to \mathrm{sign}(c)\infty$, $h_1 \to +\infty$) klassifiziert. Durch diese starke Wechselwirkung sind die Oberflächenspins (Oberflächen-OP-Felder) "festgeklemmt" ($\overset{0}{m} \to \infty$) und haben die Fluktuationen null. Damit muß auch der Propagator der gaußschen Fluktuationen mit einer solchen "Oberflächen-Fluktuation" null sein.

In der Zustandsgleichung für $\overset{0}{m}$ muß natürlich analog (A.10b), h_1 endlich gesetzt werden, damit diese wohldefiniert ist. Dies führt auf [18] $\overset{0}{m} \sim 1/(z + z_0)$ mit $z_0 = z_0(c, h_1)$. Anschließend wird (erst) der Limes $h_1 \to \infty$ vollzogen. Entsprechend verfährt man bei der Berechnung des Propagators für $c \to -\infty$ und $h_1 = 0$ in Ref. [29]: vergl. dort die Gleichungen (4.19), (4.21) und (4.22).

Die Größe w_R ist die Wronski-Determinante der beiden Lösungen:

$$\begin{aligned} w_R &= \left[\frac{d}{dx}U\right]W - \left[\frac{d}{dx}W\right]U \\ &= 2 \quad , \end{aligned} \tag{2.8f}$$

deren Wert durch die Erfüllung der δ-Inhomogenität in (A.10a) festgelegt ist.

Wir benötigen im III. Kapitel jedoch auch das Verhalten von $\tilde{G}_t(p;z,z')$ und $\overset{0}{m}_t(z)$ für $z \to 0$, mit der vollen Temperaturabhängigkeit t. Der Propagator wird dann durch einen ähnlichen Ansatz bestimmt. Die Rechnung ist jedoch wegen der Temperaturabhängigkeit von $\overset{0}{m}$ sehr viel komplizierter. Wir benutzen einfach die Resultate[2] aus Referenz [15, 17]:

$$\tilde{G}_t(p;z,z') = \frac{1}{\Xi_\pm} U_P(y) W_P(y') \theta(y-y') + (y \leftrightarrow y') \quad , \tag{2.9a}$$

$$W_P(y) = \mathrm{e}^{-\omega_P y}\left(\omega_P^2 - 1 + 3\omega_P \coth y + 3\coth^2 y\right) \quad , \tag{2.9b}$$

$$\begin{aligned} U_P(y) &= \frac{1}{\omega_P(\omega_P^2-1)(\omega_P^2-4)}[\sinh(\omega_P y)(\omega_P^2 - 1 + 3\coth^2 y) \\ &\quad -3\omega_P \cosh(\omega_P y)\coth(y)] \quad , \end{aligned} \tag{2.9c}$$

mit der Stufenfunktion θ. Der Index $+$ $(-)$ bezeichnet den Fall $t > 0$ $(t < 0)$. Die skalierten Variablen sind

$$y \equiv \Xi_\pm z \tag{2.9d}$$

und

$$P \equiv p/\Xi_\pm \quad . \tag{2.9e}$$

Die Temperaturabhängigkeit $\Xi_\pm$ ist definiert durch

$$\Xi_+ \equiv \sqrt{t} \quad , \quad \Xi_- \equiv \sqrt{|\,t\,|/2} \quad . \tag{2.9f}$$

Die Magnetisierung $\overset{0}{m}_t$ in leitender Ordnung ist [15]

$$\overset{0}{m}_+(z) = \sqrt{\frac{12t}{u}}\,\mathrm{csch}\,(\Xi_+ z) \tag{2.9g}$$

und

$$\overset{0}{m}_+(z) = \sqrt{\frac{12t}{u}}\coth(\Xi_- z) \quad , \tag{2.9h}$$

mit derselben Bezeichnung wie bei $\tilde{G}_t$. Im Limes $z \to 0$ ist

$$\overset{0}{m}_\pm(z) \sim z^{-1} \quad , \tag{2.9i}$$

[2] In der Referenz [15] gibt es im Vorfaktor von $\coth^2 y$ in der Größe U_P jedoch einen Druckfehler, vergl. Ref. [17].

wie in (2.6). Nach einer zu (2.8e) analogen Rechnung erhalten wir dann auch das Oberflächenverhalten von

$$\tilde{G}_t(p; z, z') = \frac{1}{15} z^3 \left(\Xi_\pm\right)^2 W_P \left(\Xi_\pm z'\right) \tag{2.9j}$$

für $z/z' \ll 1$. Dieses Resultat ist konsistent mit den $t = 0$ Relationen (2.8) und (2.10).

Entsprechend (2.8e) ergibt sich für den Propagator G

$$\begin{aligned} \lim_{p\to 0} \tilde{G}(p; z, z') &= \overset{0}{\chi}_{\Phi,\Phi}(z, z') \\ &= \frac{1}{5} \frac{[\min(z, z')]^3}{[\max(z, z')]^2} \\ &\equiv \overset{0}{\chi}(z, z') \quad , \end{aligned} \tag{2.10}$$

der Zusammenhang mit der Suszeptibilität in leitender Ordnung ("0-Loop") aus (1.19).

Zur Berechnung der in (1.9) eingeführten KDE-Amplitude C_Φ benutzen wir die Gleichung (1.20), d.h. die Größe

$$A_{\Phi,\Phi} = z^{-d} z' \chi_{\Phi,\Phi}(z, z') \Big/ \left[\left\langle \Phi(r_\parallel, z) \right\rangle \left\langle \Phi(r'_\parallel, z') \right\rangle\right] \quad , \tag{2.11a}$$

bei $T = T_{cb}$ im Limes $z' \to \infty$. $A_{\Phi,\Phi}$ ist dimensionslos und nach Benutzung der Reparametrisierung (2.2) eine renormierte Funktion[3] von u^R, μz und $\mu z'$. Die RG-Gleichung [2] für $A_{\Phi,\Phi}$ impliziert dann einfach

$$A_{\Phi,\Phi}(\mu z, \mu z'; u^R) = A_{\Phi,\Phi}(z/z', 1; u^{*R}) \quad , \tag{2.11b}$$

im asymptotischen Bereich großer z und z' (bezüglich der einzigen Längenskala $u^{-1/\epsilon}$ am kPV) wo die Universalität gilt. Die Zahl u^{*R} ist die universelle infrarotstabile Fixpunkt-Kopplung aus (2.4), gegen die u^R im Limes großer z und z' "fließt" [2].

Die Größe $A_{\Phi,\Phi}$ in (2.11b) läßt sich in einer systematischen Fluktuations- ("Loop"-) und ϵ-Entwicklung berechnen und mit der von der KDE (1.9) implizierten Gleichung (1.20) vergleichen. Insbesondere muß (2.11b) in jeder Ordnung in ϵ einen endlichen Grenzwert im Limes $z/z' \to 0$ haben. Dieser bestimmt nach (1.20) die ϵ-Entwicklung der KDE-Amplitude C_Φ. Mit dieser Rechnung werden wir nun den KDE-Ansatz (1.9) explizit überprüfen.

In leitender (erster) Ordnung in ϵ ergibt sich die rechte Seite von (2.11b) zu $A^{*(1)}_{\Phi,\Phi}(z/z')$, aus den Gleichungen (1.20), (2.10), (2.6), (2.4), (2.2c) und (2.3c). Für $z < z'$ ist

$$A^{*(1)}_{\Phi,\Phi}(z/z') = \epsilon \frac{4\pi^2}{45} = C^{(1)}_\Phi \tag{2.12}$$

[3]Denn Zähler und Nenner werden *multiplikativ* renormiert, damit kürzen sich die entsprechenden (lokalen) Z_Φ-Faktoren aus (2.2) und der Limes $\epsilon \to 0$ existiert.

unabhängig von z/z' und der Grenzwert aus (1.20) ist trivialerweise endlich. Da der kritische Volumenexponent des OP's die Enwicklung

$$x_\Phi = 1 - \frac{\epsilon}{2} + O(\epsilon^2) \tag{2.13}$$

hat, ist (2.12) gleich der KDE-Amplitude $C_\Phi^{(1)}$ in erster Ordnung in ϵ.

Nun überprüfen wir, ob diese Amplitude $C_\Phi^{(1)}$ auch in den anderen in der Einleitung angesprochenen KDE-Situationen auftritt.

(i) Wir beginnen mit dem OP-Profil der Halbraum-Geometrie bei $t > 0$ ($T > T_{cb}$), d.h. den Gleichungen (1.10) bis (1.13). Die in (1.12) vorkommende Größe ist [22]:

$$\left[\xi_+^d f_{b,+}\right]_{LS} = -\frac{1}{\epsilon}\frac{3}{32\pi^2} + O(\epsilon^0) \quad , \tag{2.14}$$

wie sich auch aus der Gleichung (B.8a) des Anhangs B ergibt. Die Volumen-Korrelationslänge ξ ist wie in Ref. [15] über den Abfall von $\langle\Phi\Phi\rangle \sim \mathrm{e}^{-|r-r'|/\xi}$ im Limes $|r-r'| \to \infty$ definiert[4]. Einsetzen von (2.12) und (2.14) in (1.12) reproduziert die Größe b_+/c_+ aus Ref. [15]:

$$b_+/c_+ \equiv [F_+(x)]_{LS}\, x^{-d} = -\frac{1}{120} + O(\epsilon^0) \quad , \tag{2.15}$$

d.h. die KDE (1.9) ist wie erwartet auch für $T \neq T_{cb}$ gültig.

(ii) Nun betrachten wir die Film-Geometrie mit Begrenzungen vom Typ EX bei $z = 0$ und $z = L$ aus Abb. 1.4, die durch die Gleichungen (1.14) bis (1.18) repräsentiert wird. Dieses System hat eine zu (2.1) korrespondierende Hamiltonfunktion (A.16), mit entsprechenden Modifikationen: Die Θ-Funktion wird durch $\Theta(z)\Theta(L-z)$ ersetzt und die Oberflächenwechselwirkung $\delta(z-L)\hat{\mathcal{L}}_1(\Phi)$, mit die Oberflächenuniversalitätsklasse (b in Abb. 1.4) der zweiten Begrenzung kennzeichnenden Parametern $\hat{c}$ und $\hat{h}_1$, kommt hinzu.

Um die KDE (1.9) für diese Geometrie zu überprüfen, berechnen wir das OP-Profil am kPV mit $t = 0$ in leitender Ordnung ("Mean Field") $\overset{0}{m}(z, L)$ im Limes $z \ll L$. Die explizit ermittelte "Ferne-Wand-Korrektur" [8] vergleichen wir dann mit (1.18).

Wir interessieren uns für universelle Größen, d.h. wir müssen analog zu (2.11a) und (2.11b) das Verhaltnis aus dem "vollen" Film-Profil $m(z, L)$ und dem Halbraum-Profil $m(z)$ diskutieren:

$$\frac{m(z,L)}{m(z)} \equiv \mathcal{M}(z,L) \quad . \tag{2.16a}$$

Die Diskussion von (2.16a) ist wie bei (2.11a), wobei $\mathcal{M}$ der Größe $A_{\Phi,\Phi}$ entspricht. Die RG-Gleichung für $\mathcal{M}$ impliziert dann ähnlich wie bei (2.11b)

$$\mathcal{M}(\mu z; \mu L; u^R) = \mathcal{M}(z/L; 1; u^{*R}) \quad , \tag{2.16b}$$

[4]Sie unterscheidet sich von der über das zweite Moment definierten Korrelationslänge erst in $O(\epsilon)$.

im asymptotischen Limes $L > z \gg u^{-1/\epsilon}$, wenn u^R zum infrarotstabilen Fixpunkt u^{*R} aus (2.4) fließt. Dies ist wie beim Verhalten von $A_{\Phi,\Phi}$ im Limes $z' > z \gg u^{-1/\epsilon}$.

Für unsere Rechnung beschränken wir uns auf die leitende Ordnung in ϵ. Wegen der Universalität genügt es, die Randbedingung $\overset{0}{m}(z=0,L) \equiv \overset{0}{m}(z=0) \to \infty$ zu betrachten. Aus (A.21) und (2.6) ergibt sich dann durch Entwicklung des Integranden $[v(M)]^{-1}$ nach der für $z \ll L$ kleinen Größe $E\Big/\left(\frac{u}{4!}M^4\right)$ die "Ferne-Wand-Korrektur" in leitender Ordnung aus

$$\frac{\overset{0}{m}(z,L)}{\overset{0}{m}(z)} - 1 = -\frac{u}{60}Ez^4 \quad . \tag{2.16c}$$

Mit den Gleichungen (A.23) und (A.25) läßt sich E durch die Casimir-Amplitude $\Delta_{a,b}$ ausdrücken, und dann ist durch (1.16) E mit $\langle T_{\perp\perp}\rangle$ verknüpft, vergl. auch die explizite Rechnung (A.23) folgende. Der Index a bezeichnet die Oberflächenuniversalitätsklasse der nahen EX-Wand und b die beliebige Oberflächenuniversalitätsklasse der fernen Wand.

Die universelle Amplitude C_Φ erhalten wir nun aus aus (2.16c), (1.9) und unserer RG-Diskussion (2.16b). Das Resultat ist

$$C_\Phi^{(1)} = \left[\frac{uz^\epsilon}{60}\frac{L^dE}{(d-1)\Delta_{a,b}}\right]^*_{\epsilon\to 0} \tag{2.17}$$

in leitender Ordnung ϵ. Da der zweite Faktor in der eckigen Klammer wegen (A.23) und (A.25) gleich 1 ist, reproduziert (2.17) mit (2.2c) und (2.4) konsistent das alte KDE-Resultat (2.12).

Eine weitere Überprüfungsmöglichkeit der KDE bietet die Energiedichte $\mathcal{E}$. Die thermodynamische Energiedichte $-T(df_b/dT)$ im Volumen ist wegen $dT = dt$ und der feldtheoretischen Beziehung $df_b/dt = \langle\Phi^2\rangle_b/2$ konsistent mit dem Ausdruck

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2}\Phi^2(r) \tag{2.18a}$$

für die fluktuierende Energiedichte. Wir betrachten nur den kPV mit $t = 0$. Für die Energiedichte in Korrelationsfunktionen genügt dann eine *multiplikative* Renormierung[5], vergl. den Absatz vor (2.2).

Aus (2.5a) folgt für Φ^2 (bei gebrochener Symmetrie) die Darstellung

$$\Phi^2(r) = m^2 + 2m\varphi + \varphi^2 \quad . \tag{2.18b}$$

Wir beschränken uns im folgenden auf die Fluktuationsentwicklung in leitender Ordnung ("Mean Field"). Wir erhalten dann aus (2.18)

$$\langle\mathcal{E}(r)\rangle = -\frac{1}{2}[\overset{0}{m}(z)]^2 + O(u^0) \quad . \tag{2.19}$$

[5]Während für $t \neq 0$ $\langle\mathcal{E}\rangle_\pm$ eine zusätzliche additive Renormierung benötigt. Die Größe $\langle\mathcal{E}(r)\mathcal{E}(r')\rangle_\pm$ benötigt auch für $t = 0$ eine additive Renormierung, jedoch nur für $r = r'$ (wie durch Differentiation aus der freien Volumen-Energie folgt, vergl. Anhang B.)

Zu den Schichtsuszeptibilitäten aus (1.19) und (1.20) mit $\Psi = \mathcal{E}$ und $\Xi = \Phi$ oder $\mathcal{E}$ trägt von (2.18b) nur der zweite Term bei.

Ähnlich wie bei (2.12) ergibt sich dann für $z < z'$

$$\overset{*}{A}{}^{(1)}_{\mathcal{E},\Phi} = 2\,\overset{*}{A}{}^{(1)}_{\Phi,\Phi} = C^{(1)}_{\mathcal{E}} x_{\Phi} \tag{2.20a}$$

$$\overset{*}{A}{}^{(1)}_{\mathcal{E},\mathcal{E}} = 4\,\overset{*}{A}{}^{(1)}_{\Phi,\Phi} = C^{(1)}_{\mathcal{E}} x_{\mathcal{E}} \quad . \tag{2.20b}$$

Gleichung (2.20) ist konsistent mit (1.20) und (1.23), wegen $x_{\mathcal{E}}/x_{\Phi} = 2 + O(\epsilon)$ und (2.12).

Zur weiteren Überprüfung der KDE benutzen wir nun das Energiedichteprofil im Film. In leitender Ordnung finden wir aus (2.19) und (2.16c)

$$\frac{[\overset{0}{m}(z,L)]^2}{[\overset{0}{m}(z)]^2} - 1 = -\frac{u}{30} E z^4 \quad . \tag{2.21a}$$

Die KDE für $z/L \ll 1$ analog zu (1.17) ist andererseits

$$\frac{\langle \mathcal{E}(r) \rangle_L}{\langle \mathcal{E}(r) \rangle_{L=\infty}} - 1 = -\left(\frac{z}{L}\right)^d C_{\mathcal{E}}\,(d-1)\,\Delta_{a,b} \quad . \tag{2.21b}$$

Wegen $C_{\mathcal{E}} = 2C_{\Phi}$ (vergl. vorherige Argumentation) sind (2.21a) und (2.21b) konsistent.

In leitender Ordnung haben wir damit die KDE (1.9) in den verschiedensten Situationen verifiziert.

Kapitel 3

Der Spannungstensor

Im II. Kapitel haben wir die KDE (1.9) in Profilen und Korrelationsfunktionen mit Φ und $\mathcal{E}$ in leitender Ordnung bestätigt. Die dabei auftretenden Korrelationsfunktionen mit $T_{\perp\perp}$ berechneten wir aber nicht explizit, sondern haben die Eigenschaften des Spannungstensors benutzt, um sie auf andere Größen zurückzuführen, vergl. (1.11), (1.16) und (1.20). Einerseits möchte man diese Eigenschaften für den Fall einer symmetriebrechenden Oberfläche explizit verifizieren. Andererseits haben Korrelationsfunktionen mit dem Spannungstensor interessante Eigenschaften und führen zu einer weiteren Überprüfung der KDE, vergl. (1.20). Von besonderem Interesse ist die 2-Punkt-Funktion $\langle T_{\perp\perp} T_{\perp\perp}\rangle$. Sie bestimmt nämlich die KDE-Amplitude C_Ψ (vergl. (1.22)) und wird beim Übergang von $d > 2$ Dimensionen nach $d = 2$ hyperuniversell, d.h. sie verliert ihre Abhängigkeit vom Oberflächentyp [13, 14, 26]. Wir werden dieses Verhalten durch ein einfaches Argument erklären.

Bevor wir auf diese Fragen im Abschnitt 3.4 eingehen, geben wir zunächst einen Überblick über die Eigenschaften des Spannungstensors im unbegrenzten Raum und im Halbraum, und erläutern seinen Zusammenhang mit der Konformen Invarianz.

3.1 Spannungstensor und Konforme Invarianz im unbegrenzten System

Wir betrachten das unbegrenzte Landau-Ginzburg-Modell zunächst am kritischen (infrarot-stabilen) RG-Fixpunkt. Wir erhalten dies aus (2.1), durch die Ersetzung der Θ-Funktion durch 1 und Weglassen des Oberflächenterms (und ersetzen alle Parameter durch ihre infrarotstabilen Fixpunktwerte). Dieses Modell hat lokale Wechselwirkungen und ist homogen und isotrop, d.h. der Hamiltonian ist (im Ortsraum) translations- und rotationsinvariant. Die Korrelationslänge ist unendlich und es gilt wegen der Dilatationsinvarianz des Fixpunkt-Hamiltonians, die bekannte Homogenitätsrelation für verbundene Korrelationsfunktionen (Kumulanten) der skalaren Skalenfelder Ψ_i

$$\langle \Psi_1(r_1)\cdots\Psi_N(r_N)\rangle_c = b^{-x_{\Psi_1}}\cdots b^{-x_{\Psi_N}}\langle \Psi_1(r_1')\cdots\Psi_N(r_N')\rangle_c \quad , \tag{3.1}$$

mit

$$r'(r) = r/b \quad . \tag{3.2}$$

Die Ψ_i sind relevante Fixpunkt-Störungen mit den Skalendimensionen x_{Ψ_i}, wie der OP Φ oder die Energiedichte $\mathcal{E}$. Die Berechnung der Mittelwerte erfolgt auf beiden Seiten mit dem Fixpunkt-Hamiltonian $\mathcal{H}^*$, siehe oben. Unter einer infinitesimalen Dilatation [4, 3]

$$r'(r) = r + a(r) \quad , \tag{3.3}$$

mit $a(r) = (b^{-1} - 1)r$ aus (3.2) und (3.3), und $b^{-1} - 1 \ll 1$ infinitesimal, ist $b(r) = 1 - \frac{1}{d}\nabla \cdot a + O(a^2)$, vergl. den Absatz nach (3.8). Die Invarianzbedingungen (3.1) hat dafür die differentielle Form [4, 3]

$$\sum_J \left\langle \delta_a \Psi_J(r_J) \prod_{I \neq J} \Psi_I(r_I) \right\rangle_c = -\sum_J \frac{x_{\Psi_J}}{d} [\nabla_{r_J} \cdot a(r_J)] \left\langle \prod_I \Psi_I(r_I) \right\rangle_c \quad , \tag{3.4}$$

mit I und J von 1 bis N und

$$\delta_a \Psi_J(r) \equiv a(r) \cdot \nabla \Psi_J(r) \quad . \tag{3.5}$$

Aufgrund der Translations- und Rotationsinvarianz des Hamiltonians, gilt (3.4) natürlich auch, wenn a eine Translation oder Rotation bezeichnet (alle Ψ_I sind skalare Operatoren).

Aber (3.4) gilt darüberhinaus auch für eine andere Klasse von Transformationen (3.3), die sogenannten *speziellen konformen Transformationen* [4, 3], wenn die Ψ_I relevante Fixpunkt-Störungen wie Φ oder $\mathcal{E}$, oder allgemeiner sogenannte Stamm- oder Primäroperatoren [3] bezeichnen (wie bei (3.1)). Dazu gehören Φ und $\mathcal{E}$, aber nicht ihre Ableitungen[1]. Spezielle konforme Abbildungen sind winkelerhaltend und bilden den ganzen Raum eineindeutig auf sich ab. Sie lassen sich aus einer Inversion $r_1 = r/r^2$ an der Kugel, einer Translation $r_2 = r_1 + g$ und einer zweiten Inversion $r' = r_2/r_2^2$ konstruieren und bilden Hyper-Kugeln auf Hyper-Kugeln ab. Wie sich an (3.9) ablesen läßt, setzt sich die spezielle konforme Abbildung *lokal* aus einer Translation, Rotation und Dilatation zusammen (die selber konforme Abbildungen sind) und hat keinen Scheranteil [3]. Die konformen Abbildungen bilden eine Gruppe. Die infinitesimale Gruppe [3] enthält d unabhängige spezielle konforme Transformationen (3.3), mit

$$a = 2(s \cdot r)r - sr^2 \tag{3.6}$$

und dem konstanten infinitesimalen Vektor s, 1 Dilatation, d Translationen und $d(d-1)/2$ Rotationen, d.h. [4]

$$\frac{1}{2}(d+1)(d+2) \tag{3.7}$$

[1] D.h. diese Operatoren transformieren sich (per Definition) wie $\Psi(r) \to \{a(r) \cdot \nabla + \frac{x_\Psi}{d}[\nabla \cdot a(r)]\}\Psi(r)$ unter einer infinitesimalen speziellen konformen Transformation (3.6).

unabhängige winkelerhaltende Abbildungen des d dimensionalen Raumes auf sich. In $d=2$ Dimensionen existiert wegen der Isomorphie von $\mathcal{C}$ und $\mathcal{R}^2$ die Besonderheit, daß darüberhinaus jede analytische (umkehrbare) komplexe Funktion [3] ein *endliches* Gebiet eineindeutig konform abbildet [4, 3]; daher ist in $d = 2$ die konforme Gruppe unendlich groß [4, 3].

Nützlich ist die differentielle (spezielle) konforme Transformation [4, 3, 30]

$$dr'_\mu = \sum_\nu \left(\partial r'_\mu / \partial r_\nu\right) dr_\nu \quad , \tag{3.8}$$

mit

$$\frac{\partial r'_\mu}{\partial r_\nu} = [b(r)]^{-1} R_{\mu\nu}(r) \quad . \tag{3.9}$$

Die Größe b ist der lokale Dilatations- (Maßstabs-) Faktor, mit der Jakobi-Determinante der Transformation [3] $b^{-d} = \mid \partial r'_\mu / \partial r_\nu \mid$, und der Rotationsmatrix $R_{\mu\nu}$.

Der Grund für die Konforme Invarianz am Fixpunkt ist die Existenz eines feldtheoretischen Spannungstensors [20] $T_{\mu\nu}$ für das Landau-Ginzburg-Modell. Er ist definiert [3] als die Änderung des reduzierten Hamiltonians unter einer allgemeinen infinitesimalen Koordinatentransformation (3.3):

$$\delta\mathcal{H} \equiv \sum_{\mu,\nu} \int d^d r \frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} T_{\mu\nu}(r) \quad , \tag{3.10a}$$

die den ganzen Raum eineindeutig auf sich abbildet. Damit findet man eine Verallgemeinerung von (3.4) auf beliebige infinitesimale Koordinatentransformationen und mit (beliebigem) Hamiltonian $\mathcal{H}$. Die thermodynamische Mittelung erfolgt dann auf der rechten Seite von (3.1) mit $\mathcal{H} + \delta\mathcal{H}$, und nach Entwicklung des Boltzmann-Gewichts ergibt sich mit (3.10a) (eine verbleibende Mittelung mit $\mathcal{H}$) [3]

$$\sum_J \left\langle (\delta_a \Psi_J(r_J)) \prod_{I \neq J} \Psi_I(r_I) \right\rangle_c = \sum_{\mu,\nu} \int d^d r \frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} \left\langle T_{\mu\nu}(r) \prod_I \Psi_I(r_I) \right\rangle_c \quad , \tag{3.10b}$$

abgesehen von Korrekturen in zweiter Ordnung in a. [Der Spannungstensor ist also per Definition der Generator der (Stamm-) Operator-Änderungen (3.5).] Damit [3] (3.10b) konsistent mit (3.4) ist, muß der Spannungstensor $T_{\mu\nu}$ besondere Eigenschaften haben. Wir werden gleich sehen, daß diese Eigenschaften insbesondere die (spezielle) Konforme Invarianz am kritischen Fixpunkt implizieren. Dafür ist es nützlich die Ableitung der Koordinatenänderungen in folgender Form zu notieren [3]

$$\frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} - \frac{\partial a_\nu(r)}{\partial r_\mu}\right) + \frac{\delta_{\mu\nu}}{d}\nabla \cdot a + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} + \frac{\partial a_\nu(r)}{\partial r_\mu} - \frac{2\delta_{\mu\nu}}{d}\nabla \cdot a\right) \quad . \tag{3.11}$$

Konforme Abbildungen sind nämlich dadurch charakterisiert, daß sie keine Scherung des Systems (der Geometrie) enthalten, und somit der dritte Term auf der rechten Seite verschwindet. Dies läßt sich für infinitesimale konforme Abbildungen, wie eine homogene Dilatation $a_\mu = \lambda r_\mu$, oder Rotation $a_\mu = \sum_\alpha A_{\mu\alpha} r_\alpha$, mit $A_{\mu\alpha} = -A_{\alpha\mu}$, oder für eine spezielle konforme Abbildung (3.6) sofort einsehen. Aus der Form der homogenen Rotation und Dilatation ist nun klar, daß diese durch den ersten und zweiten Term in (3.11) beschrieben werden.

Mit der Integrabilitätsbedingung der konformen Transformation

$$\frac{\partial^2 r'_\alpha}{\partial r_\beta \partial r_\gamma} = \frac{\partial^2 r'_\alpha}{\partial r_\gamma \partial r_\beta} \tag{3.12}$$

kann man dann zeigen, daß, abgesehen von (homogenen) Translationen, Rotationen und Dilatationen, diese speziellen konformen Abbildungen (3.6) die allgemeinsten konformen Abbildungen in $d = 2, 3, 4, \ldots$ sind, die den *ganzen* Raum eineindeutig auf sich abbilden. In $d = 3, 4 \ldots$ gibt es darüberhinaus *keine* weiteren konformen Abbildungen [3, 4].

Da das System rotationsinvariant ist und damit die rechte Seite von (3.10b) unter *homogenen* Rotationen a_μ für Korrelationsfunktionen mit *beliebigen* skalaren Operatoren verschwinden muß, muß die rechte Seite sogar *lokal*, d.h. für jedes r unter dem Integral verschwinden. Dies impliziert, die Symmetrie des Spannungstensors

$$T_{\mu\nu}(r) = T_{\nu\mu}(r) \quad , \tag{3.13}$$

und damit die *lokale* Rotationsinvarianz des Systems.

Eine ähnliche Argumentation gilt für homogene Dilatationen *nur* am gaußschen und Wilson-Fisher Fixpunkt (*): Die Spur $\sum_\mu T_{\mu\mu}(r)$ muß bis auf δ-Funktionen in Korrelationsfunktionen lokal verschwinden [20], um mit der Bedingung (3.4) konsistent zu sein

$$\left\langle \sum_\mu T_{\mu\mu}(r) \Psi_1(r_1) \cdots \Psi_N(r_N) \right\rangle_c^* = -\sum_I x_{\Psi_I} \delta(r - r_I) \left\langle \Psi_1(r_1) \cdots \Psi_N(r_N) \right\rangle_c^* \quad , \tag{3.14}$$

und impliziert damit die *lokale* Dilatationsinvarianz. [Die Vorfaktoren der δ-Funktionen ergeben sich einfach aus dem Vergleich von (3.10b) mit (3.4).] Die Größen x_{Ψ_I} sind die Volumenexponenten der Operatoren Ψ_I an diesem Fixpunkt.

Die lokale Symmetrie und Spurfreiheit impliziert aber dann, die Invarianz des Fixpunkt-Hamiltonians (der in (3.14) durch den Index $*$ symbolisiert ist) sogar unter Koordinatentransformationen ohne Scheranteil, und damit die *spezielle* Konforme Invarianz.

Gleichung (3.10b) offenbart jedoch noch eine wichtige Eigenschaft des Spannungstensors: Die rechte Seite darf nicht von $a(r)$ mit $r \neq r_I$ abhängen, da die linke Seite nur von $a(r_I)$ abhängt. Das können wir leicht einsehen, wenn wir beide Seiten in der Form [4] $\int d^d r a(r) F(r)$ notieren und $F_{links}(r)$ und $F_{rechts}(r)$ gleichsetzen. Nach

partieller Integration und Anwendung des Gaußschen Satzes ergibt sich $F_{links}(r)$ als eine Summe von $\delta(r - r_I)$ Funktionen, und verschwindet für $r \neq r_I$, den Orten der anderen Operatoren $\Psi_I(r_I)$. Somit muß also auch $F_{rechts}(r)$ für $r \neq r_I$ verschwinden. Daraus folgt die Kontinuitätsgleichung [4, 20, 3, 30]

$$\sum_\nu \partial_{r_\nu} \langle T_{\mu\nu}(r)\Psi_1(r_1)\cdots\Psi_N(r_N)\rangle_c = -\sum_{I=1}^{N} \delta(r - r_I)\partial_{r_{I_\mu}} \langle \Psi_1(r_1)\cdots\Psi_N(r_N)\rangle_c \quad , \tag{3.15}$$

innerhalb von Korrelationsfunktionen.

Brown [20] hat für die Φ^4-Theorie im unbegrenzten System gezeigt, daß

$$T_{\mu\nu}(r) = T^{(c)}_{\mu\nu}(r) - I_{\mu\nu}(r) \tag{3.16}$$

ein renormierter Operator ist. $T_{\mu\nu}$ besteht aus dem kanonischen Spannungstensor $T^{(c)}_{\mu\nu}$ (der die Kontinuitätsgleichung (3.15) erfüllt), dem Generator der Koordinatentransformationen, und dem divergenzfreien Verbesserungsterm $I_{\mu\nu}$. Dieser wirkt einerseits als "Counterterm", um die von $T^{(c)}_{\mu\nu}$ in Korrelationsfunktionen verursachten Divergenzen zu kürzen. Anderseits bewirkt $I_{\mu\nu}$ auch die lokale Spurfreiheit (bis auf δ-Funktionen) in Korrelationsfunktionen (3.14) am gaußschen und Wilson-Fisher Fixpunkt. Der Tensor $T_{\mu\nu}$ hat in Korrelationsfunktionen an diesen Fixpunkten die Skalendimension d (konsistent mit (3.10b)), d.h. die anormale Skalendimension *null*, vergl. Ref. [20]. [Der Grund ist, daß die vom Counterterm $I_{\mu\nu}$ stammende Inhomogenität der RG-Gleichung von $T_{\mu\nu}$, die am kritischen Fixpunkt (2.4) verschwindende β_u-Funktion [2] als Faktor enthält.

Aufgrund der Divergenzfreiheit von $I_{\mu\nu}$ ist auch der verbesserte Spannungstensor $T_{\mu\nu}$ Generator der Koordinatentransformationen, wie aus partieller Integration der rechten Seite von (3.10b) folgt. [Konsistent damit ist, daß $\int d^{d-1}r_\parallel T^{(c)}_{\mu\nu}(r_\parallel, z)$ ein renormierter Operator ist, der Verschiebungen von anderen Operatoren erzeugt, vergl. die Diskussion bei (1.9) und (3.20).]

Die expliziten Ausdrücke für $T^{(c)}_{\mu\nu}$ und $I_{\mu\nu}$ stellen wir bei der Präsentation der EX-Rechnungen im Abschnitt 3.3 vor, siehe (3.31a) und (3.31b). Aus der Kontinuitätsgleichung (3.15) folgt natürlich umgekehrt auch die Gleichung (3.10b), wie wir bei Gleichung (3.18) im nächsten Abschnitt 3.2 zeigen werden.

3.2 Spannungstensor und Koordinatentransformationen im Halbraum

Nun betrachten wir ein Halbraum-System (2.1) an einem seiner kritischen RG-Fixpunkte (O, SB oder EX), siehe Abbildung 1.2. Wir interessieren uns wie in Abschnitt 3.1 für Koordinatentransformationen des Fixpunkt-Systems, da uns eine Invarianzbedingung wie (3.10b) Informationen über die Form der Korrelationsfunktionen verschafft, oder diese sogar vollständig bestimmt [30], vergl. Abschnitt 3.3. Dazu ist es notwendig, daß die Geometrie des Systems unter diesen Abbildungen

erhalten bleibt, wie bei (3.1). Dies bedeutet, daß die planare Begrenzung S unseres Halbraums (2.1) (Abbildung 1.1) bei $z = 0$ unter der infinitesimalen Koordinatentransformation (3.3) erhalten bleibt; also ist [4, 3]

$$a_\perp(r) = 0 \quad , \quad r \in S \quad . \tag{3.17}$$

Die senkrechte (bzgl. der Oberfläche) Komponente $a_\perp$ von a muß also für jeden Punkt $r \in S$ verschwinden, d.h. die Begrenzung darf nur "in sich" verschoben werden.

Wir interesieren uns in dieser Arbeit nur für Korrelationsfunktionen $\langle \Psi_1(r_1) \cdots \Psi_N(r_N) \rangle$ aus "Stammoperatoren" $\Psi_i(r_i)$ an *inneren* Punkten r_i, d.h. mit einem endlichen Abstand $0 < r_{i_\perp}$ von der Begrenzung. Das Skalenverhalten dieser Funktionen wird dann im asymptotischen Bereich $r_{i_\perp} \gg u^{-1/\epsilon}$ *allein* durch Volumenexponenten x_{Ψ_J} bestimmt [2, 4]. [Analog ergeben sich dann aus der infinitesimalen Dilatation (3.3) mit der Bedingung (3.17) und der zugehörigen Homogenitätsrelation für das Halbraum-System, (3.1) mit dem Halbraum-Fixpunkt-Hamiltonian gemittelt, die entsprechenden Gleichungen (3.4) und (3.5) des Halbraum-Systems (2.1).] Da $T_{\mu\nu}(r)$ als lokaler Operator (nach Konstruktion [20]) die gleiche Gestalt wie im unbegrenzten System hat [4, 3], ist (zumindest für innere Punkte) klar, daß die gleichen *lokalen* Beziehungen (Symmetrie, Kontinuitätsgleichung und Spurfreiheit am Fixpunkt) auch im Halbraum gültig sind. Zur Herleitung von (3.10b) für den Halbraum benutzen wir daher die Kontinuitätsgleichung[2] (3.15), die für *innere* Punkte mit $r_{I_\perp} > 0$ unabhängig von der Geometrie gilt. Multiplikation dieser Gleichung mit a_μ, Summation $\sum_\mu$ und Integration über den Halbraum $\int_{\mathcal{R}^+} d^d r$ ergibt nach partieller Integration der linken Seite und Anwendung des Gaußschen Satzes

$$\begin{aligned} \sum_{\mu,\nu} \int dS_\nu a_\mu(r) \left\langle T_{\mu\nu}(r) \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \right\rangle_c \; - \; \sum_{\mu,\nu} \int d^d r \frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} \left\langle T_{\mu\nu}(r) \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \right\rangle_c \\ = \; - \sum_{I=1}^N \left(a(r_I) \cdot \nabla_{r_I} \right) \left\langle \prod_{i=1}^N \Psi_i(r_i) \right\rangle_c \quad , \end{aligned} \tag{3.18}$$

den zu (3.10b) korrespondierenden Ausdruck im Halbraum. $\int dS_\nu$ bezeichnet das Oberflächenintegral mit der Normalen n_ν über die Oberfläche $\partial\mathcal{R}^+$ von $\mathcal{R}^+$.

Für den Halbraum ist: $dS_\nu = d^{d-1}r_\parallel \, (-)\delta_{\perp\nu}$ (vergl. Abb. 1.1). Betrachten wir nun die nichtkonforme Verschiebung[3] (von Primär-Operatoren rechts der Ebene ζ

[2] Die auch gilt, wenn das System *nicht* am Fixpunkt ist (z.B. für $t \neq 0$).

[3] Daß $\int d^{d-1}r_\parallel T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)$ als Verschiebe-Operator auch einen (kritischen) Film der Breite L verbreitert und somit (1.15) gilt, folgt unmittelbar aus (3.19), (3.10a) und der lateralen Translationsinvarianz: Die Änderung der freien Energie durch die Verbreiterung des Films (Verschiebung der Oberflächen relativ zueinander) um $a_\mu(r) = dL\delta_{\mu\perp}\Theta(z - \zeta)$ ist analog durch die erste Zeile in (1.6d) gegeben. Daraus folgt unmittelbar die Relation mit der Casimir-Kraft (1.15). In der Identität für den Halbraum (3.20) kürzt sich der Maßstabsfaktor dL heraus, wir haben ihn daher in (3.19) weggelassen.

weg von der Oberfläche)

$$a_\mu(r) = \delta_{\mu\perp}\Theta(z-\zeta) \quad , \tag{3.19}$$

mit $0 < \zeta < r_{I_\perp}$ oder $0 < \zeta > r_{I_\perp}$. Das Oberflächenintergral über die Hyperebene $z = 0$ in (3.18) ist dann null, und wegen $\frac{\partial a_\mu(r)}{\partial r_\nu} = \delta_{\nu\perp}\delta_{\mu\perp}\delta(z-\zeta)$ erhalten wir die Ward-Identität[4]

$$\int d^{d-1}r_\parallel \left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel,\zeta)\prod_{i=1}^{N}\Psi_i(r_i)\right\rangle_c = \sum_{I=1}^{N}\Theta(r_{I_\perp}-\zeta)\partial_{r_{I_\perp}}\left\langle\prod_{i=1}^{N}\Psi_i(r_i)\right\rangle_c \quad . \tag{3.20}$$

Diese Relation impliziert die Existenz unseres KDE-Operators $\lim_{\zeta\to 0}\int d^{d-1}r_\parallel T_{\perp\perp}(r_\parallel,\zeta)$ für parallelinvariante Größen (vergl. (1.9)), da die rechte Seite für $r_{I_\perp} > \zeta$ von ζ unabhängig ist.

Damit (3.18) mit dem Halbraum-Analogon von (3.4) konsistent ist, muß für eine *konforme* Transformation (3.11) am RG-Fixpunkt der Oberflächenbeitrag verschwinden. Der Volumenbeitrag ergibt nämlich dann aufgrund der Symmetrie (3.13) und der Spurfreiheit (3.14) von $T_{\mu\nu}$ genau die rechte Seite von Gleichung (3.4), wie schon im vorherigen Abschitt ausgeführt worden ist. Dies impliziert mit (3.17) die Fixpunkt-Bedingung für das Halbraum-System am O, SB oder EX-Übergang [4, 16, 30]

$$T_{\parallel\perp}(r) = 0 \quad , \quad r \in S \quad , \tag{3.21}$$

wobei $\parallel$ eine beliebige Komponente des Ortsvektors parallel zur Oberfläche bezeichnet. [Streng impliziert dies *nur* das Verschwinden des Oberflächenintegrals am Fixpunkt für *jede* konforme Transformation die (3.17) erfüllt. Die lokale (stärkere) Bedingung (3.21) ist jedoch konsistent mit unseren 0-Loop-Resultaten am EX-Übergang (vergl. (3.34)). Die haben gezeigt, daß diese Relation sogar gilt, wenn nur die Oberfläche an ihrem Fixpunkt ist, d.h für beliebige t und u. Dasselbe findet man am O-Übergang für das Landau-Ginzburg- (in 1-Loop) [4, 13] und das Gauß-Modell [4].] Die Kontinuitätsgleichung (3.15) mit Gleichung (3.21) impliziert[5] nun für innere Punkte mit $r_{I_\perp} > 0$, daß sich $T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)$ in Korrelationsfunktionen $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel,z))\Psi_1(r_1)\cdots\Psi_N(r_N)\right\rangle_c$ für $z \to 0$ (gegen die Oberfläche) *regulär* verhält und damit ein möglicher Oberflächenoperator ist [13, 16], vergl. auch die damit konsistenten Resultate in Abschnitt 3.4. Die Kontinuitätsgleichung (vergl. vorherige

[4] Aus der nichtkonformen Scherung parallel zur Oberfläche $a_\mu(r) = \delta_{\mu\parallel}\Theta(z-\zeta)$ ($\parallel$ bezeichnet eine beliebige Komponente parallel zur Oberfläche) folgt die Ward-Identität $\int d^{d-1}r_\parallel \left\langle T_{\parallel\perp}(r_\parallel,\zeta)\prod_{i=1}^{N}\Psi_i(r_i)\right\rangle_c = \sum_{I=1}^{N}\Theta(r_{I_\perp}-\zeta)\partial_{\parallel_I}\left\langle\prod_{i=1}^{N}\Psi_i(r_i)\right\rangle_c$, mit der vollständigen lateralen Ableitung $\partial_\parallel$. Damit ist $\int d^{d-1}r_\parallel T_{\parallel\perp}(r_\parallel,z)$ als Scher-Operator identifiziert, der Primär-Operatoren lateral zur Oberfläche verschiebt.

[5] Am RG-Fixpunkt (O, SB und EX) impliziert dann die Kontinuitätsgleichung (3.15) und die Fixpunkt-Bedingung (3.21) (in Korrelationsfunktionen) die Operator-Relation $\partial_z T_{\perp\perp}(r_\parallel,z) \sim \sum_{\parallel_i}\partial_{\parallel_i}T_{\perp\parallel_i}(r_\parallel,z) \to 0$, für $z \to 0$. Nach unseren Resultaten (3.34) gilt die Relation (3.21) sogar, wenn nur die Oberfläche an ihrem Fixpunkt ist (für beliebige t und u). Dies impliziert dann (auch für beliebige t und u) die Existenz unseres KDE-Operators aus (1.9) $\lim_{z\to 0}T_{\perp\perp}(r_\parallel,z)$ an der Oberfläche.

Fußnote) impliziert darüberhinaus, daß $T_{\perp\perp}$ an der Oberfläche und im Volumen die gleiche Skalendimension d, und damit auch keine anormale Oberflächenskalendimension hat. Obige Eigenschaften sind konsistent mit (3.20), da die rechte Seite nicht von $T_{\perp\perp}$ abhängt.

Wegen der Rotationsinvarianz im parallelen Unterraum hat $\langle T_{\mu\nu}\rangle$ nur zwei unabhängige Komponenten [4, 16] $\langle T_{\perp\perp}\rangle$ und $\left\langle T_{\|,\|}\right\rangle$. Am kritischen Fixpunkt ist darüberhinaus nach (3.14) (und wegen der lateralen Translationsinvarianz) $\langle T_{\perp\perp}\rangle = -(d-1)\left\langle T_{\|,\|}\right\rangle$.

3.3 Anwendung der Konformen Invarianz im Halbraum

Zur Illustration des Potentials der Konformen Invarianz berechnen wir die funktionale Form der 2-Punkt-Kumulante zweier Stamm-Operatoren, von denen einer an der Oberfläche sitzt [4, 3] (dies wird $T_{\perp\perp}$ sein). Aus (3.18) und (3.5) ergibt sich wie bei (3.21) unter einer infinitesimalen konformen Transformation am kritischen Fixpunkt (zur besseren Übersicht bezeichnen wir die Vektoren in diesem Abschnitt im Fettdruck)

$$\sum_{I=1}^{2}\left\{\mathbf{a}(\mathbf{r}_I)\cdot\nabla_{\mathbf{r}_I}+\frac{x_{\Psi_I}}{d}\left[\nabla_{\mathbf{r}_I}\cdot\mathbf{a}(\mathbf{r}_I)\right]\right\}\left\langle\Psi_1(0,0)\Psi_2(r_\|,z)\right\rangle_c=0 \quad , \tag{3.22}$$

mit dem Oberflächenexponenten $x_{\Psi_1}^{(s)}$ und dem Volumenexponenten x_{Ψ_2}. Aus dem gewöhnlichen Skalen, der homogenen Dilatation, folgt

$$\left\langle\Psi_1(0,0)\Psi_2(r_\|,z)\right\rangle_c = r^{-x_{\Psi_1}^{(s)}-x_{\Psi_2}}f(z/r) \quad . \tag{3.23}$$

Mit den Abkürzungen für die Terme in (3.22)

$$\mathcal{D}=\sum_{I=1}^{2}\mathbf{a}(\mathbf{r}_I)\cdot\nabla_{\mathbf{r}_I} \quad , \quad Q=z/r \quad , \quad x=x_{\Psi_1}^{(s)}+x_{\Psi_2} \tag{3.24a}$$

ergibt sich

$$\mathcal{D}\,r^{-x}f(Q)=-xr^{-x}f(Q)\mathcal{D}\ln r+r^{-x}\mathcal{D}f(Q) \quad , \tag{3.24b}$$

und mit der Kettenregel ist

$$\mathcal{D}f(Q)=(\mathcal{D}\ln Q)\frac{\partial}{\partial\ln Q}f(Q) \quad . \tag{3.24c}$$

Einsetzen von (3.23) und (3.24) in (3.22), und Division durch r^{-x} führt auf

$$\left\{-x\mathcal{D}\ln r+\sum_{I=1}^{2}x_{\Psi_I}\frac{\operatorname{div}\mathbf{a}(\mathbf{r}_I)}{d}+(\mathcal{D}\ln Q)\frac{\partial}{\partial\ln Q}\right\}f(Q)=0 \quad . \tag{3.25}$$

Weitere Informationen bekommen wir durch explizite Benutzung der infinitesimalen speziellen konformen Transformation (3.6) mit der Eigenschaft (3.17)

$$a_\alpha(\mathrm{r}) = r^2 v_\alpha - 2r_\alpha(\mathrm{r}\cdot\mathrm{v}) \quad , \quad v_\perp = 0 \quad , \tag{3.26a}$$

mit dem konstanten infinitesimalen Vektor v, die das System mit der Begrenzung bei $z = 0$ in sich überführt. Nach einsetzen von

$$\frac{\mathrm{div}\,\mathrm{a}(\mathrm{r})}{d} = -2\mathrm{v}\cdot\mathrm{r} \tag{3.26b}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\ln r &= \frac{1}{r}\sum_\alpha a_\alpha \partial_{r_\alpha} r \\ &= -\mathrm{r}\cdot\mathrm{v} \end{aligned} \tag{3.26c}$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{D}\ln Q &= \frac{1}{Q}\sum_\alpha a_\alpha \partial_{r_\alpha} z/r \\ &= -\mathrm{r}\cdot\mathrm{v} \quad . \end{aligned} \tag{3.26d}$$

in (3.25), erhalten wir

$$\mathrm{r}\cdot\mathrm{v}\left\{\left(x^{(s)}_{\Psi_1} - x_{\Psi_2}\right) - \frac{\partial}{\partial\ln Q}\right\} f(Q) = 0 \quad , \tag{3.27a}$$

mit $\mathrm{r}\cdot\mathrm{v} \neq 0$. Die Lösung dieser Differentialgleichung ist

$$f(Q) = A Q^{x^{(s)}_{\Psi_1} - x_{\Psi_2}} \quad , \tag{3.27b}$$

mit $A = const.$ Damit ist (3.23) bestimmt durch

$$\left\langle \Psi_1(0,0)\Psi_2(r_\parallel, z)\right\rangle_c = A\, z^{-x_{\Psi_2}} (z/r^2)^{x^{(s)}_{\Psi_1}} \quad , \tag{3.27c}$$

oder wegen der Translationsinvarianz im parallelen Unterraum ist

$$\left\langle \Psi_1(r_{\parallel 1}, 0)\Psi_2(r_{\parallel 2}, z)\right\rangle_c = A\, z^{-x_{\Psi_2}} (z/r_{12}^2)^{x^{(s)}_{\Psi_1}} \quad , \tag{3.28a}$$

mit

$$r_{12}^2 = (r_{\parallel_1} - r_{\parallel_2})^2 + z^2 \quad . \tag{3.28b}$$

Da eine konformen Abbildung mit der Eigenschaft (3.17) an der Oberfläche keine Drehung bewirkt, können wir die Gleichung (3.28a) auch für $\Psi_1 \equiv T_{\perp\perp}$ und $x^{(s)}_{T_{\perp\perp}} \equiv x_{T_{\perp\perp}} = d$ benutzen[6]. Die Konstante A erhalten wir einfach aus (3.20) [13]:

$$\int d^{d-1} r_{\parallel_1} \left\langle T_{\perp\perp}(r_{\parallel_1}, 0)\Psi_2(r_{\parallel_2}, z)\right\rangle_c = \partial_z \left\langle \Psi_2(r_{\parallel_2}, z)\right\rangle \quad . \tag{3.29a}$$

[6]Denn unter einer allgemeinen konformen Abbildung $r \to r'$ transformiert sich $T_{\mu\nu}(r) \to b^d(r)\sum_{\alpha\beta} R_{\mu\alpha}(r) R_{\nu\beta}(r) T_{\alpha\beta}(r)$ mit der Rotationamatrix $R_{\mu\alpha}$ aus (3.9), vergl. z.B. Ref. [26].

Einsetzen von (3.28a) in (3.29a) ergibt, wegen

$$\int d^{d-1}r_{\parallel}\,(r_{\parallel}^2+z^2)^{-d} = S_{d-1}\frac{\Gamma\left(\frac{d-1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{d+1}{2}\right)}{2\Gamma(d)}\,z^{-d} \quad , \tag{3.29b}$$

mit der Bezeichnung S_{d-1} für die Oberfläche der $d-1$ dimensionalen Einheitskugel und der gewöhnlichen Gammafunktion Γ [31],

$$A = (-x_{\Psi_2})\,2^d\,S_d^{-1}z^{x_{\Psi_2}}\left\langle\Psi_2(r_{\parallel},z)\right\rangle \quad . \tag{3.29c}$$

Als Resultat erhalten wir die hyperuniverselle Beziehung [13, 16, 26] aus (1.21)

$$\lim_{z\to 0} S_d\left\langle T_{\perp\perp}(r_{\parallel},z)\Psi(r'_{\parallel},z')\right\rangle_c \Big/ \left\langle\Psi(r'_{\parallel},z')\right\rangle = (-)x_{\Psi}2^d\left(z'\,\big/R^2\right)^d \quad , \tag{3.30a}$$

mit

$$R^2 = (r_{\parallel}-r'_{\parallel})^2+(z')^2 \quad . \tag{3.30b}$$

Die Größe $\left\langle\Psi(r_{\parallel},z)\right\rangle$ hat (nach Voraussetzung) ein nichtverschwindendes Profil am Fixpunkt, wie z.B. $\Psi=\Phi$ oder $\mathcal{E}$ am EX-Übergang, oder $\Psi=\mathcal{E}$ am O- oder SB-Übergang.

3.4 Verhalten des Spannungstensors am außergewöhnlichen und normalen Übergang

Aus der Definition (3.10a) und den Eigenschaften (3.13) bis (3.14) ergibt sich die explizite Gestalt des Spannungstensors [20]

$$T_{\mu\nu}(r) = (\partial_\mu\Phi)(\partial_\nu\Phi) - \delta_{\mu\nu}\left[\tfrac{1}{2}(\nabla\Phi)^2+\mathcal{L}_B(\Phi)\right] - I_{\mu\nu}(r) \quad , \tag{3.31a}$$

mit

$$I_{\mu\nu}(r) = \frac{1/4}{d-1}\left\{d-2+O((u^R)^3)\right\}\left[\partial_\mu\partial_\nu-\delta_{\mu\nu}\Delta\right]\Phi^2 \quad , \tag{3.31b}$$

dem sogenannten "Verbesserungsterm" und $\partial_\mu \equiv \partial_{r_\mu}$. Die Diskussion und Erläuterung zu $T_{\mu\nu}\equiv T^{(c)}_{\mu\nu}-I_{\mu\nu}$ erfolgte bereits in dem Abschnitt nach (3.16). [Der kanonische Tensor $T^{(c)}_{\mu\nu}$ ergibt sich (per Definition) einfach aus der Variation des Volumen-Hamiltonians (3.10a) unter einer infinitesimalen allgemeinen Koordinatentransformation.] Der $O((u^R)^3)$-Term enthält $1/\epsilon$-Pole, zur Renormierung von $T_{\mu\nu}$ in höheren "Loop-Ordnungen" in Korrelationsfunktionen. Damit wirkt $I_{\mu\nu}$ einerseits als Counterterm, und bewirkt andererseits die Spurfreiheit $T_{\mu\nu}$ am kritischen Fixpunkt (bis auf δ-Funktionen), vergl. die Diskussion nach (3.16). Dies hat Brown [20] im Volumen gezeigt. Anschaulich läßt sich die Oberfläche jedoch auch durch Operatoren in einem unbegrenzten System darstellen, daher erwarten wir intuitiv für $T_{\mu\nu}$ die

gleichen Eigenschaften auch an inneren Punkten im Halbraum [2, 14], vergl. Abschnitt 3.2.[7] Aus (3.20) erhalten wir die in (1.19) benutzte Verschiebungsidentität (vergl. Anhang C)

$$\int d^{d-1}r_\parallel \left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\, \Xi(r'_\parallel, z')\right\rangle_c = \begin{cases} \partial_{z'} \left\langle \Xi(r'_\parallel, z')\right\rangle & , \quad z < z' \\ 0 & , \quad z > z' \end{cases} \quad . \tag{3.32}$$

Am kPV mit $t = 0$ ist nach (1.11) $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\right\rangle = 0$ und somit der Abzug $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\right\rangle \left\langle \Xi(r'_\parallel, z')\right\rangle$ in (3.32) nicht notwendig. Aus der Kontinuitätsgleichung (3.15), die $T^{(c)}_{\mu\nu}$ und $I_{\mu\nu}$ separat erfüllen, folgt wegen der Translationsinvarianz im parallelen Unterraum $\partial_{r_\parallel} \left\langle T_{\mu\nu}(r_\parallel, z)\right\rangle = 0$, die Erhaltung [3]

$$\partial_z \left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\right\rangle = 0 \quad , \tag{3.33}$$

für die Halbraum- und Film-Geometrie, vergl. (1.11), (1.16) und die explizite Rechnung (A.24g). Nun diskutieren wir das Oberflächenverhalten der Komponenten $T_{\perp\parallel}$ und $T_{\parallel,\parallel}$ ($\parallel$ bezeichnet eine beliebige laterale Komponente). Wir werden (in leitender Ordnung) zunächst zeigen, daß die Relation (3.21) darüberhinaus am EX-Fixpunkt der Oberfläche $[(c \to -\infty, h_1 = 0)$ bzw. $(c \to \mathrm{sign}(c)\infty, h_1 \to \infty)]$ für *beliebiges* t und u gültig ist, wie am O-Fixpunkt für beliebiges [13] u in der Ordnung $O(u)$ bei $t = 0$, und für das Gauß-Modell [4] für beliebiges t bereits gezeigt worden ist. Daraus folgt mit der Kontinuitätsgleichung (3.15) $\lim_{z\to 0} \partial_z T_{\perp\perp}(r_\parallel, z) = 0$, und damit die Existenz unseres KDE-Operators $\lim_{z\to 0} T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)$ an der Oberfläche, vergl. die Fußnote nach (3.21). Anschließend berechnen wir $\left\langle T_{\parallel,\parallel}(r_\parallel, z)\right\rangle$. Wir werden erkennen, daß diese Größe für $z \to 0$ *nur* am kritischen Fixpunkt existiert. Damit ist wie in der Einleitung zur KDE (1.9) ausgeführt, nur die Komponente $T_{\perp\perp}$ als Oberflächenoperator geeignet.

Wir beginnen mit

$$\lim_{z\to 0} T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z) = 0 \tag{3.34}$$

am EX-Fixpunkt der Oberfläche (siehe oben), für beliebiges t und u.

In leitender Ordnung genügt es, das Verschwinden von $\left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\Phi(r'_\parallel, z')\right\rangle_c$ und von $\left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\right\rangle$ im Limes $z \to 0$ zu zeigen. Alle höheren Korrelationen mit Φ und Φ^2 lassen sich dann mit dem Wick-Theorem darauf zurückführen.

Mit $T_{\perp\parallel}$ aus (3.31) und der Zerlegung von Φ aus (2.5a) mit $m = \overset{0}{m}$ ist

$$\left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\Phi(r'_\parallel, z')\right\rangle_c = \left[\left(\partial_z \overset{0}{m}_t(z)\right) - \frac{1}{2}\frac{d-2}{d-1}\partial_z \overset{0}{m}_t(z)\right] \partial_\parallel \left\langle \varphi(r_\parallel, z)\varphi(r'_\parallel, z')\right\rangle_0 \tag{3.35a}$$

in leitender Ordnung u und für beliebiges t.

[7] Wie bereits in Gleichung (1.11) sichtbar wurde, benötigt $T_{\mu\nu}$ für $t \neq 0$ eine *zusätzliche* additive Renormierung in Korrelationsfunktionen, wie z.B. $\langle T_{\mu\nu}\rangle_\pm$, vergl. Anhang B.

Zur Benutzung unseres Resultates $\tilde{G}_t = \tilde{G}_t(p; z, z')$ im Limes $z \to 0$ aus (2.9j) bilden wir die laterale Fourier-Transformierte von (3.35a) und erhalten

$$\begin{aligned} \int d^{d-1} r_\parallel e^{ip\cdot r_\parallel} \left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\Phi(r'_\parallel, z')\right\rangle_c &= (-ip)\left[\left(\partial_z \overset{0}{m}_t(z)\right) - \frac{1}{2}\frac{d-2}{d-1}\partial_z \overset{0}{m}_t(z)\cdot\right]\tilde{G}_t \\ &\to 0 \quad , \end{aligned} \tag{3.35b}$$

für $z \to 0$. Die zweite Zeile ergibt sich aus (2.9i) folgende. Damit haben wir das Resultat

$$\lim_{z\to 0}\left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\Phi(r'_\parallel, z')\right\rangle_c = 0 \tag{3.35c}$$

für beliebiges t und u in leitender Ordnung in u gezeigt.

Nun ist noch

$$\lim_{z\to 0}\left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\right\rangle = 0 \tag{3.35d}$$

in leitender Ordnung in u zu zeigen.

Wir benutzen die Kontinuitätsgleichung (3.15) und erhalten wegen der lateralen Translationsinvarianz die Erhaltung

$$\partial_z \left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\right\rangle = 0 \quad . \tag{3.35e}$$

Es genügt also die Berechnung von $\left\langle T_{\perp\parallel}(r_\parallel, z)\right\rangle$ im unbegrenzten Raum:

$$\begin{aligned} \left\langle T_{\perp\parallel}(r)\right\rangle_b &= \left\langle (\partial_z\Phi(r))(\partial_\parallel\Phi(r))\right\rangle_b - \frac{1}{4}\frac{d-2}{d-1}\partial_z\partial_\parallel \left\langle \Phi^2(r)\right\rangle_b \\ &= \lim_{r'\to r}\left[\partial_{z'}\partial_\parallel \left\langle \Phi(r)\Phi(r')\right\rangle_0\right] \\ &= 0 \quad . \end{aligned} \tag{3.35f}$$

Die letzte Zeile folgt einfach aus der dimensionsregularisierten Fourier- oder Ortsdarstellung, vergl. die Argumentation im Anhang B. Damit verschwindet $\left\langle T_{\perp\parallel}\right\rangle$ auch im Halbraum für beliebiges t und u (in leitender Ordnung) am EX-Fixpunkt der Oberfläche. Die Relation (3.35d) ist somit als Spezialfall gezeigt.

Nun betrachten wir aus (3.31)

$$\begin{aligned} \left\langle T_{\parallel,\parallel}(r_\parallel, z)\right\rangle &= -\frac{1}{2}(\partial_z \overset{0}{m})^2 - \mathcal{L}_B(\overset{0}{m}) + \frac{1}{4}\frac{d-2}{d-1}\partial_z^2(\overset{0}{m})^2 \\ &= \frac{18}{u}\left(\frac{d-2}{d-1} - \frac{2}{3}\right) z^{-4} \end{aligned} \tag{3.36}$$

in leitender Ordnung in u. Das $t = 0$ Resultat mit $\overset{0}{m}$ aus (2.6) ist in der letzten Zeile notiert. Für beliebiges u *divergiert* dieser Wert an der Oberfläche. Nur am Fixpunkt verschwindet dieser Ausdruck in leitender Ordnung in ϵ, konsistent mit der Spurfreiheit (3.14), und mit $\langle T_{\perp\perp}\rangle$ aus (1.11).

Die Korrelationsfunktion $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z \to 0)\, \Psi(r'_\parallel, z') \right\rangle$ mit $\Psi = \Phi$ oder $\mathcal{E}$ haben wir am kritischen Fixpunkt in (3.30a) berechnet. Durch einsetzen von (1.9) in (3.30a) erhalten wir (1.22), da die Punkte in der KDE (1.9) Operatoren mit größerer Skalendimension als d bezeichnen, so daß deren Beiträge nach Division durch z^d im Limes $z \to 0$ verschwinden (und weil nun $\langle T_{\perp\perp} \rangle = 0$ ist, vergl. (1.11)). MacAvity und Osborne [26] haben gezeigt, daß der Halbraum-Ausdruck $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\Psi(r'_\parallel, z') \right\rangle \Big/ \left\langle \Psi(r'_\parallel, z') \right\rangle$ auch für $z > 0$ von der Universalitätsklasse der Oberfläche *unabhängig* (hyperuniversell) ist. Der einfache Fall einer senkrechten Geometrie mit $(r_\parallel, z) \equiv (0, z)$ und $(r'_\parallel, z') \equiv (0, z')$ wird darüberhinaus *auch* durch (3.30a) beschrieben, mit $T_{\perp\perp}(0, z)$ und $\Psi(0, z')$, wenn R^2 in (3.30b) durch $|\, z^2 - (z')^2 \,|$ ersetzt wird, siehe (3.46).

Von besonderem Interesse ist die 2-Punkt-Funktion $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z) T_{\perp\perp}(r'_\parallel, z') \right\rangle$ am kritischen Fixpunkt, da einerseits ihr Oberflächenlimes $z, z' \to 0$ die Gleichung (1.22) bestimmt, andererseits ihre Nichthyperuniversalität in $d > 2$ Dimensionen erst kürzlich gezeigt worden ist [13, 26]. Zum Studium dieses Verhaltens betrachten wir daher den Übergang ("crossover") vom Oberflächen- zum Volumenverhalten: Wir werden die 2-Punkt-Funktion in leitender Ordnung berechnen, und können damit die KDE (1.9) durch die Relation (1.23) auf einem anderen Weg überprüfen. Am Ende dieses Kapitels dann erklären wir ihre Nichthyperuniversalität in $d = 4 - \epsilon > 2$ Dimensionen durch ein *einfaches allgemeines* Argument.

MacAvity und Osborne erhielten durch die Konforme Invarianz auch ein besonders einfaches Resultat für die 2-Punkt-Funktion einer senkrechten Geometrie am kritischen Fixpunkt [26]

$$\langle T_{\perp\perp}(0, z)\, T_{\perp\perp}(0, z') \rangle = \alpha(v)\, |z - z'|^{-2d} \tag{3.37a}$$

mit

$$v = |z - z'| / (z + z') \quad . \tag{3.37b}$$

Die Skalenfunktion $\alpha(v)$ hängt von der Oberflächenuniversalitätsklasse ab und bestimmt im Oberflächenlimes $v \to 1$ auch das Verhältnis C_Ψ / x_Ψ aus (1.22) mit [13, 26]

$$\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, 0)\, T_{\perp\perp}(r'_\parallel, 0) \right\rangle \left| r_\parallel - r'_\parallel \right|^{2d} = \alpha(1) \quad . \tag{3.38}$$

Nun werden wir mit der Fluktuations- und ϵ-Entwicklung für den EX-Übergang in leitender Ordnung die Gleichung (3.30a) und die Verschiebungsidentität (3.32) (in nächstleitender Ordnung im Anhang C) verifizieren, und die Funktion $\alpha(v)$ in (3.37a) berechnen.

Wegen der gebrochenen Symmetrie benutzen wir die Zerlegung des OP-Feldes (2.5a) und setzen diese in die Gleichungen (3.31a) und (3.31b) für $T_{\perp\perp}$ ein. Nach ausmultiplizieren und sortieren der verschiedenen φ-Potenzen erhalten wir das Resultat

$$T_{\perp\perp} = \sum_{n=0}^{4} T_n \quad , \tag{3.39}$$

mit

$$
\begin{aligned}
T_0 &= \tfrac{1}{2}\left(\partial_z m\right)^2 - \mathcal{L}_B(m) \quad , && (3.39a)\\
T_1 &= \left(\partial_z \varphi\right)\left(\partial_z m\right) - \varphi \mathcal{L}_B'(m) + m\left(\mathcal{D}_\parallel \varphi\right) \quad , && (3.39b)\\
T_2 &= \tfrac{1}{2}\left(\partial_z \varphi\right)^2 - \tfrac{1}{2}\left(\partial_{r_\parallel}\varphi\right)^2 - \tfrac{1}{2}\varphi^2 \mathcal{L}_B''(m) + \tfrac{1}{2}\left(\mathcal{D}_\parallel \varphi^2\right) \quad , && (3.39c)\\
T_3 &= -\tfrac{u}{6}\varphi^3 m \quad , && (3.39d)\\
T_4 &= -\tfrac{u}{4!}\varphi^4 \quad . && (3.39e)
\end{aligned}
$$

Hierbei bezeichnen die Striche an $\mathcal{L}_B$ jeweils Ableitungen nach dem Argument. Die Größe $\mathcal{D}_\parallel$ ist der Differentialoperator

$$
\mathcal{D}_\parallel = \frac{1/2}{d-1}\left\{d - 2 + O((u^R)^3)\right\} \sum_{\alpha \in \parallel} \partial_{r_\alpha}^2 \quad , \tag{3.39f}
$$

der vom Verbesserungsterm aus (3.31b) stammt.

Wir berechnen zunächst das leitende Verhalten ("0-Loop, Mean Field") von $\langle T_{\perp\perp}\rangle = \langle T_{\perp\perp}\rangle^{(0)} + \cdots$ für eine Film-Geometrie. Der leitende Beitrag zu $T_{\perp\perp}$ ist durch (3.39a) gegeben, mit der Ersetzung von m durch das "Mean-Field"-Profil $\overset{0}{m}$. Wir vergleichen (3.39a) mit unseren expliziten Resultaten (A.19) und (A.20), und erhalten konsistent mit (1.15)[8] das alte Resultat (A.24)

$$
\langle T_{\perp\perp}\rangle^{(0)} = E \quad . \tag{3.40}
$$

Damit hat die Erhaltung dieser Spannungstensorkomponente eine anschauliche physikalische Bedeutung: die Gesamtenergie des korrespondierenden Newton-Systems ist unabhängig von der "Zeit" z und damit erhalten, vergl. (A.20) folgende. Im Fall des Halbraum-Systems mit Temperatur $t \geq 0$ muß die Gesamtenergie $E = 0$ sein, damit das Teilchen zur "Zeit" $z \to \infty$ am "Ort" $\overset{0}{m} = 0$ zur Ruhe kommt. [Das ergibt sich explizit für $t = 0$ durch einsetzen von $\overset{0}{m}$ aus (2.6) in (3.39a)]. Dies ist konsistent mit (1.11) für $\xi \to \infty$ und mit $\langle T_{\perp\perp}\rangle_{bulk} \sim O(u^0)$ für $t \geq 0$, vergleiche (B.8b), d.h. der $O(u^{-1})$ Beitrag aus (3.39a) muß dann verschwinden.

Nun werden wir (3.30a) in leitender Ordnung verifizieren. Wir beginnen mit $\Psi \equiv \Phi$ und benutzen die Zerlegung (2.5a). In leitender Ordnung u trägt von (3.39) nur T_1 aus (3.39b) bei, und mit dem gaußschen Propagator (A.9) ergibt sich

$$
\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\, \Phi(r_\parallel', z')\right\rangle = \left\{(\partial_z \overset{0}{m})\partial_z - \mathcal{L}_B'(\overset{0}{m}) + \overset{0}{m}\, \mathcal{D}_\parallel\right\} G(r_\parallel - r_\parallel'; z, z') + O(u^{1/2}) \, , \tag{3.41}
$$

mit dem Profil $\overset{0}{m} = \overset{0}{m}(z)$ in leitender Ordnung. Am kPV mit $t = 0$ erhalten wir $\overset{0}{m}$ aus (2.6) und G durch Fourier-Transformation aus (2.8c). Um in (3.41) den Limes $z \to 0$ entsprechend (3.30a) durchzuführen, benötigen wir das asymptotische

[8] Vergleiche die Fußnote vor (3.19).

Verhalten von

$$S_d\, G(r_\parallel - r'_\parallel; z, z') \to z^3\, (z')^3\, \frac{8}{15}\, \frac{d}{2} \left(\frac{d}{2}+1\right) R^{-(d+4)} \quad , \tag{3.42}$$

im Limes $z \to 0$ und mit R aus (3.30b) [und ist konsistent mit (2.10)]. Hierzu haben wir (2.7), (2.8b), (2.8c) und (2.8e) benutzt. Einsetzen von (3.42) in (3.41) ergibt

$$\lim_{z\to 0} S_d \left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\, \Phi(r'_\parallel, z') \right\rangle \Big/ \left\langle \Phi(r'_\parallel, z') \right\rangle \;=\; -(z')^4\, \frac{8}{3} \left(\frac{d}{2}+1\right) \frac{d}{2}\, R^{-(d+4)} \;+\; O(u) \tag{3.43}$$

für $t = 0$, und ist wegen (2.13) konsistent mit dem hyperuniversellen Ausdruck (3.30a) (wenn $d \to 4$ in leitender Ordnung ϵ). Die KDE (1.9) mit der Amplitude (2.12), in der Schichtsuszeptibilität (2.10) und dem Propagator $\langle \Phi(r)\Phi(r')\rangle$ aus (3.42), ist konsistent mit (3.43). Hierbei ist zu beachten, daß die Gleichungen (3.30a) und (3.37a) nur am kritischen Fixpunkt mit Konformer Invarianz gültig sind. Demgegenüber sind die Verschiebungsidentitäten (3.32) und die Erhaltung (3.33) auch für $t \sim T - T_{cb} \neq 0$ (und $u^R \neq u^{*R}$) gültig, da die Kontinuitätsgleichung (3.15) *unabhängig* von t (und der β-Funktion) ist [20], vergl. (3.15).

Die Verschiebungsidentität (3.32) mit $\Xi \equiv \Phi$ ist in leitender Ordnung leicht mit (3.41) zu verifizieren. Dazu integrieren wir (3.41) über $r'_\parallel$, dies ersetzt G durch $\tilde{G}(p=0; z, z') = \overset{0}{\chi}_{\Phi,\Phi}(z, z')$, und der $\mathcal{D}_\parallel$-Term verschwindet. Die Größen $\tilde{G}_t$ und $\overset{0}{m}_t$ für $t \neq 0$ lassen sich den Gleichungen (2.9) entnehmen. Für $t = 0$ sind sie durch die Gleichungen (2.10) und (2.6) gegeben, und die entsprechende Rechnung (3.32) durch (C.3).

Ähnlich diskutieren wir (3.30a) mit $\Psi \equiv \Phi^2$. Der leitende Beitrag zu $\langle T_{\perp\perp}\Phi^2\rangle$ ist $2\,\langle T_1\varphi\rangle^{(0)}\, \overset{0}{m}$, und konsistent mit (3.30a) und (3.32) (wegen $x_\mathcal{E} = 2 + O(\epsilon)$ und (C.3)). Die Verifikation von (3.32) für $t = 0$ in der nächstleitenden Ordnung findet sich im Anhang C.

Nun berechnen wir die 2-Punkt-Korrelationsfunktion des Spannungstensors (3.37a) in leitender Ordnung am kritischen Fixpunkt mit $t = 0$. Wieder tragen nur die T_1-Terme aus (3.39b) bei, mit der Substitution von m durch $\overset{0}{m}$. In leitender Ordnung trägt auch der $O[(u^R)^3]$ Beitrag zu $\mathcal{D}_\parallel$ aus (3.39f) nicht bei, und wir können d gleich 4 setzen. Zur Vereinfachung ersetzen wir mit der Bewegungsgleichung (A.10a) $\mathcal{D}_\parallel$ in T_1, und erhalten

$$\langle T_{\perp\perp}(0, z)\, T_{\perp\perp}(0, z')\rangle = \mathcal{F}_z \mathcal{F}_{z'} G(0; z, z') \quad , \tag{3.44a}$$

mit

$$\mathcal{F}_z \equiv (\partial_z\, \overset{0}{m})\partial_z - \tfrac{1}{3}\, \overset{0}{m}\, \partial_z^2 \quad , \tag{3.44b}$$

$\overset{0}{m} = \overset{0}{m}(z)$ aus (2.6) und $t = 0$. Für die Berechnung von (3.44a) können wir entweder die nützliche Darstellung des Propagators in $d = 4$ Dimensionen für $t = 0$ aus

Gleichung (4.96b) der Ref. [25] entnehmen:

$$G(r_{\|} - r'_{\|}; z, z') = F(Q) \Big/ \left(4\pi^2 R^2\right) \quad , \tag{3.45a}$$

mit

$$R = |r - r'| \quad , \tag{3.45b}$$
$$Q = R^2/(4zz') \tag{3.45c}$$

und

$$F(Q) = (Q+1)^{-1} + 12Q - 6Q(1+2Q)\ln\left(Q^{-1}+1\right) \quad , \tag{3.45d}$$

oder benutzen die von MacAvity und Osborne [26] aus der Konformen Invarianz am kritischen Fixpunkt (mit $t = 0$) folgende Verallgemeinerung von (3.30a):

$$S_d \langle T_{\perp\perp}(0,z)\, \Psi(0,z')\rangle / \langle \Psi(0,z')\rangle \;=\; -2^d x_\Psi (z' \Big/ |z^2 - (z')^2\,|)^d \quad , \tag{3.46}$$

für $\Psi = \Phi$ und $\langle\Phi\rangle = \overset{0}{m}(z) + O(u^{1/2})$, vergleiche den nächsten Absatz hinter Gleichung (3.36).

Nach kurzer Rechnung erhalten wir die Form (3.37a) und die Skalenfunktion in leitender Ordnung ϵ

$$\alpha(v) = \frac{1}{\epsilon}\,\frac{30}{\pi^4}\, v^2 \left[1 + v^2 + v^4\right] + O(\epsilon^0) \quad , \tag{3.47}$$

nach einsetzen der Reparametrisierung (2.2c) für u^{-1}, und des Fixpunktwertes u^{*R} aus (2.4) in leitender Ordnung ϵ. Das Resultat $\alpha(1)$ aus (3.47) ist konsistent mit den allgemeinen Beziehungen (3.38) und (1.22), wie wir mit $C_\Phi^{(1)}$ aus (2.12) und x_Φ aus (2.13) zeigen können.

Wir betrachten nun die Skalenfunktion $\alpha(v)$ im Volumengrenzfall $v \to 0$. Im unbegrenzten Volumen ist $\alpha(0) \sim O(\epsilon^0)$, daher muß der $1/\epsilon$-Beitrag in (3.47) die Oberflächenkorrektur in diesem Volumengrenzfall beschreiben. Zur Untersuchung der (allgemeinen) Natur der Oberflächenkorrektur im Crossover vom Oberflächen- zum Volumenverhalten, machen wir eine KDE des Operator-Produktes

$$T_{\perp\perp}(0,z)\, T_{\perp\perp}(0,z') - \alpha(0)\, |z-z'|^{-2d} \sim |z-z'|^{-2d+x_\varepsilon}\, \Phi^2\left(0, \frac{z+z'}{2}\right) + \ldots \quad , \tag{3.48}$$

im Volumengrenzfall $v = |(z-z')/(z+z')| \ll 1$ um den inneren Punkt $(z+z')/2$ des Halbraums. Wegen ihres *lokalen* Charakters ist die KDE um einen *inneren* Punkt unabhängig von der Geometrie des Systems [2], dies korrespondiert mit dem naiven Bild einer Oberfläche als $(d-1)$ dimensionales "Feld" von Operatoren in einem unbegrenzten System. Das bedeutet, daß die Entwicklung (3.48) *nur* von Volumengrößen abhängt. Wie üblich in der KDE (Operator-Produkt-Entwicklung (OPE) im unbegrenzten Volumen) stehen auf der rechten Seiten von (3.48) Operatoren mit

ansteigender (Volumen-) Skalendimension, die mit der Symmetrie der linken Seite verträglich sind [2, 19]. Da $T_{\perp\perp}$ eine gerade $\Phi \to -\Phi$ Symmetrie im Volumen hat, ist der leitende Operator in der Entwicklung in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen Φ^2, der das Volumenverhalten $v = 0$ beschreibende Einheitsoperator wurde abgezogen, mit der Skalendimension $x_{\Phi^2} \equiv x_{\mathcal{E}}$, vergleiche (2.18a). Die Punkte auf der rechten Seite von (3.48) bezeichnen dann Beiträge von Operatoren mit größerer Skalendimension als $x_{\mathcal{E}}$ und einer geraden $\Phi \to -\Phi$ Symmetrie (d.h. u.a. von nächstleitenden Operatoren mit der Skalendimension $\simeq d$ wie z.B. $T_{\perp\perp}$).

Die Proportionalitätskonstante in (3.48) enthält neben einer Volumen-KDE-Amplitude insbesondere alle für die Renormierung der rechten Seite nötigen Volumen-Faktoren, da die KDE (OPE) in renormierten Korrelationsfunktionen gilt, d.h. Relationen zwischen *renormierten* Korrelationsfunktionen erzeugt [2, 19]. Daraus ergibt sich[9], daß diese Konstante zusätzlich einen Faktor Z_t enthalten muß, um Φ^2 zu renormieren, aus Dimensionsgründen eine Potenz der inversen Längenskala μ, und eine nichtuniverselle Volumenamplitude, die gegen eins geht für u^R gegen u^{*R}, wie sich aus dem üblichen RG-Argument ergibt [2, 4]. [Hier hängt die Proportionalitätskonstante *nicht* von der Oberflächenuniversalitätsklasse ab. Dies ist konträr zu der KDE (1.9), weil die Oberfläche dort die "Rolle des zweiten Operators" übernimmt und die Eigenschaften der zu entwickelnden Operatoren natürlich eingehen.] Wir erhalten dann unmittelbar durch Mittelwertbildung die Verletzung der Hyperuniversalität der 2-Punkt-Funktion aus (3.48) in $d = 4 - \epsilon > 2$ Dimensionen, da das kritische Profil $\langle\Phi^2\rangle_a \sim z^{-x_{\mathcal{E}}}$ im Halbraum über die *Amplitude* vom Typ a der Oberfläche abhängt. Diese äußert sich dann in der entsprechenden Abhängigkeit der Skalenfunktion vom Oberflächentyp

$$\alpha(v) - \alpha(0) = A_a\, v^{x_{\mathcal{E}}} + \dots \quad , \tag{3.49a}$$

im "Volumenlimes" $v \to 0$ am kritischen Fixpunkt. Die Amplitudenverhältnisse A_a/A_b für verschiedene Oberflächenuniversalitätsklassen a, b erfüllen die Relation

$$A_a/A_b = \left\langle\Phi^2\right\rangle_a \Big/ \left\langle\Phi^2\right\rangle_b \quad . \tag{3.49b}$$

In leitender Ordnung in ϵ können wir (3.49b) für den außergewöhnlichen Übergang $a = EX$ und den gewöhnlichen Übergang $b = O$ leicht verifizieren. Dazu benutzen wir $A_{EX} = 30/(\pi^4\epsilon)$ aus Gleichung (3.47), $x_{\mathcal{E}} = 2 + O(\epsilon)$, und $A_O = -5/(6\pi^4)$ aus Gleichung (3.4) der Referenz [26]. Die Fixpunktwerte $\langle\Phi^2\rangle_{EX} = 9/(4\pi^2 z^2\epsilon)$ aus (2.6), (2.2c), (2.3c) und (2.4), und $\langle\Phi^2\rangle_O = -G_{bulk}(2z) = -1/(16\pi^2 z^2)$ (nur der Spiegelterm [2] bleibt in Dimensionsregularisierung). Wir erhalten dann für die beiden Verhältnisse aus (3.49b) das konsistente Resultat $-36/\epsilon$.

Die Verletzung der Hyperuniversalität der 2-Punkt-Funktion des Spannungstensors in $d = 4 - \epsilon > 2$ Dimensionen haben wir also auf den leitenden Operator $\mathcal{E}$ in der KDE (3.48) zurückgeführt. Dies gilt jedoch *nicht* in $d = 2$ Dimensionen,

[9] Es ist [2, 4] $\langle\Phi^2\rangle = \mu^{d-2} Z_t^{-1}[\langle(\Phi^R)^2\rangle - a t^R]$.

denn dort ist $\langle TT \rangle$ hyperuniversell [21], d.h. von der Oberflächenuniversalitätsklasse unabhängig, vergl. die Bemerkungen nach (1.22). In $d = 2$ erscheinen daher auf der rechten Seite von (3.48) nur Potenzen $\mid z - z' \mid^{-4+\tilde{x}}$, mit $\tilde{x} = 2, 3, 4 \ldots$ [32]. Für den Exponenten der Energiedichte der Ising-Universalitätsklasse in $d = 2$ gilt nämlich: $x_{\mathcal{E}} = 1$, d.h. $x_{\mathcal{E}} \neq \tilde{x}$ kommt dann *nicht* auf der rechten Seite vor, und die entsprechende KDE-Amplitude vor Φ^2 muß *null* sein.

Ähnlich läßt sich der Einfluß der Oberfläche auf $\langle T_{\perp\perp}(0, z)\Psi(0, z') \rangle$ im Volumengrenzfall $|\frac{z-z'}{z+z'}| \ll 1$ studieren. Die KDE [33] $T_{\perp\perp}\Psi \sim \Psi + \cdots$ für $\Psi = \Phi$ und Φ^2 in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen, ergibt sich wieder aus Symmetriegründen und Berücksichtigung des *leitenden* singulären Anteils. Diese Entwicklung ist konsistent mit dem hyperuniversellen Ausdruck $\langle T_{\perp\perp}\Psi \rangle / \langle \Psi \rangle$ aus (3.46), da nun die oberflächenabhängige Amplitude in $\langle \Psi \rangle_a$ herausfällt.

Kapitel 4

Schichtsuszeptibilitäten

In diesem Kapitel werden wir die Schichtsuszeptibilitäten (1.19) in nächstleitender Ordnung in u ("1-Loop") berechnen. Wir betrachten dazu den Limes $z \to 0$ dieser Größen und verifizieren explizit die KDE (1.9), insbesondere an Hand der erwarteten (Form der) Faktorisierung in "kurze" (z) und "lange" Längenskalen (z' durch $T_{\perp\perp}$), und der Bestätigung von (1.20). Die Relation (1.20) benutzen wir nämlich einerseits zur Verifikation des Ansatzes (1.9), und andererseits zur expliziten Berechnung der KDE-Amplituden C_Φ und $C_\mathcal{E}$ in zweiter Ordnung in ϵ.

Wir beginnen mit der OP-Suszeptibilität $\chi_{\Phi,\Phi}$, d.h. mit (1.19) und $\Psi = \Xi = \Phi$. Nach einsetzen der OP-Zerlegung (2.5a) ist der Integrand auf der rechten Seite von (1.19) der (verbundene) Propagator $\langle\varphi\varphi\rangle$ mit der Störungsentwicklung ("Loop-Entwicklung")

$$\left\langle \varphi(r_\parallel, z)\varphi(r'_\parallel, z') \right\rangle = A + B + C + D + O(u^2) \quad . \tag{4.1}$$

Hier ist A der gaußsche Propagator (A.9), der sich aus den Gleichungen (2.7) und (2.8c) ergibt, und B, C und D sind Beiträge nächstleitender Ordnung $O(u)$ ("1-Loop"-Terme):

$$B + C = -u \int d^dR\, G(r,R)\, \gamma_{B+C}(R_\perp)\, G(R,r') \quad , \tag{4.2}$$

mit

$$\gamma_{B+C}(R_\perp) = \overset{0}{m}(R_\perp)\, \overset{I}{m}(R_\perp) + \tfrac{1}{2}\left\langle \varphi^2(R) \right\rangle_0 \tag{4.2a}$$

und

$$D = \frac{u^2}{2} \int d^dR\, d^dR'\ \overset{0}{m}(R_\perp)\, \overset{0}{m}(R'_\perp)\, G(r,R)\, [G(R,R')]^2\, G(R',r') \quad . \tag{4.3}$$

Die Integrale sind über den Halbraum $z \geq 0$. Die Bezeichnung der Argumente in G ist etwas anders als in (2.7) und (A.9), hier ist $R \equiv (R_\parallel, R_\perp)$ etc. Die Größe $\overset{I}{m}$ ist der *nächstleitende* Fluktuationsbeitrag zum OP-Profil (A.14), mit $\mathcal{J} = u\,\overset{0}{m}\,\langle\varphi^2\rangle_0/2$, in dieser Ordnung. Die nächstleitenden ("1-Loop") Beiträge (4.2) und (4.3)

folgen aus (A.6), (A.5), (A.11) und dem Wick-Theorem: $B + C$ ergeben sich aus einer Entwicklung des Boltzmanngewichts in erster Ordnung in $\mathcal{H}_2'$ and $\mathcal{H}_4'$, und D aus der Entwicklung nach $\mathcal{H}_3'$ in zweiter Ordnung. Die entsprechenden Beiträge zur Schichtsuszeptibilität $\chi_{\Phi,\Phi}$ erhalten wir nach Parallelintegration aus (1.19), und bezeichnen sie mit $\chi^{(B+C)}$ und $\chi^{(D)}$.

Der Fluktuationsbeitrag $\overset{I}{m}$ aus (4.2a) folgt aus (A.14) mit dem oben definierten $\mathcal{J}$ und dem gaußschen Propagator aus (A.9), (2.7) und (2.8c). Der "1-Loop"-Beitrag zur Energiedichte $\langle\varphi^2\rangle_0$ in $O(u^0)$, ergibt sich aus der Impulsintegration von (2.7) und Dimensionsregularisierung: Integrale über reine p-Potenzen verschwinden und die aus den übrigen p-Integralen resultierenden Γ-Funktionen, die für $2 < \epsilon < 3$ definiert sind, werden analytisch nach $0 < \epsilon < 2$ fortgesetzt, und wir erhalten (4.5). Die Resultate dieser Rechnungen sind

$$\overset{I}{m}(z) = -\frac{(3u)^{1/2}}{(1+\epsilon)(4-\epsilon)}\, z\, \left\langle \varphi^2(r_\parallel, z)\right\rangle_0 \tag{4.4}$$

und

$$\left\langle \varphi^2(r_\parallel, z)\right\rangle_0 = \mathcal{P}\, z^{\epsilon-2} \quad , \tag{4.5}$$

mit

$$\mathcal{P} = -\omega\, 2^{\epsilon-3}\, \Gamma(2-\epsilon)\, \frac{(4-\epsilon)(6-\epsilon)}{\epsilon\,(2+\epsilon)} \tag{4.5a}$$

und ω aus (C.7).

Die OP-Schichtsuszeptibilität erhalten wir durch Parallelintegration von (4.1), entsprechend (1.19). Dadurch werden in (4.2) und (4.3) die äußeren G's durch $\overset{0}{\chi}$'s, $[G(R,R')]^2$ durch die in (C.6) definierte Größe $\mathcal{B}(R_\perp, R'_\perp)$, und die Halbraum-Integrale durch eindimensionale Integrale über die Senkrecht-Komponenten $R_\perp$ und $R'_\perp$ ersetzt. Für $z < z'$ ist das Resultat

$$\chi_{\Phi,\Phi}(z,z') \;=\; z'\,\frac{1}{5}\zeta^3\left\{1 + u\,(z')^\epsilon\,(3\omega/10)\left[\mathcal{S}\left(\frac{\zeta^\epsilon}{5+\epsilon} + \frac{1-\zeta^\epsilon}{\epsilon} + \frac{1}{5-\epsilon}\right) + F_D(\zeta)\right]\right\}\,, \tag{4.6}$$

in 1-Loop-Ordnung (d.h. bis auf Korrekturen $O(u^2)$). Mit

$$\zeta = z/z' \tag{4.7}$$

und

$$\mathcal{S} = \mathcal{P}\left[\frac{12}{(1+\epsilon)(4-\epsilon)} - 1\right]/(3\omega) \quad . \tag{4.8}$$

Der erste Term in der eckigen Klammer in (4.6) stammt von der verbleibenden $R_\perp$-Integration in $B + C$ aus (4.2), der zweite F_D resultiert aus D aus (4.3) und ist

gegeben durch:

$$
\begin{aligned}
F_D(\zeta) &= \int_1^\infty d\mathcal{Z}\, g\, \mathcal{Z}^{-3} \left\{ \frac{\mathcal{Z}_1^{-\epsilon}}{5+\epsilon} + \frac{1-\mathcal{Z}_1^{-\epsilon}}{\epsilon} + \frac{1}{5-\epsilon} \right\} \\
&+ \int_1^{1/\zeta} d\mathcal{Z}\, g\, \mathcal{Z}^{2-\epsilon} \left\{ \frac{\mathcal{Z}_2^{\epsilon}}{5+\epsilon} + \frac{1-\mathcal{Z}_2^{\epsilon}}{\epsilon} + \frac{1}{5-\epsilon} \right\} \\
&+ \zeta^{-5+\epsilon} \int_{1/\zeta}^\infty d\mathcal{Z}\, g\, \mathcal{Z}^{-3} \left\{ \frac{\mathcal{Z}_2^{-\epsilon}}{5+\epsilon} + \frac{1-\mathcal{Z}_2^{-\epsilon}}{\epsilon} + \frac{1}{5-\epsilon} \right\} \quad , \qquad (4.9)
\end{aligned}
$$

mit

$$
g = g(\mathcal{Z}) = \int_0^\infty dx\, x^{-\epsilon}\, U^2(x)\, W^2(x\mathcal{Z}) \qquad (4.9a)
$$

und

$$
\mathcal{Z}_1 = \mathcal{Z}/\zeta \quad , \quad \mathcal{Z}_2 = \mathcal{Z}\zeta \quad . \qquad (4.9b)
$$

Die verbleibende Integration (nach Ausführung der Parallelintegrationen) in diesem Schichtsuszeptibilitäts-Beitrag aus (4.3), ist über den ersten Quadranten der $R_\perp, R'_\perp$-Ebene. Die drei Terme in (4.9) resultieren aus der Zerlegung des Quadranten in die drei Sektoren, in die dieser durch die Geraden $R'_\perp = 0$, $R'_\perp = R_\perp$, $R_\perp/R'_\perp = \zeta$ und $R_\perp = 0$ zerlegt wird, und der Substitution $\mathcal{Z} = [\max(R_\perp, R'_\perp)/\min(R_\perp, R'_\perp)]$. Die Funktion g ist proportional dem lateralen Integral über $[G]^2$ aus (4.3), d.h. der Funktion $\mathcal{B}$ aus (C.6).

Nun betrachten wir das asymptotische Verhalten von (4.9) für $z \ll z'$, d.h. $\zeta \ll 1$. Da für $\mathcal{Z} \gg 1$ wegen (C.6) $g \sim \mathcal{Z}^{\epsilon-7}$ ist, erhalten wir das leitende Verhalten durch Vernachlässigung des dritten Terms und Ersetzung der oberen Integrationsgrenze im zweiten Term durch ∞. Das Resultat ist

$$
F_D(\zeta) = \frac{\zeta^\epsilon}{5+\epsilon}\mathcal{K} + \frac{\mathcal{L} - \zeta^\epsilon \mathcal{K}}{\epsilon} + \frac{1}{5-\epsilon}\mathcal{L} + O\left(\zeta^4\right) \quad , \qquad (4.10)
$$

hierbei hängen $\mathcal{K}$ and $\mathcal{L}$ *nur* von ϵ ab und sind definiert durch

$$
\begin{pmatrix} \mathcal{K} \\ \mathcal{L} \end{pmatrix} = \int_1^\infty d\mathcal{Z}\, g \cdot \begin{pmatrix} \mathcal{Z}^{-3-\epsilon} & + & \mathcal{Z}^2 \\ \mathcal{Z}^{-3} & + & \mathcal{Z}^{2-\epsilon} \end{pmatrix} \quad . \qquad (4.10a)
$$

Die Funktion $\mathcal{L}$ in (4.10a) läßt sich durch die linke Seite der Gleichung (C.10c) ausdrücken: wir setzen in (C.10c) $\mathcal{B}$ aus (C.6) ein und erhalten dann das Resultat $3\omega(z')^{\epsilon-3}\mathcal{L}$. Vergleichen wir dies mit der rechten Seite von (C.10c) und (4.5), finden wir die Identität

$$
\mathcal{L} = (\epsilon - 2)\, \mathcal{P}\, /(3\omega) \quad , \qquad (4.11)
$$

mit $\mathcal{P}$ from (4.5a).

Wir erhalten nach Vernachlässigung des $O(\zeta^4)$-Terms in (4.10) und einsetzen in (4.6) die KDE

$$
\chi_{\Phi,\Phi}(z,z') = \frac{1}{5} z^3 \left[1 - u z^\epsilon \frac{3\omega/2}{\epsilon(5+\epsilon)} (\mathcal{S} + \mathcal{K}) \right] \sqrt{\frac{u}{12}}\, (-\partial_{z'}) \left[\overset{0}{m}(z') + \overset{I}{m}(z') \right] \quad , \qquad (4.12)
$$

in 1-Loop-Ordnung (d.h. bis auf Korrekturen $O(u^2)$). Wie von der KDE (1.9) impliziert, faktorisiert (4.12) in eine Potenz einer kurzen Längenskala ($\leftrightarrow z$) und einer großen Längenskala ($\leftrightarrow z'$), für $z \ll z'$. Die z'-Abhängigkeit erhielten wir nach ausdrücken von $\mathcal{S}$ und $\mathcal{L}$ durch $\mathcal{P}$, durch benutzen der Gleichungen (4.8) und (4.11), und Identifizierung der z'-Terme, mit $\overset{I}{m}$ aus (4.4). Die Gleichung (4.12) gilt für *beliebige* ϵ, Ordnung für Ordnung in u. Insbesondere die Form der z'-Abhängigkeit bestätigt die KDE (1.9), da der lateral integrierte Operator $T_{\perp\perp}$ Verschiebungen erzeugt, vergleiche (3.32). Analog der RG-Diskussion bei z.B. (2.11b), muß die KDE-Amplitude C_Ψ in (1.9) für beliebige z durch die Funktion $\tilde{C}_\Psi\big(\mu z, u^R\big)$ ersetzt werden, mit

$$C_\Psi = \tilde{C}_\Psi\big(1, u^{*R}\big) \tag{4.13}$$

im "universellen" Limes großer z; und $\tilde{C}_\Psi = C_\Psi$, für alle z *am* kritischen Fixpunkt (mit) $u^R = u^{*R}$. Aus (4.12) erhalten wir somit durch Division mit $z^d m(z)\,[-\partial_{z'} m(z')]$ die Störungsentwicklung von $\tilde{C}_\Phi$:

$$\tilde{C}_\Phi\big(\mu z, u^R\big) \;=\; \frac{uz^\epsilon}{60}\left\{1 - uz^\epsilon\,(3\omega/2)\left[\frac{\mathcal{S}+\mathcal{K}}{\epsilon(5+\epsilon)} + \frac{1}{1-\epsilon}\,\frac{\mathcal{S}+\mathcal{L}}{\epsilon(5-\epsilon)}\right]\right\} + O\big((uz^\epsilon)^3\big) \quad . \tag{4.14}$$

Nach Umformung mit (4.8) und (4.11) ergibt sich, daß der zweite Term in der eckigen Klammer gleich $-\mathcal{P}/(3\omega(1+\epsilon)(4-\epsilon))$ ist. Eine Betrachtung der Größen $\mathcal{K}$, vergl. den Text hinter Gleichung (D.9), $\mathcal{L}$ und $\mathcal{P}$ in (4.5a) zeigt, daß die Terme in der eckigen Klammer für $0<\epsilon<2$ endlich sind. Einsetzen der Reparametrisierung (2.2c) mit dem Z_u-Faktor aus (2.3c) macht die rechte Seite von (4.14) endlich für $\epsilon \to 0$, da dann alle ϵ^{-1}-Pole vom Z_u-Faktor für beliebige u^R gekürzt werden (müssen), Ordnung für Ordnung in u^R [2, 19]. Davon können wir uns durch einsetzen der ϵ-Entwicklung von ω aus (C.7), von

$$\mathcal{K} - \mathcal{L} = \epsilon\, 11/144 \;+\; O\big(\epsilon^2\big) \tag{4.15a}$$

und von

$$\mathcal{S} + \mathcal{L} = \frac{5}{8}\left[1 + \epsilon\left(\ln 2 + \gamma_E - \frac{58}{15}\right)\right] \;+\; O\big(\epsilon^2\big) \tag{4.15b}$$

explizit überzeugen. Hier ist $\gamma_E = 0.577$, die Euler-Konstante. Die Gleichung (4.15a) ergibt sich aus (D.10) und folgende, im Anhang D; und Gleichung (4.15b) aus den Gleichungen (4.8), (4.11) und (4.5a).

Wir erhalten die ϵ-Entwicklung der universellen KDE-Amplitude C_Φ, durch einsetzen von u^{*R} aus (2.4) und von (4.15) in Gleichung (4.14), und $\epsilon \to 0$ Entwicklung aller übrigen Größen, wegen dem Verhalten (4.13) von $\tilde{C}_\Psi$. Alle nichtuniversellen Größen wie μz und die f_i aus (2.2c), fallen dann im Limes $\epsilon \to 0$ aus (4.14) heraus und wir erhalten das Resultat

$$\begin{aligned} C_\Phi \;&=\; \epsilon\,\frac{4\pi^2}{45}\left\{1 + \epsilon\left[\frac{317}{108} - \frac{1}{2}\ln(4\pi) - \frac{1}{2}\gamma_E\right]\right\} \\ &=\; \epsilon\, 0.8773 \;+\; \epsilon^2\, 1.2116 \quad , \end{aligned} \tag{4.16}$$

	C_Φ	$C_\mathcal{E}$
$d=2$	π	8π
$d=3$		
Padé eins	1.42	5.29
Padé zwei	1.96	3.83
$d=4-\epsilon$	$\epsilon\, 0.88 + \epsilon^2\, 1.21$	$\epsilon\, 1.76 + \epsilon^2\, 2.72$

Tabelle 4.1: KDE-Amplituden C_Φ und $C_\mathcal{E}$. Erklärung im Text nach (4.17).

abgesehen von Termen $O(\epsilon^3)$. Auffallend ist die große ϵ^2-Korrektur, damit läßt sich C_Φ in $d=3$, $\epsilon=1$, nur sehr ungenau aus (4.16) bestimmen. Der hyperuniverselle Wert in $d=2$ ist exakt bekannt [16]:

$$[C_\Phi]_{d=2} = \pi \tag{4.17}$$

und liegt zwischen den Beiträgen der ersten und zweiten Ordnung in ϵ von (4.16) mit $\epsilon=2$. Mit den Resultaten aus (4.16) und (4.17) läßt sich eine Padé-Approximation $A\,\epsilon\,(1+B\,\epsilon)/\,(1+C\,\epsilon)$ von C_Φ durchführen. Die Koeffizienten werden durch das $\epsilon \to 0$ Verhalten aus (4.16) und dem Wert bei $\epsilon=2$ aus (4.17) bestimmt. Die so bestimmte Approximante liefert $[C_\Phi]_{d=3}=1.42$. Um ein Maß für die Güte dieser Zahl zu haben, machen wir eine zweite Padé-Approximation für $C_\mathcal{E}$. Wir benutzen den exakten hyperuniversellen Wert $[C_\mathcal{E}]_{d=2}=8\pi$, der sich aus (1.23), $[C_\Phi]_{d=2}$ von oben und den exakten Exponenten $x_\mathcal{E}=d-1/\nu=1$ und $x_\Phi=\beta/\nu=1/8$ in $d=2$ Dimensionen ergibt. Die ϵ-Entwicklung von $C_\mathcal{E}$ folgt aus (1.23), (4.16) und den Exponenten $x_\mathcal{E}=2(1-\epsilon/3)+O(\epsilon^2)$ und $x_\Phi=1-\epsilon/2+O(\epsilon^2)$ in $d=4-\epsilon$ Dimensionen. Aus der Padé-Approximante von $C_\mathcal{E}$ und den genauesten Exponenten in $d=3$ [34]: $\beta=.325\pm.001$ und $\nu=.63\pm.0008$, ergibt sich mit $[x_\mathcal{E}/x_\Phi]_{d=3}$ aus (1.23) der Wert $[C_\Phi]_{d=3}=1.96$. Die Abweichung zu dem vorher bestimmten Wert beträgt nur etwa dreißig Prozent, und damit ist die Güte unserer Werte im Hinblick auf die große ϵ^2-Korrektur in (4.16) überraschend gut. Die entsprechenden Padé-Approximationen für $[C_\mathcal{E}]_{d=3}$ sind auch in der Tabelle 4.1 der KDE-Amplituden eingetragen, und haben konsistent mit den $[C_\Phi]_{d=3}$ Werten eine Abweichung von etwa dreißig Prozent.

Nun berechnen wir die Schichtsuszeptibilitäten $\chi_{\Phi,\mathcal{E}}$, $\chi_{\mathcal{E},\Phi}$ und $\chi_{\mathcal{E},\mathcal{E}}$ in leitender und nächstleitender Ordnung in u. Die korrespondierenden Korrelationsfunktionen

$$\begin{aligned} K_{\Phi,\Phi^2}(r_1,r_2) &\equiv \left\langle \Phi(r_1)\Phi^2(r_2)\right\rangle - \left\langle \Phi(r_1)\right\rangle \left\langle \Phi^2(r_2)\right\rangle \\ &= 2\,\langle\varphi(r_1)\varphi(r_2)\rangle\, m(r_2) + N(r_1,r_2) \end{aligned} \tag{4.18}$$

und

$$K_{\Phi^2,\Phi^2}(r,r') \equiv \left\langle \Phi^2(r)\Phi^2(r')\right\rangle - \left\langle \Phi^2(r)\right\rangle \left\langle \Phi^2(r')\right\rangle$$

$$= \; 4m(r)\,\langle\varphi(r)\varphi(r')\rangle\, m(r') + 2m(r)N(r,r')$$

$$+2m(r')N(r',r) + \left\langle\varphi^2(r)\varphi^2(r')\right\rangle \quad , \tag{4.19}$$

mit

$$N(r_1,r_2) = \left\langle\varphi(r_1)\varphi^2(r_2)\right\rangle \quad , \tag{4.20}$$

erhielten wir nach einsetzen von (2.5a) für Φ und von (2.18b) für Φ^2. Da wir nur bis zur nächstleitenden Ordnung rechnen und $\overset{0}{m}\sim u^{-1/2}$ ist, benötigen wir nur den leitenden Beitrag $\sim u^{1/2}$:

$$\mathcal{N}(r_1,r_2) = -u\int d^dR\; G(r_1,R)\;\overset{0}{m}(R_\perp)\;\left[G(R,r_2)\right]^2 \tag{4.21}$$

von N. Er resultiert aus der Entwicklung des Boltzmanngewichts bis zur ersten Ordnung in der ungeraden Wechselwirkung $\mathcal{H}_3'$ aus (A.5b) und dem Wick-Theorem. Für die parallelintegrierte Größe

$$\bar{\mathcal{N}}(z_1,z_2) \equiv \int d^{d-1}r_{1\|}\,\mathcal{N}(r_1,r_2) = -(3u)^{1/2}\,(\omega/10)\,n(z_1,z_2) \tag{4.22}$$

ergibt sich mit (2.6), (2.10) und (C.6) und (4.9a), wenn $z_1 < z_2$ ist

$$\begin{aligned} n(z_1,z_2) \;&=\; z_2^\epsilon\,\zeta^3\left\{\int_1^\infty dZ\; Z^{-3}\,g + \int_1^{1/\zeta} dZ\; Z^{2-\epsilon}\,g + \zeta^{-5}\int_{1/\zeta}^\infty dZ\; Z^{-3-\epsilon}\,g\right\} \\ &\to\; z_2^{\epsilon-3}\,z_1^3\,\mathcal{L} \quad , \end{aligned} \tag{4.22a}$$

mit $\zeta = z_1/z_2$; und wenn $z_2 < z_1$ ist:

$$\begin{aligned} n(z_1,z_2) \;&=\; z_1^\epsilon\,\zeta^{2+\epsilon}\left\{\int_1^\infty dZ\; Z^{-3-\epsilon}\,g + \int_1^{1/\zeta} dZ\; Z^{2}\,g + \zeta^{-5}\int_{1/\zeta}^\infty dZ\; Z^{-3}\,g\right\} \\ &\to\; z_1^{-2}\,z_2^{2+\epsilon}\,\mathcal{K} \quad , \end{aligned} \tag{4.22b}$$

mit $\zeta = z_2/z_1$. Das *leitende* Verhalten in der zweiten Zeile von (4.22a) und (4.22b), erhalten wir im Limes $\zeta\to 0$, nach einer ähnlichen Argumentation wie vor (4.10), und bei Vernachlässigung der Korrekturen $O(\zeta^4)$. Mit den nun bekannten Größen $\chi_{\Phi,\mathcal{E}}$, $\chi_{\mathcal{E},\Phi}$ und $\chi_{\mathcal{E},\mathcal{E}}$ werden wir nun weitere Überprüfungen der KDE (1.9) vornehmen (die alle (1.9) bestätigen werden).

Wir betrachten zunächst die durch Parallelintegration aus (4.18) entstandene Größe $\chi_{\Phi^2,\Phi}(z,z')$. Zur Überprüfung der KDE (1.9) mit $\Psi\equiv\Phi^2$ betrachten wir das Verhältnis im Limes $z/z' \ll 1$ (ähnlich wie bei (4.12))

$$\frac{\chi_{\Phi^2,\Phi}(z,z')}{z^d\left\langle\Phi^2(r_\|,z)\right\rangle(-\partial_{z'}m(z'))} \;=\; \frac{uz^\epsilon}{30}\left\{1 - uz^\epsilon\left[(3\omega/2)\frac{\mathcal{S}+\mathcal{K}}{\epsilon(5+\epsilon)} + \right.\right.$$

$$+ \frac{\mathcal{P}}{12}\left(1 - \frac{6}{(1+\epsilon)(4-\epsilon)}\right) + \frac{\omega}{8}\mathcal{K} + O(uz^{\epsilon})\Big]\Big\}$$

$$\equiv \tilde{C}_{\mathcal{E}}\big(\mu z, u^R\big) \quad , \tag{4.23}$$

mit

$$\big\langle \Phi^2(r_{\|}, z)\big\rangle = \Big(\overset{0}{m}(z)\Big)^2 + 2\gamma_{B+C}(z) \; + \; O(u) \quad . \tag{4.24}$$

Die rechte Seite von (4.23) bestätigt das KDE-Verhalten (1.9), vergleiche die entsprechende Diskussion für $\tilde{C}_{\Phi}$ vor Gleichung (4.14). Wegen (1.23) ist auch das Verhältnis

$$\tilde{C}_{\mathcal{E}}/\tilde{C}_{\Phi} = 2\left\{1 - uz^{\epsilon}\left[\frac{\epsilon}{24}\mathcal{P} + \frac{\omega}{8}(\mathcal{K} - \mathcal{L})\right]\right\} \; + \; O\big((uz^{\epsilon})^2\big) \quad , \tag{4.25}$$

interessant, welches aus (4.23) und (4.14) folgt. Einsetzen der Reparametrisierung (2.2c), von u^{*R} aus (2.4), (4.5a), (4.15a) und (C.7), ergibt nach $\epsilon \to 0$ Entwicklung aller Größen und Beachtung von (4.13), das Resultat

$$C_{\mathcal{E}}/C_{\Phi} = 2 + \frac{\epsilon}{3} + O\big(\epsilon^2\big) \quad , \tag{4.26}$$

am Fixpunkt, konsistent mit (1.23).

Die Verhältnisse $\chi_{\Phi,\Phi^2}/\chi_{\Phi,\Phi}$ und $\chi_{\Phi^2,\Phi^2}/\chi_{\Phi^2,\Phi}$ erlauben eine weitere Konsistenzprüfung der KDE (1.9). Diese fordert, daß für $z/z' \ll 1$ *beide* Verhältnisse gleich $(\partial_{z'}\langle\Phi^2\rangle)\,/\,(\partial_{z'}m)$ sind, für beliebige ϵ und in jeder Ordnung u, denn die gleiche Amplitude $\tilde{C}_{\Psi}$ und z^d Potenz kürzt sich dann aus Zähler und Nenner heraus. Davon überzeugen wir uns explizit, durch einsetzen aller Größen, beachten, daß der letzte Term in (4.19) wegen $\mathcal{B} \sim \zeta^6$ [vergl. (C.6)] aus Konsistenzgründen vernachlässigt werden muß und erhalten in der Tat

$$\frac{\chi_{\Phi,\Phi^2}}{\chi_{\Phi,\Phi}} = \frac{\chi_{\Phi^2,\Phi^2}}{\chi_{\Phi^2,\Phi}} \;=\; 2\,\overset{0}{m}(z') + 2\,\overset{I}{m}(z') + \frac{\bar{\mathcal{N}}(z,z')}{\overset{0}{\chi}(z,z')} \; + \; O\big(u^{3/2}\big)$$

$$= \frac{\partial_{z'}\big\langle \Phi^2(r'_{\|}, z')\big\rangle}{\partial_{z'}m(z')} \quad , \tag{4.27}$$

für $z/z' \ll 1$.

Kapitel 5

Zusammenfassung und Ausblick

5.1 Zusammenfassung

Wir haben das kritische Verhalten eines durch eine symmetriebrechende ("außergewöhnliche oder normale") Oberfläche begrenzten Systems der Ising-Universalitätsklasse untersucht, das wir mit dem bekannten feldtheoretischen Landau-Ginzburg-Hamiltonian (2.1) modellierten. Zur Berechnung von Erwartungswerten verwendeten wir die RG verbesserte Fluktuations- und ϵ-Entwicklung mit Dimensionsregularisierung in $d = 4-\epsilon$ Dimensionen. Von besonderem Interesse sind Profile und Korrelationsfunktionen lokal fluktuierender Felder Ψ, wie der OP Φ und die Energiedichte $\mathcal{E}$, "in der Nähe der Oberfläche". D.h. ein entsprechendes Feld ("Operator") hat einen Abstand z von der Oberfläche, der sehr viel kleiner ist als der Abstand zu den übrigen Operatoren in der Korrelationsfunktion, die Korrelationlänge ξ und der Abstand zu weiteren entfernten Oberflächen. Von Interesse ist insbesondere das OP-Profil $\langle\Phi\rangle$, das das Adsorptionsverhalten von Flüssigkeiten beschreibt, vergleiche die Diskussion bei den Gleichungen (1.10) und (1.14). Zur Untersuchung dieses Oberflächenverhaltens gibt es ein nützliches Instrument, die sogenannte Kurze-Distanz-Entwicklung (KDE) (1.7). Das Anliegen dieser Arbeit ist die Überprüfung des spezifischen KDE-Ansatzes (1.9) in dem sowohl für $\Psi = \Phi$ als auch für $\Psi = \mathcal{E}$ die Spannungstensorkomponente $T_{\perp\perp}$ als leitender Oberflächenoperator auftritt. Wir werden nun die wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit kurz zusammenfassen.

(i) Wir haben die KDE (1.9) in den verschiedensten physikalischen Situationen bestätigt, u.a. durch die Berechnung von Profilen $\left\langle\Psi(r_\parallel, z)\right\rangle$ in leitender Ordnung für die Halbraum- und die Film-Geometrie. Wir berechneten in leitender Ordnung für den Halbraum auch Korrelationsfunktionen $\left\langle T_{\perp\perp}(r'_\parallel, z')\Psi(r_\parallel, z)\right\rangle$ und in leitender und nächstleitender Ordnung die Schichtsuszeptibilitäten aus (1.19), mit $\Psi, \Xi = \Phi, \Phi^2$. Bei der Berechnung dieser Schichtsuszeptibilitäten benutzen wir die Verschiebungsidentität (3.32), die wir in leitender und nächstleitender Ordnung im Anhang C verifiziert haben. Die KDE Resultate sind konsistent mit dem in Ref. [15] berechneten OP-Profil für $T \neq T_c$ im Halbraum. Wir haben verifiziert, daß in den verschiedenen Situationen die Amplitude C_Φ (bzw. $C_\mathcal{E}$) stets denselben Wert hat.

Unsere Resultate bestätigen auch die "weiteren Konsequenzen" der KDE, wie die Gleichung (1.23) für $C_\mathcal{E}/C_\Phi$ in leitender und nächstleitender Ordnung in ϵ, siehe unten. Wir haben in leitender Ordnung gezeigt, daß die RG-Fixpunkt-Bedingung $T_{\perp\parallel}(r) = 0$ für r in der Oberfläche schon gültig ist, wenn *nur* die Oberfläche an ihrem Fixpunkt ist, das bedeutet für beliebiges t und u, vergleiche (3.34). Mit der Kontinuitätsgleichung konnten wir dann in der Fußnote nach (3.21) ein weiteres Argument für die Eignung von $T_{\perp\perp}$ als Oberflächenoperator geben.

(ii) Aus den in leitender und nächstleitender Ordnung berechneten Schichtsuszeptibilitäten, erhielten wir aus (1.20) die universellen KDE-Amplituden C_Φ und $C_\mathcal{E}$ in zweiter Ordnung in ϵ, vergleiche Tabelle 4.1. Bisher [15] war nur die erste Ordnung in ϵ bekannt. Mit den Resultaten der ϵ-Entwicklung und exakten Werten in $d = 2$ Dimensionen bestimmten wir durch eine Padé-Approximation C_Φ und $C_\mathcal{E}$ in $d=3$, vergleiche Tabelle 4.1. Die Größe C_Φ bestimmt das Verhältnis aus den universellen Amplituden des OP-Profils $\langle\Phi\rangle$ in der Nähe der Begrenzung und der freien Energie.

(iii) Die 2-Punkt-Funktion $\langle T_{\perp\perp}T_{\perp\perp}\rangle$ im Halbraum in (1.22), bestimmt einerseits die KDE-Amplitude C_Ψ und ist daher eine zusätzliche Überprüfungsmöglichkeit für den Ansatz (1.9). Diese Funktion ist aber andererseits auch wegen ihrer Nichthyperuniversalität in $d = 4 - \epsilon$ Dimensionen von Interesse, da es unlängst Spekulationen [16] gab, daß diese wie in $d = 2$ hyperuniversell wäre. Wir haben diese 2-Punkt-Funktion in leitender Ordnung ϵ berechnet und damit die universelle Skalenfunktion $\alpha(v)$ aus (3.37a), vergleiche (3.47).

Über eine um einen inneren Punkt des Halbraums zentrierte KDE für das Produkt $T_{\perp\perp}(0,z)\cdot T_{\perp\perp}(0,z')$ von zwei Operatoren $T_{\perp\perp}$ konnten wir die Abhängigkeit der Größe $\langle T_{\perp\perp}T_{\perp\perp}\rangle$ von der Oberflächenuniversalitätsklasse zurückführen auf die des Halbraumprofils $\langle\mathcal{E}\rangle$. In $d=2$ Dimensionen jedoch *verschwindet* die KDE-Amplitude *vor* $\mathcal{E}$ und die 2-Punkt-Funktion ist *hyperuniversell.*

5.2 Ausblick

Für eine weitere Überprüfungsmöglichkeit der KDE (1.9) via (1.22), wäre eine Berechnung von $\langle T_{\perp\perp}T_{\perp\perp}\rangle$ auch in nächstleitender Ordnung ϵ nützlich. Dies gilt natürlich generell für die Berechnung nichtparallelinvarianter Größen, wie z.B. der Korrelationsfunktionen unter dem Integral in (1.19).

Von weiterem Interesse ist die Berechnung der Casimir-Amplitude mit mindestens einer symmetriebrechenden Oberfläche auch in nächstleitender Ordnung in ϵ, vergleiche unsere Resultate in leitender Ordnung (A.27a) und (A.28). Damit wäre auch die "entfernte Wandkorrektur" zum OP-Filmprofil $\langle\Phi\rangle$ aus (1.18) in nächstleitender Ordnung bekannt.

Interessant wäre auch eine Verallgemeinerung auf (schwach) gekrümmte Flächen und damit die Brechung der Translationsinvarianz parallel zur Oberfläche. Erste Untersuchungen von Profilen im Halbraum mit schwach gekrümmter Oberfläche, finden sich z.B. in Ref. [16].

Anhang A

Fluktuationsentwicklung

Die Zerlegung (2.5a) ist eine Legendre Transformation, da die Variablen (Φ, h) durch (φ, m) ersetzt werden. Dies bedeutet den Übergang von der freien Helmholtz Energie [19]

$$\mathcal{G} = -\ln \int \mathcal{D}\Phi \, \mathrm{e}^{-\mathcal{H}} \quad , \tag{A.1a}$$

mit der Zustandsgleichung für das OP-Profil [19]:

$$m(z) = -\frac{\delta \mathcal{G}/A}{\delta h(z)} \quad , \tag{A.1b}$$

zur freien Gibbs Energie [19]

$$\mathcal{F}[m] = \mathcal{G}[h] + \int d^d r \; hm \quad , \tag{A.2a}$$

mit

$$h(z) = \frac{\delta \mathcal{F}/A}{\delta m(z)} \quad . \tag{A.2b}$$

Das Integral in (A.1a) ist ein Funktionalintegral über die fluktuierenden Felder Φ. A bezeichnet den Inhalt der $d-1$ dimensionalen Oberfläche des Halbraums, mit Translationsinvarianz im parallelen Unterraum, so daß $\left\langle \Phi(r_\parallel, z) \right\rangle = m(z)$ nur vom Abstand z von der Oberfläche abhängt.

Einsetzen der Zerlegung (2.5a) in (2.1) ergibt mit der kompakten Notation $\int_+ d^d r \equiv \int d^d r \Theta(z)$ (wobei der δ-Peak *ganz* im Integrationsbereich liegt) und $h(z) \equiv h_1 \delta(z)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \;=\; \int_+ d^d r \; \Big\{ & \frac{1}{2}\left[(\partial_z m)^2 + (t + c\delta(z))\, m^2\right] - hm \\ & + (\partial_z m)\,(\partial_z \varphi) + (t + c\delta(z))\, m\varphi - h\varphi \\ & + \frac{1}{2}\left[(\nabla\varphi)^2 + (t + c\delta(z))\, \varphi^2\right] \\ & + \frac{u}{4!} m^4 + \frac{u}{3!} m^3 \varphi + \frac{u}{4} m^2 \varphi^2 + \frac{u}{3!} m \varphi^3 + \frac{u}{4!} \varphi^4 \Big\} \quad . \end{aligned} \tag{A.3}$$

Aus (A.2a) und (A.3) folgt dann die Legendre Transformierte

$$\begin{aligned}\mathcal{F}[m] &= \int_+ d^d r \left\{\frac{1}{2}\left[(\partial_z m)^2 + (t + c\delta(z))\, m^2\right] + \frac{u}{4!} m^4\right\} \\ &\quad - \ln \int \mathcal{D}\varphi \; \mathrm{e}^{-(\mathcal{H}_2^{(0)} + \mathcal{H}_2' + \mathcal{H}')} \quad , \end{aligned} \tag{A.4a}$$

mit

$$\mathcal{H}_2^{(0)} = \int_+ d^d r \left\{\frac{1}{2}\left[(\nabla\varphi)^2 + \left(t + \frac{u}{2}\left(\overset{0}{m}\right)^2 + c\delta(z)\right)\varphi^2\right]\right\} \quad , \tag{A.4b}$$

dem gaußschen Anteil, der quadratisch in den Fluktuationen ist, dem OP-Profil $\overset{0}{m}$ in leitender Ordnung, und den Wechselwirkungen

$$\mathcal{H}_2' = \frac{u}{4} \int_+ d^d r \left[m^2(z) - \left(\overset{0}{m}(z)\right)^2\right] \varphi^2(r) \tag{A.4c}$$

und

$$\mathcal{H}' = \int_+ d^d r \left\{\frac{1}{2}(\partial_z m)(\partial_z \varphi) + (t + c\delta(z))\, m\varphi - h\varphi + \frac{u}{3!} m^3 \varphi + \frac{u}{3!} m \varphi^3 + \frac{u}{4!}\varphi^4\right\} . \tag{A.4d}$$

Das Magnetfeld in (A.4d) läßt sich mittels der Zustandsgleichung (A.2b) durch m ausdrücken:

$$\begin{aligned} h(z) &= -(\partial_z m)(0)\, \delta(z) - \left(\partial_z^2 m\right)(z) + \left(t + \frac{u}{6} m^2(z)\right) m(z) + \\ &\quad + c\, m(0)\, \delta(z) + \frac{u}{2} m(z) \left\langle \varphi^2(r) \right\rangle_{\mathcal{H}} + \frac{u}{6} \left\langle \varphi^3(r) \right\rangle_{\mathcal{H}} \quad . \end{aligned} \tag{A.4e}$$

Durch einsetzen von (A.4e) in (A.4d) ergibt sich dann:

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_3' + \mathcal{H}_4' \quad , \tag{A.5a}$$

mit

$$\mathcal{H}_3' = \frac{u}{6} \int_+ d^d r \; m(z) \left[\varphi^3(r) - 3\varphi(r) \left\langle \varphi^2(r) \right\rangle_{\mathcal{H}}\right] \tag{A.5b}$$

und

$$\mathcal{H}_4' = \frac{u}{4!} \int_+ d^d r \; \left[\varphi^4(r) - 4\varphi(r) \left\langle \varphi^3(r) \right\rangle_{\mathcal{H}}\right] \quad . \tag{A.5c}$$

Die Berechnung von Korrelationsfunktionen von Systemen mit gebrochener $\Phi \to -\Phi$ Symmetrie wird also durch die Legendre Transformation wieder auf die übliche Fluktuationsentwicklung des Boltzmannfaktors $\sim \mathrm{e}^{-\mathcal{H}'}$ und *gaußsche* Mittelung mit (A.4b) [Index 0] zurückgeführt:

$$\left\langle \left(\prod \varphi\right) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \left\langle \left(\prod \varphi\right) \mathrm{e}^{-(\mathcal{H}_2' + \mathcal{H}_3' + \mathcal{H}_4')} \right\rangle_{0,c} \quad . \tag{A.6}$$

Diese gaußschen Mittelwerte lassen sich dann mit dem Wick-Theorem in Produkte gaußscher Propagatoren zerlegen. Der Index c bezeichnet die verbundenen Korrelationsfunktionen (Kumulanten), die bei der Entwicklung (auch) des Normierungsfaktors $\sim 1/Z$ der Konfigurationswahrscheinlichkeit nach u entstehen.

Gleichung (A.4e) mit $h(z) = h_1\delta(z)$ läßt sich in den Volumenanteil $z > 0$ und die Randbedingung bei $z = 0$ zerlegen:

$$-\frac{d^2}{dz^2}m + \frac{d}{dm}\mathcal{L}_B(m) = -\frac{u}{2}m\left\langle\varphi^2\right\rangle_{\mathcal{H}} - \frac{u}{6}\left\langle\varphi^3\right\rangle_{\mathcal{H}} \quad , \tag{A.7a}$$

$$\left\{-\frac{d}{dz}m\right\}_{z=0} + \frac{d}{dm(0)}\mathcal{L}_1(m(0)) = 0 \quad , \tag{A.7b}$$

mit $\mathcal{L}_B$ aus (2.1a) und $\mathcal{L}_1$ aus (2.1b).
Die zweite (implizite) Randbedingung ist, daß $m(z \to \infty) = m_b$ den Wert im unbegrenzten System annehmen muß ($m_b(t \geq 0) = 0$). Aus (A.7) ergibt sich das OP-Profil $\overset{0}{m}$ in leitender Ordnung ("Mean Field"), in dem die Fluktuationen enthaltende rechte Seite von (A.7a) null gesetzt wird:

$$-\frac{d^2}{dz^2}\overset{0}{m} + \frac{d}{d\overset{0}{m}}\mathcal{L}_B(\overset{0}{m}) = 0 \tag{A.8a}$$

$$\left\{-\frac{d}{dz}\overset{0}{m}\right\}_{z=0} + \frac{d}{d\overset{0}{m}(0)}\mathcal{L}_1(\overset{0}{m}(0)) = 0 \quad . \tag{A.8b}$$

Der gaußsche Propagator

$$\langle\varphi(r)\,\varphi(r')\rangle_0 = G(r_\parallel - r'_\parallel; z, z') \tag{A.9}$$

ist Lösung von

$$\left[-\Delta_r + t + \frac{u}{2}\left(\overset{0}{m}(z)\right)^2\right] G = \delta(r - r') \tag{A.10a}$$

für $z > 0$, mit der Randbedingung

$$\left\{\left(-\frac{d}{dz} + c\right) G\right\}_{z=0} = 0 \quad . \tag{A.10b}$$

Gleichung (A.10b) ist im Gegensatz zu (A.8b) unabhängig von h_1. Gleichung (A.10) ist die bekannte "Mean Field" Gleichung für den Propagator [2], die aber für die quadratische Wechselwirkung (in den Fluktuationen) (A.4b) exakt ist, da eine Parabel nur *ein* Minimum hat[1].

[1]Fluktuationen um dieses Minimum haben aus Symmetriegründen das gleiche statistische Gewicht, und daher ist die wahrscheinlichste Konfiguration gleich dem thermischen Mittelwert des OP's. Ein angelegtes Magnetfeld bewirkt lediglich eine Verschiebung der Parabel, d.h. durch "Normalkoordinaten" läßt sich der lineare OP-Feld-Term entfernen. Dies gilt nicht mehr für ein Φ^4

Die Fluktuationsentwicklung von

$$m(z) = \overset{0}{m}(z) + \delta m(z) \quad , \tag{A.11}$$

ergibt sich aus der Differenz der Gleichungen (A.7a) und (A.8a):

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + t + \frac{u}{2}\left(\overset{0}{m}\right)^2\right] \delta m = -\mathcal{J} \quad , \tag{A.12}$$

mit

$$\mathcal{J} = \frac{u}{2}\left(\overset{0}{m} + \delta m\right)\left\langle\varphi^2\right\rangle_{\mathcal{H}} + \frac{u}{6}\left\langle\varphi^3\right\rangle_{\mathcal{H}} + \frac{u}{2}\,\overset{0}{m}\,(\delta m)^2 + \frac{u}{6}\,(\delta m)^3 \quad . \tag{A.13}$$

Beim Vergleich von (A.12) mit der lateralen Fourier-Transformierten von (A.10a) stellt man fest, daß $\tilde{G}(p{=}0; z, z')$ aus (2.7) die *Grundlösung* [35] von (A.12) ist. Die allgemeine Lösung δm ist dann die Faltung mit der rechten Seite von (A.12):

$$\delta m(z) = -\int_0^\infty dz'\, \tilde{G}(p=0; z, z')\, \mathcal{J}(z') \quad . \tag{A.14}$$

Die Randbedingung von (A.14) folgt durch einsetzen von (A.11) in (A.7b) und Berücksichtigung von (A.8b):

$$\left\{\left(-\frac{d}{dz} + c\right)\delta m\right\}_{z=0} = 0 \quad . \tag{A.15}$$

Nun beschäftigen wir uns mit der Fluktuationentwicklung einer Film-Geometrie (Abb. 1.4). Wie im II. Kapitel nach Gleichung (2.15) erklärt, ist das zu (2.1) korrespondierende Landau-Ginzburg-Funktional:

$$\mathcal{H}[\Phi] = \int d^d r \left\{\Theta(z)\Theta(L-z)\left[\tfrac{1}{2}(\nabla\Phi)^2 + \mathcal{L}_B(\Phi)\right] + \delta(z)\mathcal{L}_1(\Phi) + \delta(z-L)\hat{\mathcal{L}}_1(\Phi)\right\} \quad . \tag{A.16}$$

Der EX-Übergang ist Gegenstand unseres Studiums, d.h. mindestens eine Oberflächenuniversalitätsklasse ist von diesem Typ. Die wegen der gebrochenen Symmetrie notwendige Zerlegung (2.5a) führt unter Beachtung der eingeschränkten z-Integration (von $z = 0$ bis $z = L$) und der nun erforderlichen zweiten Randbedingung bei $z = L$, für die Magnetisierung und den gaußschen Propagator, auf eine

Modell (2.1), da es zwei stabile Minima für $t < 0$ hat. Der OP kann durch Fluktuationen in verschiedene Minima rutschen und somit sind wahrscheinlichster Wert und Mittelwert des OP's verschieden. Ein angelegtes Magnetfeld bricht die $O(n)$-Symmetrie, d.h. es gibt keine lineare Transformation in den Feldern, die dies beseitigt. Dies ist anschaulich in der "Landau Theorie" des Ferromagneten [2]. Ein angelegtes Volumenmagnetfeld macht die beiden stabilen Minima für $t < 0$ unterschiedlich tief, wodurch eine OP-Konfiguration favorisiert wird.

zu (A.6) analoge Fluktuationsentwicklung. Es ergibt sich für die freie Gibbs Energie pro Flächeneinheit A (der Inhalt einer Begrenzung):

$$\begin{aligned}\frac{1}{A}\mathcal{F} &\equiv -\frac{1}{A}\ln\int \mathcal{D}\Phi\ \exp\left[-\mathcal{H}_{Film}[\Phi]\right] \qquad \text{(A.17)}\\ &= \frac{1}{A}\mathcal{H}_{Film}[m] - \frac{1}{A}\ln\int \mathcal{D}\varphi\ \exp\left[-\left(\mathcal{H}_2^0+\mathcal{H}_2'+\mathcal{H}_3'+\mathcal{H}_4'\right)_{Film}\right]\end{aligned}$$

mit dem Funktionalintegral $\int \mathcal{D}\Phi$ über die fluktuierenden Felder Φ. Wir beschränken uns auf die leitende Ordnung ("Mean Field") [24, 27] und erhalten aus (A.17) durch Vernachlässigung der Fluktuationsbeiträge und Ersetzung von m durch $\overset{0}{m}$:

$$\begin{aligned}\frac{1}{A}\mathcal{F} \to \frac{1}{A}\overset{0}{\mathcal{F}} &= \frac{1}{A}\mathcal{H}_{Film}[\overset{0}{m}]\\ &= \mathcal{L}_1(\overset{0}{m}(0)) + \hat{\mathcal{L}}_1(\overset{0}{m}(L)) + \int_0^L dz\ \left\{\frac{1}{2}\left(\frac{d\overset{0}{m}}{dz}\right)^2 + \mathcal{L}_B(\overset{0}{m})\right\} \quad .\end{aligned} \qquad \text{(A.18)}$$

Multiplikation der aus der Variation von (A.18) nach $\overset{0}{m}(z')$ folgenden Zustandsgleichung mit dem integrierenden Faktor $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}$ führt nach Integration auf

$$\left|\frac{d\overset{0}{m}(z)}{dz}\right| = v(\overset{0}{m}(z)) \qquad \text{(A.19)}$$

mit

$$v(\overset{0}{m}) = \left\{2\left[\mathcal{L}_B(\overset{0}{m}) + E\right]\right\}^{1/2} \quad . \qquad \text{(A.20)}$$

Die Integrationskonstante E enthält die Randbedingungen bei $z=0$ und $z=L$.

Zur Berechnung des *Profils* [24, 27] aus (A.19), ist es nützlich die Zustandsgleichung (entsprechend ist ihr erstes Integral (A.19) die Geschwindigkeit) als eindimensionale Newton-Bewegungsgleichung eines Massenpunktes mit der Masse 1, der Koordinate $x = \overset{0}{m}$ und der Zeit $t = z$ zu interpretieren. Aus der zu diesem Teilchen gehörenden Lagrange-Funktion $\mathcal{L} = T - V = \frac{1}{2}\dot{x}^2 - V(x)$ und der Bewegungsgleichung $\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{x}} - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x} = 0 = \ddot{x} + \frac{\partial V}{\partial x}$ ergibt sich die potentielle Energie zu $V = -\mathcal{L}_B$. E ist die erhaltene Gesamtenergie der Bewegung und wie (A.20) nahelegt, ist $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}$ die Geschwindigkeit des Teilchens. Wir beschränken uns auf Temperaturen $t \geq 0$, so daß $-\mathcal{L}_B$ nur *ein* Maximum bei $\overset{0}{m} = 0$ hat.

Betrachten wir zunächst den einfacheren Fall eines Halbraums $z \geq 0$ mit einer Begrenzung. Die Randbedingung (A.8b) für $\overset{0}{m}(z)$ gibt dann die Geschwindigkeit $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{z=0}$ und den Startpunkt der Bewegung $\overset{0}{m}(z=0)$ zur "Zeit" $z=0$ (die "Anfangsbedingungen") vor. Das Profil $\overset{0}{m}$ (≥ 0 wie in (2.6)) muß auch die "Volumenbedingung" $m(z \to \infty) = m_b = 0$ erfüllen. Dies bedeutet, das Teilchen startet bei

$z = 0$, läuft den Potentialberg $(-\mathcal{L}_B)$ hinauf und kommt auf der Spitze $(-\mathcal{L}_B) = 0$ bei $\overset{0}{m}(z \to \infty)$ zur Ruhe. Damit müssen $(-\overset{0}{m})$ und $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}$ negativ, und die Gesamtenergie $E = 0$ sein. Trennung der Variablen in (A.19) und Integration liefert die implizite Gleichung für das Profil

$$z = \int_{\overset{0}{m}(z)}^{\overset{0}{m}(0)} dM\ [v(M)]^{-1} \quad , \tag{A.21}$$

da $\frac{d\overset{0}{m}}{dz} < 0$ ist.

Betrachten wir nun die Film-Geometrie, d.h. einen *endlichen* Abstand L der beiden Begrenzungen. In diesem Fall beschreibt (A.21) die Bewegung (das Profil) nur, wenn $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{z_0} < 0$ für alle $z_0 \in (0, z)$ ist, siehe oben. Die Größen $\overset{0}{m}(0)$ und E hängen nun von L ab, wegen der zweiten Randbedingung bei $z = L$, vergleiche (A.20). Für unsere KDE im I. und II. Kapitel benötigen wir die Casimir-Kraft pro Flächeneinheit A aus (1.15). Diese ist gleich $-\frac{d}{dL}\left(\frac{\mathcal{F}}{A}\right)$ (siehe (A.22) folgende).

Untersuchen wir zunächst den einfachen Fall $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{z_0} < 0$ für alle $z_0 \in (0, L)$, der durch die Randbedingung $h_1\hat{h}_1 < 0$ repräsentiert wird. Dann muß nach dem Energiesatz die Gesamtenergie des Teilchens $E > 0$ sein, denn es startet zur "Zeit" $z = 0$, läuft über den Potentialberg *hinweg* und hat zur "Zeit" $z = L$ die "Geschwindigkeit" $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{z=L}$ am "Ort" $\overset{0}{m}(L)$. Aus (A.18) bis (A.20) und der Substitution $M = \overset{0}{m}(z)$ ergibt sich dann die korrespondierende freie Energie pro Flächeneinheit A:

$$\frac{1}{A}\,\overset{0}{\mathcal{F}} = \mathcal{L}_1(\overset{0}{m}(0)) + \hat{\mathcal{L}}_1(\overset{0}{m}(L)) - E\,L + \int_{\overset{0}{m}(L)}^{\overset{0}{m}(0)} dM\ v[M] \quad . \tag{A.22}$$

Zur Berechnung der Casimir-Kraft differenzieren wir (A.22) nach L. Die Ableitungen von $\overset{0}{m}(0), \overset{0}{m}(L)$ und $E(L)$ nach L liefern keinen Beitrag. Dies folgt aus der Benutzung der Randbedingungen $h_1\hat{h}_1 < 0$ für $\overset{0}{m}$ bei $z = 0$ und $z = L$ (vergleiche (A.8b) und (A.19)). Der Term $L\frac{d}{dL}E$ kürzt sich nach der Ersetzung von L durch (A.21) an der Stelle $z = L$, mit dem unter dem Integral differenzierten vierten Term aus (A.22). Das Resultat ist [24]

$$\frac{d}{dL}\,\frac{1}{A}\,\overset{0}{\mathcal{F}} = -E \quad . \tag{A.23}$$

Die (reduzierte leitende singuläre) Casimir-Kraft pro Flächeneinheit A aus (1.15) in leitender Ordnung ist dann

$$\overset{0}{\mathcal{K}}_{Casimir} \equiv E \quad . \tag{A.24}$$

(Wir betrachten im folgenden nur die leitenden singulären Anteile.) Die Gleichung (1.15) in leitender Ordnung ("Mean Field")

$$\frac{d}{dL}\,\frac{1}{A}\,\overset{0}{\mathcal{F}} = -\langle T_{\perp\perp}\rangle^{(0)} \quad , \tag{A.24a}$$

können wir auch leicht explizit verifizieren. Wir differenzieren dazu (A.18) nach L und erhalten, unter Beachtung, daß das "Mean-Field" Profil $\overset{0}{m}(z)$ über die Randbedingungen auch implizit von L abhängt,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dL}\frac{1}{A}\overset{0}{\mathcal{F}} &= \mathcal{L}_1'(\overset{0}{m}(0))\,\partial_L\overset{0}{m}(0)\\ &+\hat{\mathcal{L}}_1'(\overset{0}{m}(L))\left[\partial_L\overset{0}{m}(z)|_{z=L}+\partial_z\overset{0}{m}(z)|_{z=L}\right]\\ &+\int_0^L dz\int_0^L dz'\left(\partial_L\overset{0}{m}(z')\right)\frac{\delta}{\delta\overset{0}{m}(z')}\left\{\frac{1}{2}\left(\partial_z\overset{0}{m}(z)\right)^2+\mathcal{L}_B(\overset{0}{m}(z))\right\}\\ &+\frac{1}{2}\left(\partial_z\overset{0}{m}(z)|_{z=L}\right)^2+\mathcal{L}_B(\overset{0}{m}(L))\quad . \end{aligned}\tag{A.24b}$$

Der Strich an $\mathcal{L}_1$ und $\hat{\mathcal{L}}_1$ bezeichnet eine Ableitung nach dem Argument. Wegen der Ableitungen unter dem Integral müssen wir die Funktional-Differentiation ernstnehmen. Wir benutzen nun

$$\left(\partial_z\overset{0}{m}(z)\right)\,\partial_z\delta(z-z')=\partial_z\left[\left(\partial_z\overset{0}{m}(z)\right)\delta(z-z')\right]-\delta(z-z')\,\partial_z^2\overset{0}{m}(z)\quad ,\tag{A.24c}$$

und erhalten nach einsetzen für den Integralterm in (A.24b)

$$\begin{aligned}\int_0^L dz\int_0^L dz'\ldots &= \partial_L\overset{0}{m}(z)|_{z=L}\,\partial_z\overset{0}{m}(z)|_{z=L}-\partial_L\overset{0}{m}(0)\partial_z\overset{0}{m}(z)|_{z=0}+\\ &+\int_0^L dz\left(\partial_L\overset{0}{m}(z)\right)\left[-\partial_z^2\overset{0}{m}(z)+\mathcal{L}_B'(\overset{0}{m}(z))\right]\quad .\end{aligned}\tag{A.24d}$$

Der letzte Integralterm in (A.24d) ist null, da $\overset{0}{m}$ die "Mean-Field"-Gleichung (A.8a) im Volumen für $z\in(0,L)$ löst. Die ersten beiden Terme ergänzen den ersten Beitrag, und den zweiten Beitrag in der eckigen Klammer von (A.24b), zu den Randbedingungen des Films bei $z=0$ und $z=L$, vergl. (A.8b) für $z=0$. Wir müssen beachten, daß die normalen Ableitungen (die in die Randbedingungen eingehen) bei $z=0$ und L entgegengesetzte Vorzeichen haben, so daß

$$\hat{\mathcal{L}}_1'(\overset{0}{m}(L))=-\partial_z\overset{0}{m}(z)|_{z=L}\tag{A.24e}$$

ist. Dann erhalten wir nach einsetzen von (A.24d) und (A.24e) in (A.24b) das (auch für $t\neq 0$ gültige) Resultat

$$\begin{aligned}\frac{d}{dL}\frac{1}{A}\overset{0}{\mathcal{F}} &= -\frac{1}{2}\left(\partial_z\overset{0}{m}(z)|_{z=L}\right)^2+\mathcal{L}_B(\overset{0}{m}(L))\\ &= -\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel,z{=}L)\right\rangle^{(0)}\quad .\end{aligned}\tag{A.24f}$$

Denn in leitender Ordnung trägt zu $T_{\perp\perp}$ nur T_0 aus (3.39a) bei, und wegen der Erhaltung von $\left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\right\rangle$ (vergl. (3.33)) ist der Mittelwert von z *unabhängig*. Dies läßt sich auch leicht explizit einsehen:

$$\begin{aligned}\partial_z \left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z)\right\rangle^{(0)} &= \partial_z \left\{\frac{1}{2}\left(\partial_z \overset{0}{m}\right)^2 - \mathcal{L}_B(\overset{0}{m})\right\} \\ &= \left(\partial_z \overset{0}{m}\right)\left[\partial_z^2 \overset{0}{m} - \mathcal{L}_B'(\overset{0}{m})\right] \\ &= 0 \quad , \end{aligned} \tag{A.24g}$$

da $\overset{0}{m}$ Lösung der "Mean-Field" Gleichung ist.

Betrachten wir nun den Fall, in dem $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{z_0}$ für ein $z_0 \in (0, L)$ das Vorzeichen ändert. Er wird durch die Randbedingungen bei $z = 0$ und $z = L$ mit $h_1\hat{h}_1 > 0$ und $E < 0$ repräsentiert. Im Bild des Newton-Teilchens bedeutet es, daß seine Gesamtenergie E zu klein ist, um den Potentialberg $(-\mathcal{L}_B)$ zu überwinden. Es kehrt daher zur "Zeit" $z_0 \in (0, L)$ am "Ort" $\overset{0}{m}(z_0) > 0$ seine Bewegungsrichtung um und läuft *dieselbe* Seite wieder hinunter. Dadurch muß das Integral in (A.22) durch zwei Integrale ersetzt werden, die sich vom Wendepunkt $\overset{0}{m}(z_0)$ bis $\overset{0}{m}(0)$ und von $\overset{0}{m}(z_0)$ bis $\overset{0}{m}(L)$ erstrecken. Dies folgt aus $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{\tilde{z}} < 0$ für $\tilde{z} \in (0, z_0)$, $\frac{d\overset{0}{m}}{dz}|_{\tilde{z}} > 0$ für $\tilde{z} \in (z_0, L)$ und (A.19). Nach ähnlicher Rechnung ergibt sich dann wieder dasselbe Resultat (A.23).

Nun interessieren wir uns für die *universelle* Casimir-Amplitude am (infrarotstabilen) RG-Fixpunkt (mit $t = 0$). Bevor wir aber unsere expliziten Resultate (A.23) und (A.24) benutzen können, sind noch einige Bemerkungen zum Renormierungsfluß dieser Größen notwendig, ähnlich wie in (2.16) und (2.11). [Denn E hängt von u ab und ist somit nicht universell.]

Zu betrachten ist die dimensionslose Größe

$$\frac{L^d}{1-d}\frac{d}{dL}\frac{1}{A}\overset{0}{\mathcal{F}} = \Delta_{a,b}(t = 0, L, u; c, h_1; \hat{c}, \hat{h}_1) \quad , \tag{A.25}$$

die nach Benutzung der Reparametrisierung (2.2) renormiert ist, d.h. endlich für $\epsilon \to 0$ [2]. Im asymptotischen Bereich $L \gg u^{-1/\epsilon}$ ergibt sich aus der RG-Gleichung für $\Delta_{a,b}$ und dem RG-Fluß der Parameter in (A.25) die Relation [2]:

$$\Delta_{a,b}(t^R = 0, \mu L, u^R; c^R, h_1^R; \hat{c}^R, \hat{h}_1^R) = \Delta_{a,b}(0, 1, u^{*R}; c^{*R}, h_1^{*R}; \hat{c}^{*R}, \hat{h}_1^{*R}) \quad , \tag{A.26}$$

am infrarotstabilen RG-Fixpunkt mit u^{*R} aus (2.4) und den Fixpunkt-Parametern von $\mathcal{L}_1$ und $\hat{\mathcal{L}}_1$, die die Oberflächenuniversalitätsklassen a und b charakterisieren. Hier werden diese durch die Vorzeichen von $h_1\hat{h}_1 < 0$ und $h_1\hat{h}_1 > 0$ repräsentiert, vergl. die Diskussion um (1.4a) folgende. Dies impliziert am RG-Fixpunkt $\overset{0}{m}(0) = +\infty$ mit $\overset{0}{m}(L) = -\infty$ und $+\infty$, wie bereits bei der Berechnung des Film-Profils (2.16c) angemerkt wurde.

Aus (1.15), (1.16), (A.26) und (A.24) folgt dann in leitender Ordnung ϵ: $(d-1)\Delta_{a,b} = EL^d$. Wir benutzen die Resultate von Indekeu et al. [24] und erhalten nach Anpassung der Parameter ihrer Hamiltonfunktion[2] an (2.1) für $h_1\hat{h}_1 > 0$ die *universelle* Größe

$$\Delta_{+,+} = -\frac{1}{\epsilon}\,\zeta + O(\epsilon^0) \quad , \tag{A.27a}$$

mit[3]

$$\zeta = \frac{3}{2\pi^2}\,(1.854)^4 = 1.796 \quad . \tag{A.27b}$$

Benutzung von (3.35) aus Ref. [24] ergibt (in leitender Ordnung)

$$\Delta_{+,+} = -\Delta_{+,-}/4 \quad , \tag{A.28}$$

die universelle Casimir-Amplitude im Fall $h_1\hat{h}_1 < 0$. Das Minuszeichen in (A.28) ist die Folge der energetisch ungünstigen Inversion des OP's, durch die entgegengesetzten Randbedingungen $h_1 > 0$ und $\hat{h}_1 < 0$.

[2] $C = 1$, $B = \frac{\nu}{6}$, in Ref. [24].

[3] Die Größe K_a in Ref. [24] läßt sich weiter umformen zu $K_a = \Gamma(1/4)/(4\sqrt{4\pi})$.

Anhang B

$\langle T_{\perp\perp}\rangle$ und die freie Energie im unbeschränktem Volumen

Hier werden wir die leitenden singulären Anteile (LS) $\langle T_{\perp\perp}\rangle_{b,+,LS}$ und $f_{b,+,LS}$ von $\langle T_{\perp\perp}\rangle_{b,+}$ und $f_{b,+}$ für das unbegrenzte System und $T > T_{cb}$ in leitender Ordnung ϵ berechnen. Wir werden Gleichung (1.11) verifizieren, d.h. das beide Ausdrücke bis auf das Vorzeichen übereinstimmen. Da die freie Energie und $\langle T_{\perp\perp}\rangle$ für $t \neq 0$ eine additive Renormierung proportional t^2 benötigen, betrachten wir die differenzierten Größen

$$d\nu(d\nu-1)(d\nu-2)f_{b,+,LS} = \left[t^3 \frac{d^2}{dt^2} \left\langle \frac{1}{2}\Phi^2 \right\rangle_{b,+} \right]^* \tag{B.1a}$$

und

$$d\nu(d\nu-1)(d\nu-2)\,\langle T_{\perp\perp}\rangle_{b,+,LS} = \left[t^3 \frac{d^3}{dt^3} \langle T_{\perp\perp}\rangle_{b,+} \right]^* , \tag{B.1b}$$

wobei der Stern $*$ die Substitution von u^R durch u^{*R} bezeichnet. Die additiven "Counterterme" [2] und die entsprechenden regulären Temperaturbeiträge sind wegdifferenziert worden. Damit sind die Größen in den eckigen Klammern auf den rechten Seiten renormiert, d.h. endlich[1] für $\epsilon \to 0$, bei festem u^R und t^R.

In leitender Ordnung ergibt sich

$$\left\langle \Phi^2 \right\rangle_{b,+} = \left\langle \Phi^2 \right\rangle_b^{(0)} \tag{B.2}$$

[1] Dies folgt aus der ("nackten") freien Energie $\mathcal{F}$, ausgedrückt durch die renormierte freie Energie $\mathcal{F}^R$ und einen additiven "Counterterm" $\mathcal{H}_A \sim \left(t^R\right)^2$ [2, 4, 19]: $\mathcal{F} = \mathcal{F}^R + \mathcal{H}_A$. [Daher ist in (B.1a) auch keine zusätzliche multiplikative Renormierung mit Z_t nötig. $T_{\perp\perp}$ ist nach Konstruktion bereits multiplikativ renormiert.]

und

$$\langle T_{\perp\perp}\rangle_{b,+} \;=\; \tfrac{2-d}{d}\left\langle \tfrac{1}{2}(\nabla\Phi)^2\right\rangle_b^{(0)} \;-\; t\,\left\langle \tfrac{1}{2}\Phi^2\right\rangle_b^{(0)} \quad , \tag{B.3}$$

mit *gaußschen* Mittelwerten bei $t>0$. Damit erhalten wir die Darstellung

$$\left\langle \Phi^2\right\rangle_b^{(0)} \;=\; \lim_{r\to r'} G_b \tag{B.4}$$

und

$$\left\langle (\nabla\Phi)^2\right\rangle_b^{(0)} \;=\; \lim_{r\to r'} \nabla_r\nabla_{r'} G_b \quad , \tag{B.5}$$

mit

$$\begin{aligned} G_b &= G_b(|r-r'|,t) \\ &= (2\pi)^{-2+\frac{\epsilon}{2}}\,\rho^{-2+\epsilon}\,(\rho\sqrt{t})^{1-\frac{\epsilon}{2}}\,K_{1-\frac{\epsilon}{2}}(\rho\sqrt{t}) \\ &= \int d^dq/(2\pi)^d\,\mathrm{e}^{iq\cdot(r-r')}\Big/(q^2+t) \quad , \end{aligned} \tag{B.6}$$

dem freien Propagator (A.9) des unbegrenzten Systems. Hier ist $\rho=|r-r'|$ und K eine modifizierte Besselfunktion. Für die Herleitung von (B.3) haben wir die Form des Spannungstensors aus (3.31a) und die Translations- und Rotationsinvarianz im unbegrenzten System benutzt. Aus der Fourier-Darstellung in (B.6) ergeben sich die Grenzwerte $r\to r'$, mit der Methode der Dimensionsregularisierung[2]; und die Resultate sind

$$t\,\left\langle \frac{1}{2}\Phi^2\right\rangle_b^{(0)} = -\,\vartheta\,\Gamma\!\left(\frac{\epsilon}{2}\right)\frac{1}{2-\epsilon} \tag{B.7a}$$

und

$$\frac{2-d}{d}\left\langle \frac{1}{2}(\nabla\Phi)^2\right\rangle_b^{(0)} = -\,\vartheta\,\Gamma\!\left(\frac{\epsilon}{2}\right)\frac{1}{4-\epsilon} \quad , \tag{B.7b}$$

mit der Abkürzung

$$\vartheta = [t/(4\pi)]^{2-\frac{\epsilon}{2}} \quad . \tag{B.7c}$$

Nach einsetzen dieser Zwischenresultate sind die Inhalte der eckigen Klammern in (B.1a) und (B.1b) in leitender Ordnung ϵ

$$t^3\frac{d^2}{dt^2}\left\langle \frac{1}{2}\Phi^2\right\rangle_b^{(0)} = \frac{1}{2}\vartheta\,\Gamma\!\left(1+\frac{\epsilon}{2}\right) \tag{B.8a}$$

und

$$t^3\frac{d^3}{dt^3}\,\langle T_{\perp\perp}\rangle_b^{(0)} = -\frac{1}{2}\vartheta\,\Gamma\!\left(1+\frac{\epsilon}{2}\right) \quad . \tag{B.8b}$$

Wie erwartet, stimmen beide Ausdrücke bis auf das Vorzeichen überein und sind endlich für $\epsilon\to 0$. Die Korrelationslänge ξ_+ im Gauß-Modell ist $1/\sqrt{t}$, vergleiche die Diskussion nach (2.14). Da in niedrigster Ordnung $d\nu-2=-\epsilon/6+O(\epsilon^2)$ ist, ergibt sich damit aus (B.8a) und (B.1a) die Größe $\xi_+^d f_{b,+,LS}$ in leitender Ordnung ϵ, d.h. das Resultat (2.14).

[2]D.h. ϵ wird jeweils so groß gewählt, daß die hier auftretenden Betafunktionen existieren und dann wird nach $\epsilon\to 0$ analytisch fortgesetzt

Anhang C

Verschiebungsidentitäten für Halbraum-Systeme

Hier werden wir die im III. Kapitel hergeleitete allgemeine Beziehung (3.32) für den EX-Übergang in leitender ("0-Loop") und nächstleitender Ordnung ("1-Loop") verifizieren. Die Benutzung dieser Resultate ermöglicht uns dann die einfache Berechnung der lateral integrierten 2-Punkt-Funktion $\int d^{d-1}r_\parallel \left\langle T_{\perp\perp}(r_\parallel, z) T_{\perp\perp}(r'_\parallel, z') \right\rangle$, in dieser Ordnung. Zur Vereinfachung beschränken wir uns auf das asymptotische Verhalten bei $t = 0$, mit dem Ordnungsparameterprofil (2.6) und dem gaußschen Propagator aus (2.7) und (2.8c). Wie aus (3.32) ersichtlich, gelten die Ward-Identitäten nicht nur am Fixpunkt, wie wir für beliebiges u und ϵ explizit zeigen werden. Dies läßt sich auch für $t \neq 0$ in der leitenden Ordnung leicht mit dem Ordnungsparameterprofil und dem gaußschen Propagator aus den Gleichungen (2.9) zeigen. Nach einer einfachen Algebra ergibt sich (3.32) in leitender Ordnung u auch für $t \neq 0$.

Zur besseren Übersicht führen wir für die linke Seite von (3.32) die Bezeichnung $(T_{\perp\perp}, \Xi)_{z,z'}$ ein. Damit haben die Identitäten für $\Xi = \Phi$ und Φ^2 die äquivalente Darstellung

$$(T_{\perp\perp}, \varphi)_{z,z'} = \partial_{z'}\, m(z') \qquad \text{oder} \quad null \tag{C.1}$$

und

$$\left(T_{\perp\perp}, \varphi^2\right)_{z,z'} = \partial_{z'} \left\langle \varphi^2(r'_\parallel, z') \right\rangle \qquad \text{oder} \quad null \tag{C.2}$$

für $z < z'$ oder $z > z'$. Dies ergibt sich aus (2.5a) und dem verschwinden von $\langle\varphi\rangle$, $(T_{\perp\perp}, m)$ und $(T_{\perp\perp}, m^2)$, vergleiche den Text nach (3.32). Zur Kennzeichnung des Beitrages von $(T_{\perp\perp}, \Xi)$ in der Ordnung u^λ führen wir die Bezeichnung $(T_{\perp\perp}, \Xi)^{(\lambda)}$ mit dem oberen Index (λ) ein.
Die Gleichung (C.1) haben wir in leitender Ordnung schon kurz im Text hinter (3.43) erklärt, und es ist

$$\begin{aligned} (T_{\perp\perp}, \varphi)^{(-1/2)}_{z,z'} &= (T_1, \varphi)^{(-1/2)}_{z,z'} \\ &= -(12/u)^{1/2}\, z^{-3}\, (z\partial_z + 2)\, \overset{0}{\chi}(z, z') \quad . \end{aligned} \tag{C.3}$$

Einsetzen von $\overset{0}{\chi}$ aus (2.10) bestätigt mit $\overset{0}{m}$ aus (2.6), daß die rechte Seite gleich $\partial_{z'}\overset{0}{m}(z')$ oder null ist, für $z < z'$ oder $z > z'$. [Der leitende (verbundene) Beitrag zu (C.2) ist null.]

Nun betrachten wir die nächstleitende ("1-Loop") Ordnung, d.h. die Beiträge $O(u^{1/2})$ und $O(u^0)$ zu (C.1) und (C.2). Es ist nützlich mit der Gleichung (C.2) zu beginnen, wie bei der expliziten Rechnung sichtbar werden wird:

$$\left(T_{\perp\perp},\varphi^2\right)^{(0)}_{z,z'} = \left(T_1,\varphi^2\right)^{(0)}_{z,z'} + \left(T_2,\varphi^2\right)^{(0)}_{z,z'} \quad . \tag{C.4}$$

In dieser Ordnung liefern T_3 aus (3.39d) und T_4 aus (3.39e) keinen Beitrag zu (C.4). Zur Berechnung des ersten Terms muß der Boltzmannfaktor nach der ungeraden Wechselwirkung (A.5b) in erster Ordnung entwickelt werden. Die Anwendung des Wick-Theorems ergibt

$$\begin{aligned}\left(T_1,\varphi^2\right)^{(0)}_{z,z'} &= -u\int_0^\infty dR_\perp\ (T_1,\varphi)^{(-1/2)}_{z,R_\perp}\ \overset{0}{m}(R_\perp)\ \mathcal{B}(R_\perp,z') \\ &= 12\int_z^\infty dR_\perp\ R_\perp^{-3}\ \mathcal{B}(R_\perp,z') \quad ,\end{aligned} \tag{C.5}$$

durch die Benutzung der Verschiebungsidentität (C.3), in der ersten Zeile von (C.5). Die Funktion $\mathcal{B}$ ist definiert durch

$$\begin{aligned}\mathcal{B}(z_1,z_2) &= \int d^{d-1}r_\parallel\ \left[G(r_\parallel;z_1,z_2)\right]^2 \\ &= \frac{\omega}{4}\int_0^\infty dp\, p^{-\epsilon}\, U^2\left(p\min(z_1,z_2)\right)\ W^2\left(p\max(z_1,z_2)\right) \quad ,\end{aligned} \tag{C.6}$$

mit

$$\omega = 2^{2-d}\,\pi^{-(d-1)/2}\ 1/\Gamma((d-1)/2) \quad , \tag{C.7}$$

der Fläche der $d-1$ dimensionalen Einheitskugel, dividiert durch $(2\pi)^{d-1}$, und U und W aus (2.8d) und (2.8b). Das Integral in (C.6) ist für $\epsilon < 3$ und $z_1 \neq z_2$ wohldefiniert, da dann weder ein IR-Pol, wegen (2.8e), noch ein UV-Pol, wegen der exponentiellen Konvergenz von U^2W^2 für $z_1 \neq z_2$, auftritt. Für $z_1 \to z_2$ hat $\mathcal{B}$ eine UV-Singularität $|z_1 - z_2|^{-1+\epsilon}$, wegen des asymptotischen Verhaltens von (C.6) für $p \to \infty$, und damit ist (C.5) $\sim \epsilon^{-1}$ für $\epsilon \to 0$. Das asymptotische Verhalten für $z_1 \to 0$ und $z_1 \to \infty$ mit z_2 fest, $\mathcal{B} \sim z_1^6$ und $\mathcal{B} \sim z_1^{\epsilon-7}$, ergibt sich leicht nach der Substitution $x = p\min(z_1,z_2)$ und $x = p\max(z_1,z_2)$ in (C.6).

Der zweite Term auf der rechten Seite von (C.4) ergibt sich durch einsetzen von T_2 aus (3.39c). Der $\mathcal{D}_\parallel$-Term trägt wegen der Parallelintegration nicht bei und wir erhalten

$$\left(T_2,\varphi^2\right)^{(0)}_{z,z'} = \frac{\omega}{4}\int_0^\infty dp\, p^{-\epsilon}\ \left[(\partial_z U(pz))^2 - \left(p^2+\frac{6}{z^2}\right)U^2(pz)\right]W^2(pz') \tag{C.8}$$

für $z < z'$. Das Resultat für $z > z'$ erhalten wir aus (C.8), durch vertauschen von U und W, wegen (2.8c).

Es ist nützlich, zunächst die z-Unabhängigkeit von (C.4) für $z < z'$ und $z > z'$ zu zeigen, die gemäß (C.2) gelten soll. Diese ergibt sich für $z < z'$ aus

$$\partial_z \left(T_1 + T_2, \varphi^2\right)^{(0)}_{z,z'} = \frac{\omega}{4} z^{\epsilon-4} \int_0^\infty dx\, x^{3-\epsilon} \times \left\{ -\frac{12}{x^3} U^2 + \frac{d}{dx} \left[\left(\frac{dU}{dx}\right)^2 - \left(1 + \frac{6}{x^2}\right) U^2 \right] \right\} W^2\left(x \frac{z'}{z}\right) \quad , \tag{C.9}$$

mit $U = U(x)$. Gleichung (C.9) ist eine Folge von (C.5), (C.6), (C.8) und der Substitution $x = pz$. Der Ausdruck in der geschweiften Klammer ist null, denn U ist auch eine Lösung der Differentialgleichung (2.8a), so daß die Ersetzung von W durch U in (2.8a) und die Multiplikation mit $(-2)dU/dx$, genau diesen Ausdruck produziert. Für $z > z'$ gilt entsprechend (C.9), wobei U und W vertauscht werden müssen, und die geschweifte Klammer verschwindet analog.

Der z-unabhängige Wert der rechten Seite von (C.4) für $z > z'$, ergibt sich aus dem asymptotischen Verhalten für $z \to \infty$, bei festem z'. Dieser Wert ist null, da (C.5) und (C.8) dann jeweils proportional zu $z^{\epsilon-9}$ sind, wie sich aus (2.8c) und (2.8b) ergibt, vergleiche die analoge Diskussion nach (C.7). Damit ist die zweite Beziehung von (C.2) gezeigt.

Der gaußsche Propagator $\tilde{G}(p; z, z')$ ist stetig bei $z = z'$, aber dort *nicht* differenzierbar, da die min und max Funktionen im Propagator (2.8c) bei $z = z'$ stetig, aber nicht differenzierbar sind[1]. Daraus folgt, daß der entsprechende Wert von (C.4) für $z < z'$ gleich dem Sprung bei $z = z'$

$$(z')^{\epsilon-3} \frac{\omega}{4} \int_0^\infty dx\, x^{2-\epsilon} \left[\left(\frac{dU}{dx}\right)^2 W^2 - \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 U^2 \right] \quad , \tag{C.10a}$$

des ersten Terms von $(T_2, \varphi^2)^{(0)}$ ist, betrachte den ersten Beitrag auf der rechten Seite von (C.8). Es ist $U = U(x)$ und $W = W(x)$. Die "Sprünge" aller anderen Beiträge zu $(T_1 + T_2, \varphi^2)^{(0)}$ verschwinden in Dimensionsregularisierung[2], da $\tilde{G}$ stetig ist. Der Ausdruck innerhalb der eckigen Klammern in (C.10a) ist gleich $2d(UW)/dx$, wie sich mit der Wronski-Determinante aus (2.8f) zeigen läßt, und einsetzen in (C.10a) liefert dann

$$\frac{\omega}{2} \int_0^\infty dp\, p^{2-\epsilon}\, d(U(pz')W(pz'))/d(pz') = \partial_{z'} \left\langle \varphi^2(r'_\parallel, z') \right\rangle_0 \quad . \tag{C.10b}$$

Das Gleichheitszeichen in (C.10b) resultiert aus der Verwendung von (A.9), (2.7) und (2.8c). Damit ist (C.2) in nächstleitender Ordnung u^0 ("1-Loop") bewiesen.

[1]Dies gilt allgemein für *jede* Greenfunktion ("Grundlösung" [35]) einer Differentialgleichung, wie sich aus einer z-Integration dieser Differentialgleichung von z.B. $z' - \epsilon$ bis $z' + \epsilon$ und $\epsilon \to 0$ ergibt.

[2]D.h. wähle ϵ so groß, daß die entsprechenden Integrale wohldefiniert sind und setze dann nach ϵ nahe null fort.

Für $z = 0$ erhalten wir aus (C.4) eine nützliche Identität, da dann wegen (2.8e) der Ausdruck (C.8) gleich null ist und somit gilt

$$12 \int_0^\infty dR_\perp \, R_\perp^{-3} \, \mathcal{B}(R_\perp, z') = \partial_{z'} \left\langle \varphi^2(r'_\parallel, z') \right\rangle_0 \quad . \tag{C.10c}$$

Nun verifizieren wir die Verschiebungsidentität (C.1) in der Ordnung $u^{1/2}$. Einsetzen der entsprechenden Beiträge von $T_{\perp\perp}$ aus (3.39) liefert

$$(T_{\perp\perp}, \varphi)^{(1/2)} = (T_1 + T_2 + T_3, \varphi)^{(1/2)} \quad , \tag{C.11}$$

mit

$$(T_1, \varphi)^{(1/2)}_{z,z'} = \left[\left(\partial_z \overset{I}{m} \right) \partial_z - \frac{u}{2} \left(\overset{0}{m} \right)^2 \overset{I}{m} \right] \overset{0}{\chi}(z, z') \; + \; \tau_{B+C}(z, z') \; + \; \tau_D(z, z') \quad , \tag{C.12}$$

wobei $\overset{I}{m} = \overset{I}{m}(z)$, $\overset{0}{m} = \overset{0}{m}(z)$,

$$(T_2, \varphi)^{(1/2)}_{z,z'} = -\frac{u}{2} \int_0^\infty dR_\perp \; \left(T_2, \varphi^2 \right)^{(0)}_{z,R_\perp} \overset{0}{m}(R_\perp) \, \overset{0}{\chi}(R_\perp, z') \tag{C.13}$$

und

$$(T_3, \varphi)^{(1/2)}_{z,z'} = -\frac{u}{2} \, \overset{0}{m}(z) \left\langle \varphi^2(r) \right\rangle_0 \; \overset{0}{\chi}(z, z') \quad . \tag{C.14}$$

Gleichung (C.13) ergibt sich aus der Entwicklung des Boltzmannfaktors in erster Ordnung nach der ungeraden Wechselwirkung (A.5b); und τ_{B+C} und τ_D sind definiert durch

$$\tau_i(z, z') = \left[\left(\partial_z \overset{0}{m} \right) \partial_z - \frac{u}{6} \left(\overset{0}{m} \right)^3 \right] \chi^{(i)}(z, z') \quad . \tag{C.12a}$$

Die Schichtsuszeptibilitäten $\chi^{(B+C)}$ und $\chi^{(D)}$ werden im Text nach Gleichung (4.3) definiert. Mit den Gleichungen (4.2) und (3.39b) erhalten wir dann

$$\tau_{B+C}(z, z') = -u \int_0^\infty dR_\perp \; (T_1, \varphi)^{(-1/2)}_{z,R_\perp} \; \gamma_{B+C}(R_\perp) \; \overset{0}{\chi}(R_\perp, z') \quad , \tag{C.15}$$

und analog mit (4.3), (C.6) und (3.39b)

$$\begin{aligned} \tau_D(z, z') \; &= \; \frac{u^2}{2} \int_0^\infty dR_\perp \, dR'_\perp \; \overset{0}{m}(R_\perp) \, \overset{0}{m}(R'_\perp) \, (T_1, \varphi)^{(-1/2)}_{z,R_\perp} \; \mathcal{B}(R_\perp, R'_\perp) \; \overset{0}{\chi}(R'_\perp, z') \\ &= \; -\frac{u}{2} \int_0^\infty dR'_\perp \; \overset{0}{m}(R'_\perp) \left(T_1, \varphi^2 \right)^{(0)}_{z,R'_\perp} \; \overset{0}{\chi}(R'_\perp, z') \quad . \end{aligned} \tag{C.16}$$

Die zweite Zeile von (C.16) ergibt sich durch Benutzung von (C.5). Dadurch erhalten wir nun nach Addition von (C.13) und (C.16) die Verschiebungsidentität (C.4) unter dem Integral

$$\begin{aligned} (T_2, \varphi)^{(1/2)}_{z,z'} + \tau_D(z, z') \; &= \; -\frac{u}{2} \int_0^\infty dR_\perp \; \overset{0}{m}(R_\perp) \, \overset{0}{\chi}(R_\perp, z') \; \left(T_1 + T_2, \varphi^2 \right)^{(0)}_{z,R_\perp} \\ &= \; -\frac{u}{2} \int_z^\infty dR_\perp \; \overset{0}{m}(R_\perp) \, \overset{0}{\chi}(R_\perp, z') \, \partial_{R_\perp} \left\langle \varphi^2(R) \right\rangle_0 \\ &= \; -\sqrt{3u} \, (\epsilon - 2) \mathcal{P} \int_z^\infty dR_\perp \; R_\perp^{\epsilon - 4} \; \overset{0}{\chi}(R_\perp, z') \quad . \end{aligned} \tag{C.17}$$

Die letzte Zeile in (C.17) bekommen wir mit $\langle\varphi^2(R)\rangle_0$ aus Gleichung (4.5). Die Größe $\mathcal{P}$ ist in (4.5a) definiert. Einsetzen von γ_{B+C} aus (4.2a) mit $\overset{I}{m}$ aus (4.4) und von $\langle\varphi^2(R)\rangle_0$ in (C.15) ergibt mit (C.3)

$$\tau_{B+C}(z,z') = 2\sqrt{3u}\,\mathcal{P}\left[\frac{1}{2} - \frac{6}{(1+\epsilon)(4-\epsilon)}\right]\int_z^\infty dR_\perp\, R_\perp^{\epsilon-4}\ \overset{0}{\chi}(R_\perp,z') \quad . \tag{C.18}$$

Damit erhalten wir aus (C.17) und (C.18)

$$(T_2,\varphi)^{(1/2)}_{z,z'} + \tau_D(z,z') + \tau_{B+C}(z,z') = -\frac{\epsilon(5-\epsilon)(\epsilon-1)}{(1+\epsilon)(4-\epsilon)}\sqrt{3u}\,\mathcal{P}\int_z^\infty dR_\perp\, R_\perp^{\epsilon-4}\ \overset{0}{\chi}(R_\perp,z') \,. \tag{C.19}$$

Für den ersten Term auf der rechten Seite von (C.12) ergibt sich nach einsetzen das Resultat

$$\left[(\partial_z\,\overset{I}{m})\partial_z - \frac{u}{2}(\overset{0}{m})^2\,\overset{I}{m}\right]\overset{0}{\chi}(z,z') = -\sqrt{3u}\frac{\mathcal{P}z^{\epsilon-3}}{(1+\epsilon)(4-\epsilon)}\left[(\epsilon-1)z\partial_z - 6\right]\overset{0}{\chi}(z,z') \quad . \tag{C.20}$$

Einsetzen der Größen in (C.14) liefert

$$(T_3,\varphi)^{(1/2)}_{z,z'} = -\sqrt{3u}\,\mathcal{P}z^{\epsilon-3}\ \overset{0}{\chi}(z,z') \quad . \tag{C.21}$$

Nun sind alle Terme aus (C.11) bekannt und wir erhalten nach Addition von (C.20), (C.19) und (C.21), und Vereinfachung die Identität

$$\begin{aligned}(T_{\perp\perp},\varphi)^{(1/2)}_{z,z'}\Big/\left[(\partial_{z'}\,\overset{I}{m}(z'))/(z')^{\epsilon-2}\right] &= z^{\epsilon-3}\,(2-\epsilon+z\partial_z)\ \overset{0}{\chi}(z,z') + \\ &\quad +\epsilon\,(5-\epsilon)\int_z^\infty dR_\perp\, R_\perp^{\epsilon-4}\ \overset{0}{\chi}(R_\perp,z') \quad .\end{aligned} \tag{C.22}$$

Nach einsetzen von $\overset{0}{\chi}(R_\perp,z')$ aus (2.10) ergibt sich, daß die rechte Seite von (C.22) gleich $(z')^{\epsilon-2}$ oder *null* ist, für $z<z'$ oder $z>z'$. Damit ist (C.1) in der Ordnung $u^{1/2}$ bewiesen.

Als dritte interessante Verschiebungsidentität werden wir

$$(T_{\perp\perp},T_{\perp\perp})_{z,z'} = 0 \tag{C.23}$$

in leitender u^{-1} und nächstleitender Ordnung u^0 verifizieren. Wegen der Symmetrie genügt es (C.23) für $z>z'$ zu zeigen und diese Bedingung soll im folgenden *immer* gelten.

In leitender Ordnung u^{-1} trägt von $T_{\perp\perp}$ nur T_1 aus (3.39b) bei und der Beweis von (C.23) ergibt sich dann aus (C.1) bzw. (C.3).

In nächstleitender Ordnung ist

$$T_{\perp\perp} = T_0 + T_1 + T_2 + T_3 + O(u^2) \quad . \tag{C.24}$$

Einsetzen in (C.23) liefert

$$(T_{\perp\perp}, T_{\perp\perp})^{(0)}_{z,z'} = (T_{\perp\perp}, T_1)^{(0)}_{z,z'} + (T_{\perp\perp}, T_2)^{(0)}_{z,z'} + (T_{\perp\perp}, T_3)^{(0)}_{z,z'} \quad . \tag{C.25}$$

Für den ersten Term auf der rechten Seite ergibt sich mit (3.39b)

$$\begin{aligned} (T_{\perp\perp}, T_1)^{(0)}_{z,z'} &= \left(\left[(\partial_z m)\partial_z - \mathcal{L}'_B(m) \right] (T_{\perp\perp}, \varphi)_{z,z'} \right)^{(0)} \\ &= 0 \quad , \end{aligned} \tag{C.26}$$

wegen der Verschiebungsidentität (C.1) und $z > z'$. Der zweite Term in (C.25) läßt sich mit (3.39) zerlegen in

$$(T_{\perp\perp}, T_2)^{(0)}_{z,z'} = \tfrac{1}{2} \left\{ \left(T_{\perp\perp}, (\partial_{z'}\varphi)^2 \right)^{(0)}_{z,z'} - \left(T_{\perp\perp}, (\partial_{r'_\parallel}\varphi)^2 \right)^{(0)}_{z,z'} - \frac{6}{z^2} \left(T_{\perp\perp}, \varphi^2 \right)^{(0)}_{z,z'} \right\} \quad . \tag{C.27}$$

Der dritte Term auf der rechten Seite von (C.27) ist null, wegen der Verschiebungsidentität (C.2) und $z > z'$.

Für den dritten Term in (C.25) ergibt sich nach einsetzen von (3.39d)

$$\begin{aligned} (T_{\perp\perp}, T_3)^{(0)}_{z,z'} &= -\frac{u}{2} \overset{0}{m}(z') \left\langle \varphi^2(r') \right\rangle_0 (T_{\perp\perp}, \varphi)^{(-1/2)}_{z,z'} \\ &= 0 \quad , \end{aligned} \tag{C.28}$$

wegen (C.1) und $z > z'$.
Somit ist nur noch das Verschwinden der beiden ersten Terme auf der rechten Seite von (C.27) für $z > z'$ zu zeigen. Diese beiden Identitäten lassen sich genau wie (C.2) beweisen. Da wir in der Ordnung u^0 rechnen, führt dies auf eine zu (C.4) korrespondierende Gleichung, so daß alle Gleichung (C.4) nachfolgenden Schritte übernommen werden können.

Wir zeigen zunächst

$$\left(T_{\perp\perp}, (\partial_{r'_\parallel}\varphi)^2 \right)^{(0)}_{z,z'} = 0 \quad , \tag{C.29}$$

für $z > z'$.
Die zu (C.5) und (C.8) analogen Gleichungen sind

$$\begin{aligned} \left(T_1, (\partial_{r'_\parallel}\varphi)^2 \right)^{(0)}_{z,z'} &= -u \int_0^\infty dR_\perp \; (T_1, \varphi)^{(-1/2)}_{z,R_\perp} \; \overset{0}{m}(R_\perp) \, \mathcal{B}_\parallel(R_\perp, z') \\ &= 12 \int_z^\infty dR_\perp \, R_\perp^{-3} \, \mathcal{B}_\parallel(R_\perp, z') \quad , \end{aligned} \tag{C.30}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_\parallel(z_1, z_2) &= \int d^{d-1} r_\parallel \; \left[\partial_{r_\parallel} G(r_\parallel; z_1, z_2) \right]^2 \\ &= \frac{\omega}{4} \int_0^\infty dp \, p^{2-\epsilon} \, U^2 \left(p \min(z_1, z_2) \right) \, W^2 \left(p \max(z_1, z_2) \right) \end{aligned} \tag{C.31}$$

und

$$\left(T_2, (\partial_{r'_\parallel}\varphi)^2\right)^{(0)}_{z,z'} = \frac{\omega}{4}\int_0^\infty dp\, p^{2-\epsilon}\left[(\partial_z W(pz))^2 - \left(p^2 + \frac{6}{z^2}\right) W^2(pz)\right] U^2(pz') \quad , \tag{C.32}$$

für $z > z'$.

Wir zeigen nun die z-Unabhängigkeit von (C.29) durch bilden von

$$\begin{aligned}\partial_z \left(T_1 + T_2, (\partial_{r'_\parallel}\varphi)^2\right)^{(0)}_{z,z'} &= \frac{\omega}{4}\, z^{\epsilon-6}\int_0^\infty dx\, x^{5-\epsilon} \times \\ &\left\{-\frac{12}{x^3}W^2 + \frac{d}{dx}\left[\left(\frac{dW}{dx}\right)^2 - \left(1+\frac{6}{x^2}\right)W^2\right]\right\} U^2\left(x\frac{z'}{z}\right) ,\end{aligned} \tag{C.33}$$

für $z > z'$ und mit $W = W(x)$. Der Ausdruck in der geschweiften Klammer ist null, wegen dem Argument im Text hinter Gleichung (C.9).
Die z unabhängige Konstante folgt analog aus der Betrachtung für $z \to \infty$, bei festem z'. Die Gleichungen (C.30) und (C.32) sind dann proportional $z^{\epsilon-11}$, wie sich mit dem gleichen Argument wie im Text hinter (C.9) und (C.7) ergibt. Damit ist Gleichung (C.29) bewiesen.

Es bleibt nur noch

$$\left(T_{\perp\perp}, (\partial_{z'}\varphi)^2\right)^{(0)}_{z,z'} = 0 \quad , \tag{C.34}$$

für $z > z'$ zu zeigen.

Analog ergibt sich

$$\begin{aligned}\left(T_1, (\partial_{z'}\varphi)^2\right)^{(0)}_{z,z'} &= -u\int_0^\infty dR_\perp\ (T_1,\varphi)^{(-1/2)}_{z,R_\perp}\ \overset{0}{m}(R_\perp)\, \mathcal{B}_{z'}(R_\perp, z') \\ &= 12\int_z^\infty dR_\perp\, R_\perp^{-3}\, \mathcal{B}_{z'}(R_\perp, z') \quad ,\end{aligned} \tag{C.35}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_{z'}(z,z') &= \int d^{d-1}r_\parallel\ \left[\partial_{z'}G(r_\parallel; z, z')\right]^2 \\ &= \frac{\omega}{4}\int_0^\infty dp\, p^{-\epsilon}\ (\partial_{z'}U(pz'))^2\ W^2(pz) \quad ,\end{aligned} \tag{C.36}$$

für $z > z'$. Im Fall $z' > z$ müssen in der letzten Zeile von (C.36) U und W vertauscht werden.
Und analog ist

$$\left(T_2, (\partial_{z'}\varphi)^2\right)^{(0)}_{z,z'} = \frac{\omega}{4}\int_0^\infty dp\, p^{-\epsilon}\left[(\partial_z W(pz))^2 - \left(p^2 + \frac{6}{z^2}\right) W^2(pz)\right] (\partial_{z'}U(pz'))^2 \quad , \tag{C.37}$$

für $z > z'$.
Die z-Unabhängigkeit ergibt sich aus

$$\begin{aligned}\partial_z \left(T_1 + T_2, (\partial_{z'}\varphi)^2\right)^{(0)}_{z,z'} &= \frac{\omega}{4}\, z^{\epsilon-4} \int_0^\infty dx\, x^{3-\epsilon} \times \\ &\left\{ -\frac{12}{x^3} W^2 + \frac{d}{dx}\left[\left(\frac{dW}{dx}\right)^2 - \left(1 + \frac{6}{x^2}\right) W^2\right]\right\} \times \\ &\left(\partial_{z'} U\left(x\frac{z'}{z}\right)\right)^2 \quad ,\end{aligned} \tag{C.38}$$

für $z > z'$ und mit $W = W(x)$. Analog zu (C.33) ist die rechte Seite von (C.38) gleich null. Der Wert der z unabhängigen Konstanten ergibt sich aus dem Verhalten von (C.35) und (C.37) für $z \to \infty$, bei festem z'. Beide Gleichungen sind proportional $z^{\epsilon-9}$ und damit ist Gleichung (C.34) bewiesen und somit auch die dritte Verschiebungsidentität (C.23).

Anhang D

ϵ-Entwicklung von $\mathcal{K} - \mathcal{L}$

Einsetzen von (4.9a) in (4.10a) und Vertauschung der Integrationsreihenfolge ergibt

$$\begin{pmatrix} \mathcal{K} \\ \mathcal{L} \end{pmatrix} = \int_0^\infty dx\, x^{-\epsilon}\, U^2(x) \cdot \begin{pmatrix} \kappa_{-2-\epsilon} & + & \kappa_3 \\ \kappa_{-2} & + & \kappa_{3-\epsilon} \end{pmatrix} \quad , \tag{D.1}$$

mit

$$\kappa_\lambda \equiv \kappa_\lambda(2x) = \int_1^\infty d\mathcal{Z}\, \mathcal{Z}^{\lambda-1}\, W^2(x\mathcal{Z}) \quad . \tag{D.2}$$

Einsetzen von (2.8b) in (D.2) ergibt

$$\kappa_\lambda(y) = \sum_{n=0}^{4} 2^n\, a_n\, \sigma_{\lambda,n}(y) \quad , \tag{D.3}$$

mit

$$\sigma_{\lambda,n}(y) = y^{-\lambda}\, \Gamma(\lambda - n, y) \tag{D.4}$$

und den Koeffizienten

$$a_0 = 1 \quad , \quad a_1 = 6 \quad , \quad a_2 = 15 \quad , \quad a_3 = 18 \quad , \quad a_4 = 9 \quad . \tag{D.5}$$

In (D.4) ist Γ die unvollständige Gamma-Funktion [36], deren asymptotisches Verhalten für $y \to \infty$ (D.4) bestimmt:

$$\sigma_{\lambda,n}(y) \to y^{-(n+1)}\, \mathrm{e}^{-y} \quad . \tag{D.6}$$

Das asymptotische Verhalten von $U^2(x) \sim \mathrm{e}^{2x}$ für $x \to \infty$ aus (2.8d) und (2.8b), führt mit dem $n = 0$ Term in (D.3) zu einem Beitrag $\sim x^{-\epsilon-1}$ im Integralkern von (D.1), der dann einen ϵ^{-1}-UV-Pol in $\mathcal{K}$ oder $\mathcal{L}$ verursacht. Alle anderen Terme mit $n > 0$ in (D.3) ergeben für $\epsilon \geq 0$ und $x \to \infty$ UV konvergente Beiträge zu (D.1).

Mit der Rekursionsformel [36]

$$\sigma_{\lambda,n-1}(y) - (\lambda - n)\, \sigma_{\lambda,n}(y) = y^{-n}\, \mathrm{e}^{-y} \tag{D.7}$$

ergibt sich nach Umformung

$$\begin{aligned}\kappa_{-2-\epsilon} &= \sigma_{-2-\epsilon,1}(y)\,\frac{\epsilon\,(6-\epsilon-\epsilon^2)}{(6+\epsilon)(4+\epsilon)} + \\ &+ \mathrm{e}^{-y}\left\{y^{-1}+y^{-2}\frac{12\,(18+5\epsilon)}{(6+\epsilon)(4+\epsilon)}+\left(y^{-3}+y^{-4}\right)\frac{144}{6+\epsilon}\right\} \qquad \text{(D.8)}\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\kappa_{3-\epsilon} &= \sigma_{3-\epsilon,3}(y)\,\frac{\epsilon}{1+\epsilon}\left(70-59\,\epsilon+14\,\epsilon^2-\epsilon^3\right) + \\ &+ \mathrm{e}^{-y}\left\{y^{-1}+y^{-2}(14-\epsilon)+y^{-3}(74-15\,\epsilon+\epsilon^2)+y^{-4}\frac{144}{1+\epsilon}\right\} \quad , \qquad \text{(D.9)}\end{aligned}$$

woraus sich κ_{-2} und κ_3 für $\epsilon = 0$ ergeben.
Die oben erwähnten UV divergenten Beiträge für $\epsilon = 0$ kommen von den Termen $\mathrm{e}^{-y}\,y^{-1}$ in (D.8) und (D.9). Für $0 < \epsilon < 3$ sind $\mathcal{K}$ und $\mathcal{L}$ endlich (polfrei), während bei $\epsilon = 3$, wegen $U^2(y \to 0) \sim y^6$ aus (2.8e), die Terme $\mathrm{e}^{-y}\,y^{-4}$ zu IR-Polen in (D.1) führen.

Aus den Gleichungen (D.1), (D.8) und (D.9) erhalten wir die ϵ-Entwicklung von

$$\mathcal{K}-\mathcal{L} = \epsilon\left(\frac{1}{8}J_A - 35J_B - \frac{1}{8}I_2 + \frac{11}{2}I_3 + 70I_4\right) + O\left(\epsilon^2\right) \quad , \qquad \text{(D.10)}$$

mit

$$J_{A,B} = \int_0^\infty dy\; U^2(y/2)\cdot\left[\,y^{-1}E_4(y)\;,\;y^{-3}E_1(y)\,\right] \quad , \qquad \text{(D.11)}$$

hier sind E_4 und E_1 Exponential-Integrale [31] und

$$I_n = \int_0^\infty dy\; U^2(y/2)\;\mathrm{e}^{-y}\,y^{-n} \quad . \qquad \text{(D.12)}$$

Die Werte der Integrale sind:

$$\begin{aligned} J_A &= \tfrac{70}{3}\ln 2 - \tfrac{145}{9} \quad , && \text{(D.13a)}\\ J_B &= \tfrac{2}{5}\ln 2 - \tfrac{199}{720} \quad , && \text{(D.13b)}\\ I_2 &= \tfrac{2}{5}\ln 2 - \tfrac{1}{5} \quad , && \text{(D.13c)}\\ I_3 &= -\tfrac{2}{5}\ln 2 + \tfrac{17}{60} \quad , && \text{(D.13d)}\\ I_4 &= \tfrac{4}{21}\ln 2 - \tfrac{11}{84} \quad , && \text{(D.13e)}\end{aligned}$$

und einsetzen in (D.10) ergibt das Resultat (4.15a).

Wir erhalten die Resultate (D.13) aus einer analytischen Fortsetzung der Integrale (D.11) und (D.12). Die Exponenten der Potenzen y^{-1}, y^{-3} in (D.11) und y^{-n} in (D.12) werden durch *kontinuierliche* konvergenzerzeugende (reelle) Exponenten θ ersetzt, und nach Ausführung der Integration analytisch fortgesetzt. So können z.B. die Exponential-Integrale (D.11) auf die Formeln (6.223) und (6.228) in Ref. [36] zurückgeführt werden.

Als Beispiel skizzieren wir die Berechnung von J_B. Wegen

$$U^2(x/2) = \left(\mathrm{e}^{x/2}P(-x/2) - \mathrm{e}^{-x/2}P(x/2)\right)^2 \quad , \tag{D.14a}$$

aus (2.8d), mit

$$P(x) = 1 + 3/x + 3/x^2 \quad , \tag{D.14b}$$

aus (2.8b), treten folgende Integrale auf

$$\int_0^\infty dx\, E_1(x)\, \mathrm{e}^x\, x^{-n} \quad , \quad n = 7, \ldots, 3 \tag{D.15a}$$

$$\int_0^\infty dx\, E_1(x)\, \mathrm{e}^{-x}\, x^{-n} \quad , \quad n = 7, \ldots, 3 \tag{D.15b}$$

$$\int_0^\infty dx\, E_1(x)\, x^{-m} \quad , \quad m = 3, 5, 7 \quad . \tag{D.15c}$$

Diese lassen sich durch die Relationen (5.1.1.1.) und (5.1.1.2) aus Ref. [31] auf die Formeln (6.223) und (6.228) in Ref. [36] zurückführen. Die in den Integralen (D.15) auftretenden Exponenten n müssen durch kontinuierliche Exponenten $n + \epsilon_n$ ersetzt werden und nach Berechnung der Integrale analytisch nach $\epsilon_n \to 0$ fortgesetzt werden, wie dies auch bei der Dimensionsregularisierung der Feynman-Integrale gemacht wird.
Nach ausmultiplizieren von (D.14a) läßt sich J_B in drei Terme zerlegen, die nach obigem Rezept berechnet werden können; und das Resultat ist
(i)

$$\sum_{n=0}^{4} a_n(-2)^n \int_0^\infty dx\, E_1(x)\, \mathrm{e}^x\, x^{\epsilon_n - 3 - n} = \frac{\pi\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon \sin \pi\epsilon} \sum_{n=0}^{4} a_n 2^n \left[\prod_{i=1}^{n+2}(\epsilon - i)\right]^{-1} \quad , \tag{D.16a}$$

unter Benutzung von (6.228) aus Ref. [36] und von

$$\Gamma(\epsilon - n - 2) = \Gamma(1+\epsilon) \Big/ \left[\prod_{i=0}^{n+2}(\epsilon - i)\right] \quad , \tag{D.16b}$$

(ii)

$$\sum_{n=0}^{4} a_n 2^n \int_0^\infty dx\, E_1(x)\, \mathrm{e}^{-x}\, x^{\epsilon - 3 - n} = 2^{3-\epsilon}\, \frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon} \sum_{n=0}^{4} a_n 2^{2n} \frac{F(1,1;\epsilon - n - 1; -1)}{(\epsilon - n - 2)\prod_{i=1}^{n+2}(\epsilon - i)} \, , \tag{D.17a}$$

ergibt sich aus (6.228) der Ref. [36].
Die Hypergeometrische-Funktion F läßt sich mit der Integraldarstellung aus (15.3.1) der Ref. [31]:

$$F(1,1;\epsilon - n - 1; -1) = (\epsilon - n - 2) \int_0^1 dt\, (1-t)^{\epsilon - n - 3}(1+t)^{-1} \tag{D.17b}$$

weiter umformen. Das Integral läßt sich in einen polfreien (regulären) Anteil und einen Polterm aufspalten; und eine anschließende ϵ-Entwicklung ergibt dann

$$\begin{aligned}
\int_0^1 dt\,(1-t)^{\epsilon-n-3}(1+t)^{-1} &= \int_0^1 dt\,(1-t)^{\epsilon-n-3}\left\{(1+t)^{-1}-\sum_{j=0}^{n+2}2^{-j-1}(1-t)^j\right\} \\
&\quad +\sum_{j=0}^{n+2}2^{-j-1}\int_0^1 dt\,(1-t)^{\epsilon-n-3+j} \\
&= 2^{-n-3}\left(\frac{1}{\epsilon}+\ln 2+\epsilon\, l\right)-\frac{1}{2}\sum_{j=0}^{n+1}2^{-j}\frac{1}{n+2-j} \\
&\quad -\frac{\epsilon}{2}\sum_{j=0}^{n+1}2^{-j}\frac{1}{(n+2-j)^2}+O(\epsilon^2) \quad ,
\end{aligned} \tag{D.17c}$$

mit

$$l=\int_0^1 dt\,\frac{\ln(1-t)}{(1+t)} \quad . \tag{D.17d}$$

(iii) Der dritte Beitrag zu J_B ist

$$\begin{aligned}
-2\int_0^\infty dy\,E_1(y)\,P(-y/2)P(y/2)\,y^{-3+\epsilon} &= -2\frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon(\epsilon-1)(\epsilon-2)}\left\{\frac{1}{\epsilon-2}\right. \\
&\quad -\frac{12}{(\epsilon-4)^2(\epsilon-3)} \\
&\quad \left.+\frac{144}{(\epsilon-6)^2(\epsilon-5)(\epsilon-4)(\epsilon-3)}\right\} \\
&\equiv T_3(\epsilon) \quad ,
\end{aligned} \tag{D.18}$$

nach Benutzung von (6.223) aus Ref. [31] und (D.16b).

Somit ergibt sich J_B aus (D.16a), (D.17a), (D.17b), (D.17c) und (D.18) zu

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dy\,E_1(y)\,U^2(y/2)\,y^{-3} &= \frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon}\sum_{n=0}^{4}a_n 2^n\frac{1}{\prod_{i=1}^{n+2}(\epsilon-i)}\left\{\frac{\pi}{\sin\pi\epsilon}\right. \\
&\quad +2^{3+n-\epsilon}\left[2^{-n-3}\left(\frac{1}{\epsilon}+\ln 2+\epsilon\, l\right)-\frac{1}{2}\sum_{j=0}^{n+1}2^{-j}\frac{1}{n+2-j}\right. \\
&\quad \left.\left.-\frac{\epsilon}{2}\sum_{j=0}^{n+1}2^{-j}\frac{1}{(n+2-j)^2}+O(\epsilon^2)\right]\right\} \\
&\quad -2\frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon(\epsilon-1)(\epsilon-2)}\left\{\frac{1}{\epsilon-2}-\frac{12}{(\epsilon-4)^2(\epsilon-3)}\right. \\
&\quad \left.+\frac{144}{(\epsilon-6)^2(\epsilon-5)(\epsilon-4)(\epsilon-3)}\right\} \quad .
\end{aligned} \tag{D.19}$$

Wegen des $1/\epsilon^2$-Pols muß zur Berechnung des endlichen Anteils der Faktor $\left[\prod_{i=1}^{n+2}(\epsilon - i)\right]^{-1}$ bis (einschließlich) zur Ordnung ϵ^2 entwickelt werden. Für alle übrigen Terme genügt eine Entwicklung bis $O(\epsilon)$. Unter Beachtung folgender Zwischenergebnisse

$$\sum_{n=0}^{4} a_n(-2)^n \prod_{i=1}^{n+2} \frac{1}{i} \sum_{j=0}^{2} \left(\frac{\epsilon}{i}\right)^j = \frac{\epsilon}{2}\left(\frac{1}{12} + \frac{29}{144}\epsilon\right) + O(\epsilon^3) \quad , \tag{D.20a}$$

$$\sum_{n=0}^{4} a_n(-2)^n \left(\prod_{i=1}^{n+2} \frac{1}{i}\right) 2^n \sum_{j=0}^{n+1} 2^{-j} \frac{1}{(n+2-j)^2} = \frac{59}{1800} \quad , \tag{D.20b}$$

$$\sum_{n=0}^{4} a_n(-2)^n \prod_{i=1}^{n+2} \frac{1}{i} = 0 \quad , \tag{D.20c}$$

$$4\sum_{n=0}^{4} a_n(-2)^n \left(\prod_{i=1}^{n+2} \frac{1}{i}\right) 2^n \sum_{j=0}^{n+1} 2^{-j} \frac{1}{j-n-2} = -\frac{2}{5} \quad , \tag{D.20d}$$

$$T_3(\epsilon) = \frac{\Gamma(1+\epsilon)}{\epsilon} \times \left\{\frac{19}{60} + \frac{133}{225}\epsilon + O(\epsilon^2)\right\} \quad , \tag{D.20e}$$

ergibt sich, nach ϵ-Entwicklung der rechten Seite von Gleichung (D.19), das Resultat (D.13b).

Literaturverzeichnis

[1] K. Binder, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editiert von C. Domb und J. L. Lebowitz (Academic Press, London), Band 8, S. 1 (1983).

[2] H. W. Diehl, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Ref. [1]), Band 10, S. 75 (1986).

[3] J. L. Cardy, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Ref. [1]), Band 11, S. 55 (1987).

[4] E. Eisenriegler, *Polymers near Surfaces* (World Scientific, Singapore, 1993).

[5] T. C. Lubensky und J. L. Rubin, Phys. Rev. B **12**, 3885 (1975).

[6] A. J. Bray und M. A. Moore, J. Phys. A **10**, 1927 (1977).

[7] T. W. Burkhardt und H. W. Diehl, Phys. Rev. B **50**, 3894 (1994).

[8] M. E. Fisher und P.-G. de Gennes, C. R. Acad. Sci. B **287**, 207 (1978).

[9] A. J. Liu und M. E. Fisher, Phys. Rev. A **40**, 7202 (1989).

[10] T. W. Burkhardt und J. L. Cardy, J. Phys. A **20**, L233 (1987).

[11] S. Dietrich und H. W. Diehl, Z. Phys. B **43**, 315 (1981).

[12] H. W. Diehl, S. Dietrich und E. Eisenriegler, Phys. Rev. B **27**, 2937 (1983).

[13] E. Eisenriegler, M. Krech und S. Dietrich, Phys. Rev. Lett. **70**, 619 (1993); **70**, 2051 (1993).

[14] E. Eisenriegler und M. Stapper, Phys. Rev. B **50**, 10009 (1994).

[15] H. W. Diehl und Martin Smock, Phys. Rev. B **47**, 5841 (1993).

[16] J. L. Cardy, Phys. Rev. Lett. **65**, 1443 (1990).

[17] K. Ohno und Y. Okabe, Phys. Rev. B **39**, 9764 (1989).

[18] (a) S. Leibler und L. Peliti, J. Phys. C **15**, L403 (1982); (b) E. Brézin und S. Leibler, Phys. Rev. B **27**, 594 (1983); (c) L. Peliti und S. Leibler, J. Phys. C **16**, 2635 (1983).

[19] (a) D. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena* (McGraw-Hill, New York, 1978); (b) E. Brézin, J. C. Le Guillou und J. Zinn-Justin in *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Ref. [1]), Band 6, S. 125 (1976); (c) J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1989).

[20] L. S. Brown, Ann. Phys. (NY) **126**, 135 (1980).

[21] J. L. Cardy, in *Fields, Strings and Critical Phenomena*, editiert von E. Brézin und J. Zinn-Justin, (North Holland, Amsterdam, 1990), S. 169.

[22] V. Privman, P. C. Hohenberg und A. Aharony, in *Phase Transition and Critical Phenomena* (Ref. [1]), Band 14, S. 1 (1991).

[23] K. Symanzik, Nucl. Phys. B **190**, 1 (1981).

[24] J. O. Indekeu, M. P. Nightingale und W. V. Wang, Phys. Rev. B **34**, 330 (1986).

[25] (a) J. Rudnick und D. Jasnow, Phys. Lett. **49**, 1595 (1982), (b) D. Jasnow, in *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Ref. [1]), Band 10, S. 269 (1986).

[26] D. M. McAvity und H. Osborne, Nucl. Phys. B **406**, 655 (1993).

[27] H. Nakanishi und M. E. Fisher, J. Chem. Phys. **78**, 3279 (1983).

[28] S.-K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (W.A. Benjamin, Inc., Massachusetts, 1976).

[29] E. Eisenriegler, J. Chem. Phys. **81**, 4666 (1984).

[30] J. L. Cardy, Nucl. Phys. B **240** [FS 12], 514 (1984).

[31] *Handbook of Mathematical Functions*, editiert von M. Abramowitz und I. A. Stegun (Dover, NY, 1972).

[32] A. A. Belavin, A. M. Polyakov und A. B. Zamolodchikov, Nucl. Phys. B **241**, 333 (1984).

[33] J. L. Cardy, Nucl. Phys. B **290** [FS 20], 355 (1987).

[34] J. C. Le Guillou und J. Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. **39**, 95 (1977).

[35] W. Walter, *Einführung in die Theorie der Distributionen* (Bibliographisches Institut, Zürich, 1974).

[36] I. S. Gradstein und I. M. Rhyshik, *Tables of integrals, series and products* (Academic Press, NY, 1965).

Ich danke Herrn Prof. Dr. E. Eisenriegler, der mir diese Arbeit ermöglicht hat. Unsere vielen Gespräche waren für mich sehr hilfreich.

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH

KFA

Jül-3096
Juli 1995
ISSN 0944-2952